

L'effet des fluctuations à courte portée sur la formation
du pseudogap à interactions fortes sur le réseau
triangulaire

par

Pierre-Olivier Downey

Au département de Physique
en vue de l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.)

FACULTÉ DES SCIENCES
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 7 juin 2022

Le 7 juin 2022

*le jury a accepté le mémoire de Monsieur Pierre-Olivier DOWNEY
dans sa version finale*

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Stefanos Kourtis
Membre Interne
Département de physique

Professeur Ion Garate
Président rapporteur
Département de physique

Résumé

Même après plus de 30 ans de recherche, le mécanisme d'appariement des électrons pour la supraconductivité à haute température n'est toujours pas connu. Une des voies privilégiées pour tenter de le comprendre est l'étude des phases environnantes, comme la phase pseudogap (PG). Bien que certaines formes du PG soient déjà bien comprises, celui des cuprates dopés aux trous reste une des plus grandes énigmes de la physique à ce jour. C'est autour de ce casse-tête que ce mémoire est construit.

De tous les mécanismes proposés pour expliquer la formation du PG, deux ont motivé notre recherche : la formation de singulets et la physique de Mott. Ces propositions par Sordi *et al.* [77] ont toutefois été sujettes à certaines critiques. L'utilisation d'un réseau carré, où l'antiferromagnétisme (AFM) à longue portée est techniquement possible, pourrait expliquer la formation du PG observé. De plus, la petite taille du réseau utilisé pourrait expliquer le lien apparent entre le PG et la physique de Mott. Pour vérifier ces hypothèses, nous utilisons un grand amas avec l'Approximation d'Amas Dynamiques / *Dynamical Cluster Approximation* (DCA) sur un réseau triangulaire, où les fluctuations de l'AFM à longue portée sont frustrés. De plus le réseau triangulaire représente un intérêt en soi puisque certains composés peuvent être modélisés sur ce réseau, comme par exemple les composés organiques supraconducteurs en couches.

Dans ce mémoire, nous prouvons que la ligne de Widom, qui est une conséquence des transitions de premier ordre se terminant par un point critique, n'est pas un artefact des petits amas. Nous montrons l'existence du PG au demi-remplissage, du côté dopé aux trous et du côté dopé aux électrons pour un réseau triangulaire. Nous établissons un lien entre tous ces PG et déduisons qu'ils ont une origine commune. Nous proposons que les fluctuations de l'AFM à courte portée ne sont peut être pas liées à la formation du PG et proposons plutôt un mécanisme impliquant l'ordre spiral à courte portée. Nous montrons aussi que le PG est lié à la physique de Mott et que la transition de Sordi, une transition de premier ordre entre le PG et un métal, n'en est qu'une conséquence. Nous démontrons également que la Singularité de Van Hove / *Van Hove Singularity* (VHS) n'est pas liée à la formation du PG. Nous finissons par proposer une méthode pour vérifier l'existence du PG dans de vrais matériaux.

Remerciements

J'aimerais d'abord et avant tout remercier mon professeur, André-Marie Tremblay, qui a su être patient avec moi et prendre le temps dont j'avais besoin pour comprendre tous ces concepts qui m'ont permis la réalisation de ce mémoire. L'essentiel de ma maîtrise a été faite durant les pires moments de la pandémie, mais malgré cela, il a su rassembler notre groupe derrière les «Café du midi», qui ont été ma plus grande source de social durant plusieurs mois et qui m'ont permis de garder ma motivation.

Je souhaite aussi remercier David Sénéchal, Claude Bourbonnais, Giovanni Sordi et Patrick Fournier pour les discussions intéressantes qu'on a eu et qui m'ont permises de réaliser un mémoire bien plus intéressant! Merci aux membres de mon comité de suivi, Ion Garate et Stefanos Kourtis, qui ont réussi à déchiffrer ce mémoire avant mon dépôt final, et même à proposer des ajouts intéressants qui m'ont aidé moi-même à mieux comprendre.

Je veux remercier Olivier Gingras, Maxime Charlebois et Charles-David Hébert pour leurs contributions au projet. Particulièrement dans le cas d'Olivier, malgré le fait qu'il avait une thèse à écrire, on a eu des discussions très intéressantes qui nous ont amenées à avoir l'idée de l'ordre spiral comme mécanisme de la formation du pseudogap dans le réseau triangulaire. Il a aussi su contribuer à l'écriture d'articles et à la réalisation de belles figures colorées (les figures 5.13 et 5.15).

Parlant de couleurs, j'aimerais souligner la contribution énorme de Chloé Gauvin-Ndiaye sur ce plan, car sans elle, la couleur de mes graphiques dans ce mémoire ne serait certainement pas aussi intéressante. J'aimerais aussi te remercier pour ton aide dans la compréhension du pseudogap et ta patience énorme avec mes questions que je te pose, même si tu y as sûrement déjà répondu dans un de tes séminaires où j'étais présent.

Bien que ça fasse un bon moment qu'on ne se soit pas vu, merci Nicolas Kowalski et Garance Cordonnier d'avoir été là. D'abord, Nico, pour ton aide dans la compréhension des cuprates et ton aide pour les cours, où on sait tous pourquoi je les ai si bien réussis. Ensuite, tous les deux pour les activités avec vous qui étaient littéralement mes activités bi-annuelles de la pandémie! J'espère qu'on pourra se brasser d'autres bières ensemble prochainement!

Je souhaite remercier Samuel Desrosiers et Ulrich Martel pour leur aide avant la présentation du séminaire, et les bières après. Aussi, message pour Charlotte Lenz, Maxime Doguet et Anastasia Fleury, prochaine fois que j'ai un gros document à écrire, je le ferai en anglais. Au moins je pourrais dire que c'est pas ma langue maternelle. Bref, merci!

Merci à ma famille, mes coloc et mes amis d'avoir été patients avec moi, et là dans les moments difficiles pour discuter, jouer à minecraft, tuer des zombies ou jouer à Among us. Pour finir, merci à Chouka, Noukie et June de m'avoir supporté comme vous avez su le faire si bien.

Table des matières

0	Acronymes	1
1	Introduction	3
1.1	Contexte historique	3
1.2	Les matériaux à électrons fortement corrélés	4
1.2.1	Cuprates et supra-conducteurs organiques	4
1.2.2	Les phases des supraconducteurs à haute température critique	5
1.3	Motivations	6
2	Théorie	9
2.1	Physique à N-corps	9
2.1.1	Fonction de Green et self-énergie	9
2.1.2	Modèle de Hubbard	12
2.2	Les phases	16
2.2.1	Isolant de Mott (MI)	16
2.2.2	Liquide de Fermi corrélé (cFL)	18
2.2.3	Pseudogap	19
2.3	Physique de Mott	20
2.3.1	Transition de Mott induite par la pression	21
2.3.2	Transition de Mott induite par le dopage	22
3	Méthodes	25
3.1	Théorie de Champ Moyen Dynamique (DMFT)	25
3.1.1	Modèle d'impureté d'Anderson	25
3.1.2	Fonction de Green locale \mathcal{G}_{loc}^σ , de l'impureté \mathcal{G}_{imp}^σ et libre \mathcal{G}_0^σ	26
3.1.3	Principe de la DMFT	28
3.2	Dynamical Cluster Approximation (DCA)	29
3.2.1	Construction de l'Amas	29
3.2.2	Modèle d'impureté d'Anderson pour amas	30
3.2.3	Invariance sous translation	31
3.2.4	Procédure de calcul	32
3.3	Monte Carlo Quantique en Temps Continu	32
3.3.1	Représentation d'interaction	33
3.3.2	Introduction aux techniques de CT-QMC	35
3.3.3	Monte Carlo en temps continu, en puissance des interactions (CT-INT)	37

3.3.4	Problème de signe	40
3.3.5	Monte Carlo en temps continu avec champ auxiliaire (CT-AUX) sur amas	42
4	Modèle	43
4.1	Hamiltonien et conventions	43
4.2	Implémentation de la DCA	44
4.2.1	Taille des amas	45
4.2.2	Periodicité des réseaux	45
4.2.3	Effet du choix des zones d'intégration	48
4.3	Observables	49
4.4	Définition des valeurs critiques	49
4.5	Algorithme de compilation des données	51
5	Résultats	53
5.1	Transition de Mott au demi-remplissage	53
5.1.1	Convergence des amas	53
5.1.2	Phases autour de la transition de Mott	56
5.1.3	Mécanisme proposé pour l'ouverture du pseudogap dans le réseau tri- angulaire.	60
5.2	Transition induite par dopage	62
5.2.1	Rôle des interactions locales sur l'apparition du pseudogap	62
5.2.2	Rôle des interactions à courte portée sur l'apparition du pseudogap à dopage fini	64
5.2.3	Physique de Mott	69
5.2.4	Singularité de Van Hove et Pseudogap	73
5.2.5	Prouver que le pseudogap existe dans le réseau triangulaire	73
6	Conclusion	79
S	Appendices	1
S.1	Modèle d'Hubbard sans interactions	1
S.2	Transformation particule-trou	4
S.3	Bipartité	9
S.4	Bistabilité	10
S.5	Diagrammes de phase décortiqués	11
S.6	Code de démarrage des calculs avec CTMO	12
S.7	Fichier de paramètre pour CTMO	14
S.8	Fenêtre de calcul et d'analyse des résultats	17

Table des figures

1.1	Exemples de cuprates et d'organiques	4
1.2	Diagramme de phase des cuprates et des organiques.	6
2.1	Simplification des cuprates	12
2.2	Différents exemples de réseaux, leur remplissage par rapport au potentiel chimique, le spectre à fréquence nulle en fonction du potentiel chimique, leur énergie et leur surface de Fermi	14
2.3	Division en deux sous-réseaux.	15
2.4	Phases dans un réseau carré près du demi-remplissage.	17
2.5	Du métal à l'isolant de Mott	18
2.6	Surface de Fermi pour le pseudogap dopé aux électrons et au trous	19
2.7	Spectre de la transition de Mott par pression en DMFT	21
2.8	Transition de Mott en DMFT et CDMFT par la pression	22
2.9	Transition par dopage pour différentes méthodes de calcul.	23
3.1	Auto-cohérence de la DMFT	28
3.2	Boucle de la DCA	32
3.3	Procédure générale pour un algorithme CT-QMC	35
3.4	Les vertex et les contractions de l'algorithme CT-INT	38
4.1	Amas utilisés pour la DCA	44
4.2	Bipartité des amas.	46
4.3	Tripartité des amas.	47
4.4	Réseaux de Betts.	48
4.5	Comportement critique de la double occupation.	50
4.6	Exemple de l'algorithme de compilation de données	52
5.1	La transition de Mott dépendante de la taille des amas.	54
5.2	Diagramme de phase du réseau triangulaire au demi-remplissage	57
5.3	Les points chauds et le ratio de poids spectral des zones au demi-remplissage	61
5.4	Un exemple de ce à quoi peut ressembler l'ordre spiral.	61
5.5	Transition par dopage pour la DMFT	63
5.6	Transition par dopage en DCA.	65
5.7	Dépendance en dopage des points chauds à $U = 0$	67
5.8	Ratio des spectres des zones 0 et 1 en dopage	68
5.9	Ratio des spectres des zones 1 et 3 en dopage.	69
5.10	Diagramme de phase $U - \mu$	70

5.11	Diagramme de phase $T - \mu$	72
5.12	VHS à différents U	74
5.13	Image rapprochée de la compressibilité $\partial n/\partial\mu$ dépendante de $U - \mu$	75
5.14	Remplissage et compressibilité pour différentes valeur de U	76
5.15	Image globale de la compressibilité $dn/d\mu$ dépendante de $U - \mu$	77
S.1	Différents exemples de réseaux	1
S.2	Division en deux sous-réseaux.	4
S.3	Effet de la bipartacité sur le réseau carré	10
S.4	Bistabilité dans la région $U_{c1} < U < U_{c3}$	11
S.5	Construction du diagramme de phase $T - \mu$	12
S.6	Construction du diagramme de phase $U - \mu$	12
S.7	Fenêtre d'accueil de l'application SC Access Program	17
S.8	Exemple de fenêtre de choix de l'application SC Access Program	18
S.9	Fenêtre de calcul et de graphique de l'application SC Access Program	18
S.10	Fenêtre de paramètre de l'application SC Access Program	19

Chapitre 0

Acronymes

- cFL** Liquide de Fermi corrélé / *correlated Fermi Liquid*
- PG** pseudogap
- MI** Isolant de Mott / *Mott insulator*
- AFM** antiferromagnétisme
- BEDT-TTF** bisethylenedithio-tetrathiafulvalene
- VHS** Singularité de Van Hove / *Van Hove Singularity*
- AIM** modèle d'impureté d'Anderson / *Anderson Impurity Model*
- CT-QMC** Monte Carlo Quantique en Temps Continu / *Continuous-Time Quantum Monte Carlo*
- CTMO** Multi-orbital en Temps Continu / *Continuous Time Multi-Orbital*
- DMFT** Théorie de Champs Moyen Dynamique / *Dynamical Mean Field Theory*
- CDMFT** Théorie de Champs Moyen Dynamique pas Amas / *Cluster Dynamical Mean Field Theory*
- DCA** Approximation d'Amas Dynamiques / *Dynamical Cluster Approximation*
- FET** Transistor par Effet de Champs / *Field-Effect Transistor*
- DOS** Densité d'État / *Density of States*

Chapitre 1

Introduction

1.1 Contexte historique

En 1937, Jan Hendrik de Boer et Evert Johannes Willem Verwey remarquent un comportement étrange dans un oxyde de nickel ^[16] : il se trouve qu'il est métallique à température ambiante, mais isolant à plus basse température. Ce qu'il y a de plus surprenant, c'est que son nombre impair d'électrons par cellule unité en fait un matériel que la théorie des bandes prédirait comme un métal, il est donc prédit que ce matériel devrait être métallique selon la théorie des bandes. La même année, Nevill Mott propose pour la première fois que la répulsion électronique des électrons pourrait en être la cause ^[61].

C'est toutefois en 1949 que Mott arrive avec une théorie plus détaillée sur le sujet ^[60]. Il explique que dans les matériaux sans dégénérescence de spin, les endroits avec une paire d'électrons et ceux sans électrons se lient ensemble, empêchant un matériel de conduire le courant. Pour cette raison, nous l'appelons maintenant l'Isolant de Mott / *Mott insulator* (**MI**).

En 1963, il est enfin possible de modéliser de façon précise le **MI**. Hubbard introduit alors un modèle simple considérant les interactions locales en plus de l'énergie cinétique des électrons ^[39]. Ce modèle connaît un succès énorme, permettant de mieux comprendre le **MI**, et, bien plus tard, les supraconducteurs à haute température critique.

En 1979, la supraconduction dans des composés organiques est découverte ^[43], puis, en 1986, un état supraconducteur à haute température est découvert dans les cuprates ^[5]. En apparence, ces deux types de matériaux semblent différents, mais dans les deux cas, leur état supraconducteur ne peut être expliqué par l'usuelle théorie de couplage électron-phonon ^[25,36], appelé théorie BCS. La compréhension actuelle du mécanisme expliquant la supraconductivité dans ces matériaux est floue, toutefois, le modèle d'Hubbard semble très prometteur dans la description de ce type de matériaux ^[26]. N'étant pas un modèle soluble exactement dans un cas avec interactions, plusieurs techniques de calcul ont été créées pour capturer l'essentiel du problème, comme la Théorie de Champs Moyen Dynamique / *Dynamical Mean Field Theory* (**DMFT**), la Théorie de Champs Moyen Dynamique pas Amas / *Cluster Dynamical Mean Field Theory* (**CDMFT**) et la **DCA** (Dynamic Cluster Approximation), pour en nommer quelques-unes.

Malgré les avancées qui ont été réalisées dans les dernières années dans la compréhension

de la supraconduction, plusieurs problèmes restent irrésolus. Une avenue actuellement explorée est l'étude des phases qui entourent la supraconduction. Dans le cadre de ce mémoire, nous étudierons plus particulièrement le **PG**.

1.2 Les matériaux à électrons fortement corrélés

Les supra-conducteurs à haute température critique sont communément divisés en plusieurs classes, dont les organiques et les cuprates. Ces deux classes de matériaux ont pour points communs d'être en 2D ou quasi-2D et d'avoir des électrons fortement corrélés [97], des caractéristiques à l'origine de phénomènes complexes. C'est dans ces matériaux qu'on retrouve le **MI** [44,50], le **PG** [44,50] et la supraconductivité [50,66]. Les diagrammes de phase de la figure 1.2 nous montrent comment ces phases compétitionnent dans ces matériaux. Avant de tenter de comprendre pourquoi ces matériaux expriment ces comportements, décrivons les sommairement.

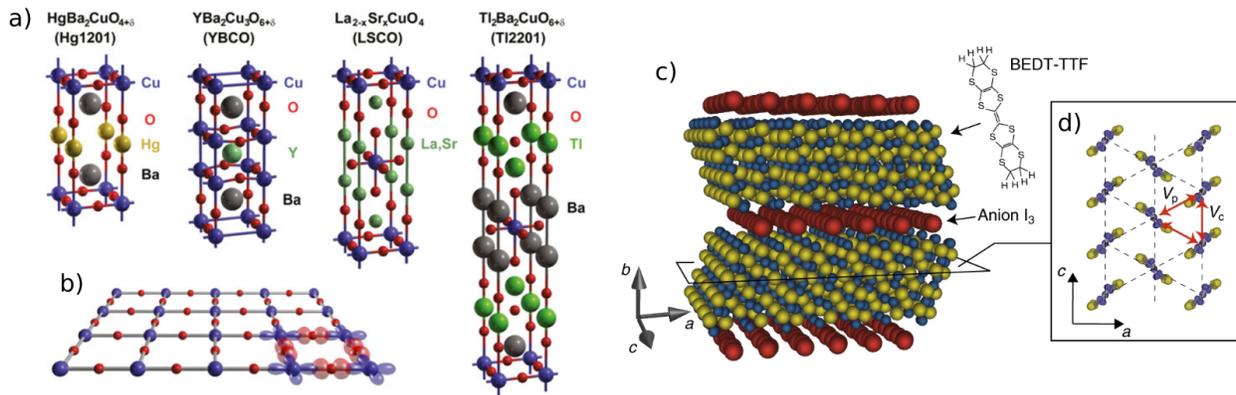


FIGURE 1.1 – a) Quelques exemples de cuprates. b) plan de CuO_2 des cuprates. c) Exemple d'un supra-conducteur organique, le $\theta\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{I}_3$. d) Couche bi-dimensionnelle de bisethylenedithio-tetrathiafulvalène (**BEDT-TTF**). a-b) sont tirées de la référence [4], alors que c-d) sont tirés de [73].

1.2.1 Cuprates et supra-conducteurs organiques

Commençons par une description des cuprates. Cette classe de matériaux pour laquelle nous montrons quelques exemples à la figure 1.1 a) a pour caractéristique d'avoir des plans de CuO_2 séparés par des couches isolantes qui agissent comme un bain d'électrons avec lequel le plan de cuivre-oxygène peut faire des échanges. Sur la figure 1.2 b), on voit ce plan de cuivre et oxygène, et en a), de quelle façon ces plans sont séparés les uns des autres. C'est en choisissant ce qu'on y met qu'on peut choisir le nombre d'électrons disponibles pour les couches de CuO_2 , et donc, le dopage de notre matériel.

Les supraconducteurs organiques se distinguent en partie par leur composition. On les forme normalement avec des plans d'halogène et de **BEDT-TTF**, les uns sur les autres en couches, comme on le voit à la figure 1.2 c). La couche de **BEDT-TTF** est composée de dimères, tel qu'on le voit à la figure 1.2 d), formés par un lien covalent entre deux monomères

délivrant 1/2 électrons chaque aux plans d'halogène, en faisant un plan d'anions ^[74]. On peut ainsi obtenir des matériaux avec un électron de valence sur chacun des dimères, ce qui en fait des matériaux normalement sans dopage.

Ces deux classes de supraconducteurs ont chacune leurs propriétés et avantages. Par exemple, dans les cuprates, changer la concentration en électrons sur les plans de CuO_2 est relativement simple, mais changer cette même concentration dans les dimères des organiques est une opération pratiquement impossible. Changer la concentration en électron ou toute autre propriété thermodynamique d'un matériel à électrons fortement corrélés peut amener à plusieurs comportements différents de la part du matériel. Sur la figure 1.2 a), on peut observer les différentes phases de la matière dans les cuprates lorsque la concentration en trous ou en électrons est modifiée.

Les organiques ont l'avantage d'être mous, ce qui permet de facilement changer le pas de leur réseau avec de la pression, contrairement aux cuprates. Ainsi, en augmentant la pression, il est possible de passer, par le moyen d'une transition de premier ordre, d'un isolant à un supraconducteur, comme on peut le voir à la figure 1.2 b).

Une dernière différence est au niveau de la forme du réseau. Les cuprates sont strictement limités à des réseaux carrés, alors que les organiques sont généralement des réseaux triangulaires. Cette différence de géométrie a des implications sur la frustration des électrons, et donc, sur l'existence même de la phase d'AFM, une phase qui prend une part importante des diagrammes de phase des figures 1.2 a) et b).

1.2.2 Les phases des supraconducteurs à haute température critique

Nous avons vu jusqu'ici que ces matériaux expriment une foule de phases différentes, sans expliquer en quoi elles consistent. Nous en parlerons plus en détails à la section 2.2 pour les phases MI, PG et Liquide de Fermi corrélé / *correlated Fermi Liquid* (cFL), mais, afin de justifier l'utilité de ce mémoire, nous présentons dans cette sous-section ce qui caractérise principalement toutes les phases observées à la figure 1.2, on a

Isolant de Mott On définit normalement le MI par son caractère isolant, étant particulièrement un isolant dû aux interactions dans un matériel, et non dû à la structure des bandes. On retrouve le MI dans les cuprates quand le dopage est nul, ou dans les organiques à l'état fondamental quand la pression est faible. Une de ses caractéristiques, similaire à n'importe quel isolant, est l'absence de surface de Fermi.

Antiferromagnétisme L'AFM est une caractéristique de l'état fondamentale des cuprates et des organiques pas trop frustrés⁰. C'est un anti-alignement des spins voisins dans le matériel.

0. On définit la frustration comme une mesure de la difficulté d'obtenir un état d'ordre AFM colinéaire. Dans un état où la frustration est maximale, un Hamiltonien posant qu'il est avantageux d'avoir des spins voisins anti-alignés, imposera un état fondamental fortement dégénéré.

Liquide de Fermi corrélé Le **cFL** est un état dans lequel nous allons inclure plusieurs phases différentes, particulièrement le métal étrange et le métal normal. Ces deux métaux se distinguent par la présence de quasi-particules et d'une surface de Fermi bien définie. Selon la définition de la référence [17], ce sont de bons métaux.

Pseudogap La définition du **PG** est souvent elle-même débattue, d'autant plus qu'on peut classer le **PG** dans plusieurs catégories, le **PG** à interactions faibles et celui à interactions fortes. Ces **PG** ont pour point commun une perte de poids spectral qui dépend du vecteur d'onde. On comprend alors qu'un **PG** est associé à une disparition non-uniforme de la surface de Fermi. On retrouve cette phase dans plusieurs contextes, par exemple dans les cuprates dopés aux trous, dopés aux électrons et à forte pression dans les organiques faiblement frustrés, quoiqu'encore sujet à débat pour les deux derniers.

Supraconducteur La supraconduction est la phase pour laquelle la résistivité électrique devient nulle. Cette phase est souvent vue comme le centre d'intérêt dans la recherche sur la matériaux à électrons fortement corrélés, étant présente tant pour les organiques sous haute pression, ou les cuprates dopés. Toutefois, cette phase ne sera pas le point central de recherche dans ce mémoire.

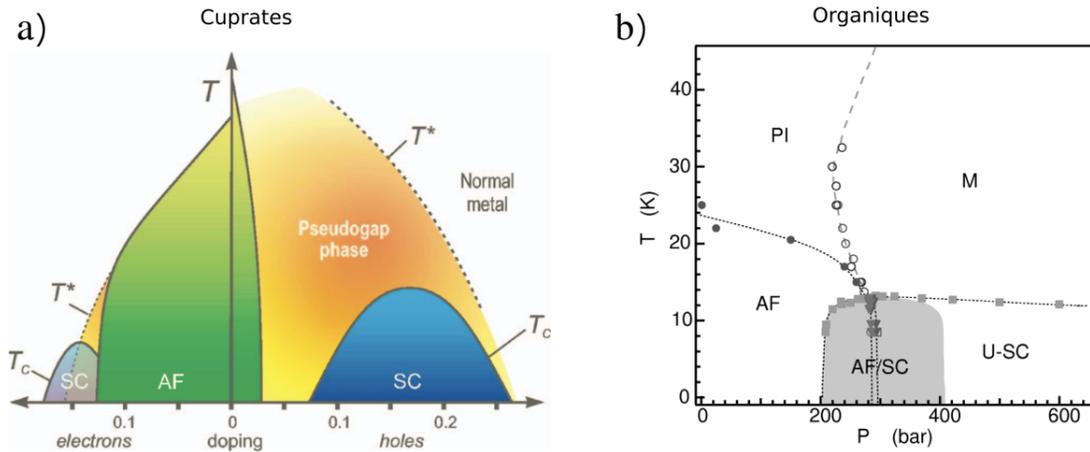


FIGURE 1.2 – a) Diagramme de phase des cuprates en température et dopage. Cette figure est tirée de la référence [20]. b) Diagramme de phase d'un supraconducteur organique en pression et température, qu'on retrouve à la référence [51]. Dans ce mémoire, la phase PI correspond au **MI**.

1.3 Motivations

Le travail dans ce mémoire s'inscrit précisément dans la quête d'une meilleure compréhension du **PG** à fort couplage, soit celui qu'on retrouve dans les cuprates dopés aux trous. Dans le but de comprendre cette phase, il faudra d'abord décrire l'évolution d'un système à électrons fortement corrélé. On introduira pour cela les fonctions de Green et la self-énergie à la section 2.1.1. Par la suite, à la section 2.1.2, les cuprates seront simplifiés en un modèle

qui permettra de décrire la physique de ces matériaux : le modèle de Hubbard à une bande. Cette base sur la physique à N-corps sera suffisante pour étudier l'état de l'art de la physique de Mott et des phases qui nous intéresseront, respectivement aux sections 2.3 et 2.2. Cette étude nous permettra de comprendre les principales théories derrière la formation du PG à interactions fortes, puis de vérifier si le PG est lié à la physique de Mott et aux fluctuations de l'AFM à courte portée. L'essentiel du travail de ce mémoire sera de vérifier ces propositions.

Pour cela, nous devons résoudre le modèle de Hubbard à deux dimensions, seulement soluble exactement dans les cas sans interactions. Afin de résoudre le problème, nous introduirons au chapitre 3 deux techniques de calcul, soit, la DMFT et la DCA, en plus d'introduire les solveurs d'impureté. Armé de ces techniques de calcul, nous définirons notre Hamiltonien, notre réseau et nos amas au chapitre 4. Au chapitre 5, nous présenterons alors nos résultats. Ceux-ci seront divisés en deux parties principales : les résultats au demi-remplissage et ceux dopés.

Chapitre 2

Théorie

2.1 Physique à N-corps

2.1.1 Fonction de Green et self-énergie

Dans cette sous-section, nous cherchons à décrire le mouvement de particules qui interagissent entre elles. Pour ce faire, nous introduirons les fonctions de Green retardée et de Matsubara, en plus de présenter la self-énergie pour prendre en compte les interactions.

Fonction de Green retardée G^R

Nous avons besoin d'une fonction afin de pouvoir suivre l'évolution des électrons dans le matériel. Cette fonction devrait nous donner l'amplitude qu'un électron à un endroit \mathbf{r}' à un temps t' se déplace vers un endroit \mathbf{r} à un temps t . Pour des raisons de simplicité, nous utiliserons $k_B = \hbar = 1$. Dans ce contexte, nous définissons la fonction de Green retardée

$$G^R(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t')\langle \mathbf{r} | e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle, \quad (2.1)$$

où θ est la fonction Heaviside, et $e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')}$ est l'opérateur d'évolution avec l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$. Nous pouvons écrire

$$G^R(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t')\langle 0 | \Psi(\mathbf{r}) e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} \Psi^\dagger(\mathbf{r}') | 0 \rangle, \quad (2.2)$$

$$= -i\theta(t - t')\langle 0 | \Psi(t, \mathbf{r}) \Psi^\dagger(t', \mathbf{r}') | 0 \rangle, \quad (2.3)$$

où $|0\rangle$ est l'état fondamental du système et où $\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t)$ et $\Psi(\mathbf{r}, t)$ sont les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron à la position \mathbf{r} à un temps t . Pour des raisons de simplicité, nous ne prendrons pas en compte le spin ici. Pour que l'équation 2.3 soit valide, nous avons dû inclure l'antisymétrie quantique et l'indiscernabilité des fermions dans l'état fondamental $|0\rangle$. Ces propriétés peuvent être explicitées par l'utilisation d'un anticommutateur dans la définition de la fonction de Green. Nous adopterons donc la définition

$$\begin{aligned} G^R(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') &= -i\theta(t - t')\langle 0 | \left\{ \Psi(t, \mathbf{r}), \Psi^\dagger(t', \mathbf{r}') \right\} | 0 \rangle, \\ &= -i\theta(t - t')\left\langle \left\{ \Psi(t, \mathbf{r}), \Psi^\dagger(t', \mathbf{r}') \right\} \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.4)$$

avec $\langle . \rangle$ la moyenne thermodynamique pour généraliser le tout à température non-nulle et aussi pour le cas à N-particules. Dans le but d'adapter la fonction de Green au problème d'électrons dans un réseau cristallin, nous pouvons faire plusieurs transformations. D'abord, posons une référence de temps $t' = 0$. Ensuite, effectuons un changement de base tel que $\Psi^\dagger(t, \mathbf{r}) = \sum_i c_i^\dagger(t) \langle i | \mathbf{r} \rangle$ où i est l'indice d'un site du réseau et $c_i^\dagger(t)$ est le nouvel opérateur de création d'électrons. La dernière transformation consiste à considérer que le problème est invariant sous translation, et qu'on peut donc faire une transformée de Fourier pour aller dans l'espace réciproque. Nous avons donc

$$G^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ \Psi(t, \mathbf{r}), \Psi^\dagger(0, \mathbf{r}') \right\} \right\rangle, \quad (2.5)$$

$$G^R(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ c_i(t), c_i^\dagger(0) \right\} \right\rangle, \quad (2.6)$$

$$G^R(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ c_{\mathbf{k}}(t), c_{\mathbf{k}}^\dagger(0) \right\} \right\rangle, \quad (2.7)$$

où $c_{\mathbf{k}}(t)$ et $c_{\mathbf{k}}^\dagger(t)$ sont les opérateurs d'annihilation et de création d'un électron de vecteur d'onde \mathbf{k} au temps t . Ainsi, nous définissons le poids spectral $A(\mathbf{k}, t)$ comme

$$G^R(\mathbf{k}, t) = -i\theta(t) A(\mathbf{k}, t). \quad (2.8)$$

En faisant la transformée de Fourier en temps, nous avons

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + i\eta - \omega'}, \quad (2.9)$$

où $i\eta$, une toute petite partie imaginaire, sert à assurer la causalité. À partir d'ici, en utilisant le théorème de Sokhatsky-Weierstrass ^[85], nous trouvons que

$$-2\text{Im}(G^R(\mathbf{k}, \omega)) = A(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.10)$$

un résultat que nous utiliserons à plusieurs reprises dans les sections et chapitres suivants.

Fonction de Green de Matsubara $\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$

Maintenant, introduisons la fonction de Green de Matsubara

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau - \tau') = -\langle T_\tau \Psi(\mathbf{r}, \tau) \Psi^\dagger(\mathbf{r}, \tau') \rangle, \quad (2.11)$$

où $\tau = it$ est le temps imaginaire, que nous traiterons comme réel, et T_τ est l'opérateur d'ordre temporel, qui force la causalité. En supposant l'invariance sous translation dans l'espace, nous pouvons regarder cette fonction à partir de l'espace réciproque

$$G(\mathbf{k}, \tau - \tau') = -\left\langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau') \right\rangle. \quad (2.12)$$

Une des propriétés de la fonction de Green de Matsubara est d'être antipériodique sur l'intervalle $[0, \beta = 1/T[$. Cela signifie que

$$G(\mathbf{k}, \tau) = -G(\mathbf{k}, \tau + \beta) \quad ; \quad -\beta < \tau < 0. \quad (2.13)$$

Cette propriété nous permet de faire une transformée de Fourier pour obtenir une fonction de Green en fréquences de Matsubara

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} G(\mathbf{k}, \tau), \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\mathbf{k}, \omega')}{i\omega_n - \omega'},\end{aligned}\tag{2.14}$$

où $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$. Nous constatons ici que les équations 2.9 et 2.14 se ressemblent. En fait, elles sont reliées par la seule limite $G^R(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$.

Self-énergie Σ

Afin de prendre en compte les interactions, nous introduisons la self-énergie Σ par l'équation de Dyson :

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G,\tag{2.15}$$

où G est la fonction de Green et G_0 est la fonction de Green sans interactions. Si nous multiplions à gauche par G_0^{-1} et à droite par G^{-1} , nous avons

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma,\tag{2.16}$$

une fonction que nous pouvons expliciter en fonction du vecteur d'onde \mathbf{k} et de la fréquence ω

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)},\tag{2.17}$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}}$ est l'énergie dépendante du vecteur d'onde dans le cas sans interactions et μ est le potentiel chimique. Σ^R est la self-énergie retardée. Nous n'avons par ailleurs plus besoin de $i\eta$ puisque la partie imaginaire de la self-énergie est toujours négative. Nous pouvons interpréter la self-énergie de la façon suivante : sa partie réelle correspond au déplacement en énergie à un vecteur d'onde donné, alors que sa partie imaginaire est le taux de diffusion des électrons, à un signe près. On peut maintenant lier la fonction de Green en fréquences de Matsubara avec la self-énergie :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}\tag{2.18}$$

Les raisons qui nous poussent à chercher ces dernières fonctions en fréquence de Matsubara ou en temps imaginaire peuvent sembler floues pour le moment, particulièrement parce qu'elles sont difficiles à interpréter physiquement. Toutefois, pour faire des calculs, elles sont plus simples d'utilisation, la raison pour laquelle nous en avons mis l'accent.

2.1.2 Modèle de Hubbard

Simplifier le problème

L'étude expérimentale des matériaux fortement corrélés ne permet pas toujours d'isoler les causes menant à certains phénomènes intéressants. C'est là que l'élaboration d'un modèle théorique devient utile.

Il nous faut un Hamiltonien pour décrire les degrés de liberté les plus importants pour la physique de ces matériaux. Nous utiliserons le modèle de Hubbard. Afin de simplifier notre modèle, négligeons les plans isolants des cuprates et des organiques. Dans les cuprates, nous considérons que chaque cellule unité comporte trois orbitales, l'orbitale d du cuivre et les orbitales p_x, p_y des deux oxygènes. Il n'y a toutefois qu'une des trois bandes résultantes qui passe près du niveau de Fermi [65]. En se limitant à cette bande, qui suffit à décrire la majorité des phénomènes présents dans les cuprates, la cellule unité de cuivre et de dioxygène des cuprates ne devient alors qu'un seul et même site, comme nous le voyons à la figure 2.1. Pour un organique, un dimère devient un site.

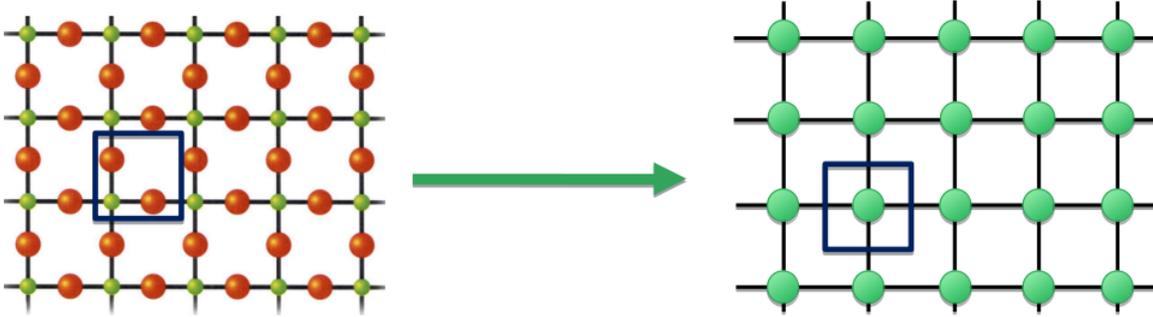


FIGURE 2.1 – Simplification des cuprates par la simplification de la cellule unité. À gauche, les sites de cuivre sont en vert et les sites d'oxygène sont en orange. Cette figure est tirée de la référence [14]. À droite, c'est une cellule unité dans le modèle de Hubbard à une bande.

Nous étudierons donc plus en profondeur le modèle de Hubbard à une bande. Écrit dans le langage de la seconde quantification, nous avons

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \quad (2.19)$$

où $c_{i\sigma}^\dagger$ et $c_{i\sigma}$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation des électrons de spin σ agissant sur le site i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ correspond à l'opérateur de nombre qui compte le nombre d'électrons au site i de spin σ , U est le coût en énergie pour que deux électrons soient au même endroit, μ est le potentiel chimique et t_{ij} est le terme de saut entre un site i et un autre j . Le symbole $\langle i, j \rangle$ indique l'ensemble des site i avec leur voisins j .

Le paramètre t_{ij} du modèle de Hubbard assure de considérer l'effet tunnel entre les sites. Ce paramètre est un nombre réel. Ce terme vient de l'énergie cinétique. Par l'exclusion de Pauli, il n'est possible d'avoir deux électrons sur le même site que s'ils ont un spin opposé. Lorsque cela se produit, il faut considérer que ceux-ci se repoussent naturellement par la

répulsion coulombienne écrantée, prise en compte par le paramètre U . Puisqu'on parle de répulsion, U doit être un nombre positif.

Ici, pour l'étude du modèle, nous considérerons trois réseaux différents, tous représentés à la figure 2.2 1), où seulement les termes saut au premier voisin t et les termes saut au second voisin t' sont considérés.

Modèle de Hubbard sans interactions

Commençons d'abord par l'étude des trois réseaux de la figure 2.2 1) dans le cas sans interactions ($U = 0$). Les calculs pour la diagonalisation des Hamiltoniens sont explicités à l'annexe S.1. Nous avons

$$\epsilon_{TC}(\mathbf{k}) = -2 \left(t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) + t' \cos(k_x + k_y) \right), \quad (2.20)$$

$$\epsilon_T(\mathbf{k}) = -2t \left(\cos k_x + \cos \left(\frac{1}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y \right) \right) - 2t' \cos \left(\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y \right), \quad (2.21)$$

$$\epsilon_C(\mathbf{k}) = -2 \left(t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) + t'(\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)) \right), \quad (2.22)$$

où, par rapport à la figure 2.2, E_{TC} est l'énergie pour a), E_T est l'énergie de b), et E_C est l'énergie de c). Nous avons aussi introduit t et t' , respectivement les termes de saut au premier et deuxième voisin. À partir de ces résultats, nous pouvons facilement déduire tout ce qui est montré à la figure 2.2. Nous n'entrerons pas dans les détails de cette figure puisque ce ne sont que quelques exemples pour nous aider à comprendre tout le reste de ce mémoire, mais quelques points doivent être sommairement abordés.

D'abord, les résultats du remplissage $n(\mu)$ et de la Densité d'État / *Density of States* (DOS) ne changent pas en fonction de la base choisie, pour autant que la topologie du réseau soit la même. Cette particularité est visible dans la comparaison des résultats des deux réseaux triangulaires. Nous nous attendons à avoir un résultat similaire pour le cas avec interactions.

Aussi, peu importe le réseau que nous utilisons, la VHS apparaît. En 3), elle apparaît comme un pic clair dans la densité d'état, peu importe la frustration du réseau. Nous nous servirons de ce concept plus tard.

Modèle de Heisenberg

Dans un cas où les interactions sont très fortes dans le modèle de Hubbard, c'est-à-dire quand $U \gg t$, nous pouvons déduire à partir de la théorie des perturbations au deuxième ordre un Hamiltonien de style Heisenberg au demi-remplissage. Considérons $t' = 0$

$$H_{eff} = \sum'_{\langle i,j \rangle} J \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right)$$

où $\sum'_{\langle i,j \rangle}$ est la somme sur les voisins et où chaque lien n'est compté qu'une seule fois, $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} S_{i,\sigma} S_{j,-\sigma}$, et $J = 4t^2/U$ est le terme de superéchange entre deux sites.

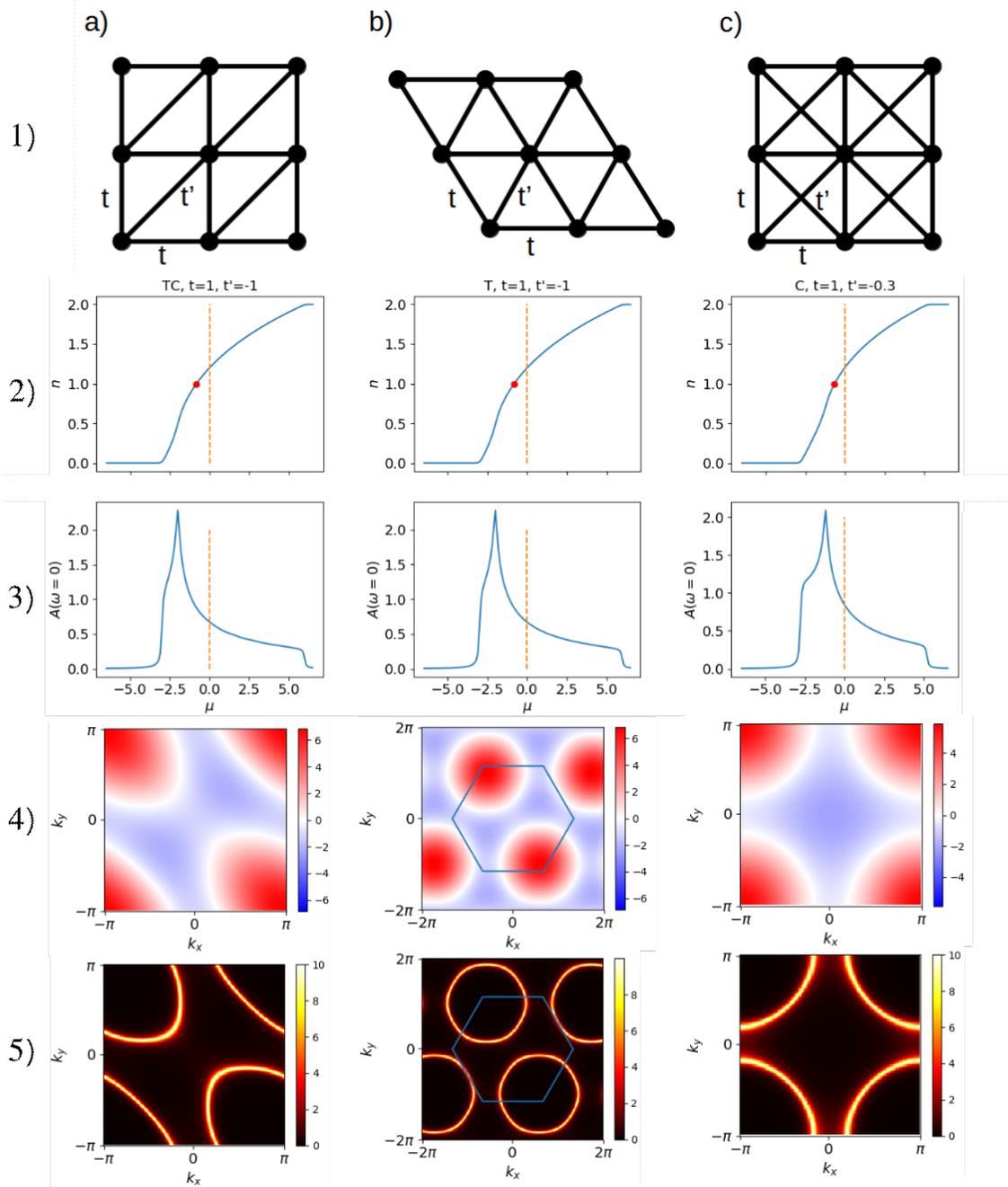


FIGURE 2.2 – Différents résultats qu'il est possible de d'obtenir avec différents réseaux dans le modèle de Hubbard. a) Réseau triangulaire à base carrée b) Réseau triangulaire à base triangulaire, c) Réseau carré frustré. 1) Le type de réseau utilisé, 2) le remplissage selon le potentiel chimique (le point rouge est le demi-remplissage), 3) le poids spectral à fréquence nulle en fonction du potentiel chimique μ , 4) l'énergie en fonction du vecteur d'onde \mathbf{k} , 5) la surface de Fermi. Tous ces résultats sont dans le cas sans interactions. Les réseaux triangulaires ont un t' de -1 , alors que le réseau carré a plutôt un $t' = -0.3$ dans le but de représenter les cuprates. Pour chacun des résultats en vecteur d'onde, le potentiel chimique est ajusté pour être au demi-remplissage. Pour le réseau b), la zone de Brillouin en 4) et 5) est hexagonale.

Ce modèle, bien que très simple, a des implications importantes et intéressantes. En effet, nous pouvons en conclure qu'au demi-remplissage, l'état fondamental d'un tel modèle doit être **AFM** pour minimiser l'énergie d'un réseau avec peu de frustration. Nous nous servirons de ce résultat pour comprendre l'état fondamental du **MI**.

Modèle de Hubbard avec interactions

Dans le cas où nous introduisons des interactions dans le modèle de Hubbard, il n'est plus possible d'avoir des résultats exacts comme ceux montrés à la section précédente. Il devient alors intéressant de pouvoir maximiser la portée de nos résultats par quelques connaissances comme la transformation particule-trou, étudiée en détail à l'annexe **S.2**.

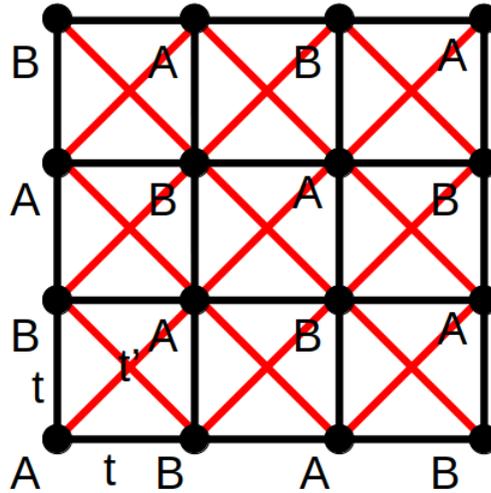


FIGURE 2.3 – Division d'un réseau principal de dimension infini en deux sous-réseaux, A et B. La même chose pourrait être faite pour un réseau triangulaire anisotrope, mais pas pour le réseau triangulaire, à moins de le considérer comme un limite où $t' = t$ de la figure 2.21a),1b). Les lignes noires relient des sous-réseaux différents et les lignes rouges relient un mêmes sous-réseau.

Transformation particule-trou Dans les cas où il est possible de diviser un réseau en deux sous-réseaux, comme à la figure 2.3, nous pouvons déduire plusieurs propriétés intéressantes du Hamiltonien de Hubbard. Une de celles-ci est la transformation particule-trou. Pour la trouver, utilisons le Hamiltonien

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (2.23)$$

où la somme sur $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ fait référence à tous les j qui sont des seconds voisins à i . À partir de ce point, nous effectuons la transformation

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^\dagger &\rightarrow d_{i,-\sigma}(-1)^l \\ c_{i,\sigma} &\rightarrow d_{i,-\sigma}^\dagger(-1)^l \end{aligned}$$

où l est l'indice du sous-réseau. Nous obtenons alors le Hamiltonien transformé

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} - (-t') \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U \sum_i D_{i,\downarrow} D_{i,\uparrow} - (U - \mu) \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} \quad (2.24)$$

où $D_{i,\sigma}$ est le nombre de trous de spin σ au site i et où une constante a été enlevée puisque l'énergie est définie à une constante près. De tout ça, nous comprenons que

1. si nous changeons $t' \rightarrow -t'$, nous retrouvons la forme du Hamiltonien original. Mais comme il faut aussi faire la même transformation sur les observables, ceci implique que $n \rightarrow 2 - n$, $\mu \rightarrow U - \mu$ et $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + (\pi, \pi)$.
2. En général, la transformation $t \rightarrow -t$ peut être compensée par un déplacement de l'origine de la zone de Brillouin $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + (\pi, \pi)$.

Les conséquences d'un tel changement s'étendent aussi à la fonction de Green et au poids spectral. Sous la transformation particule-trou,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) &\rightarrow -(\mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n))^* \\ A_{\mathbf{k}}(\omega) &\rightarrow A_{\mathbf{k}}(-\omega). \end{aligned}$$

Dans le cas d'un réseau non frustré, c'est-à-dire avec $t' = 0$, nous pouvons trouver quelques symétries très utiles. Particulièrement, nous pouvons prédire le potentiel chimique pour lequel nous aurons le demi-remplissage, $\mu = U/2$. Ceci découle d'une particularité des réseaux carrés avec $t' = 0$, soit une symétrie parfaite entre le côté dopé aux trous et dopé aux électrons.

2.2 Les phases

À la section 1.2, nous avons rapidement mentionné l'existence de plusieurs phases en compétition dans les cuprates et les organiques. Dans cette section, nous les ré-introduisons avec bien plus de détails et avec une base théorique du modèle de Hubbard, ce qui nous permettra de mieux les comprendre. Concentrons-nous sur trois phases centrales à la réalisation de ce mémoire : le **MI**, le **cFL** et le **PG**. Reprenant les résultats de Sordi à la référence [77], nous étudierons principalement la figure 2.4.

2.2.1 Isolant de Mott (MI)

Contrairement aux isolants plus classiques, la structure de bande d'un **MI** n'est pas la cause de son comportement isolant. En effet, lorsqu'il reste un électron de valence par site, les fortes interactions locales U peuvent forcer les électrons à se localiser sur des sites, ouvrant

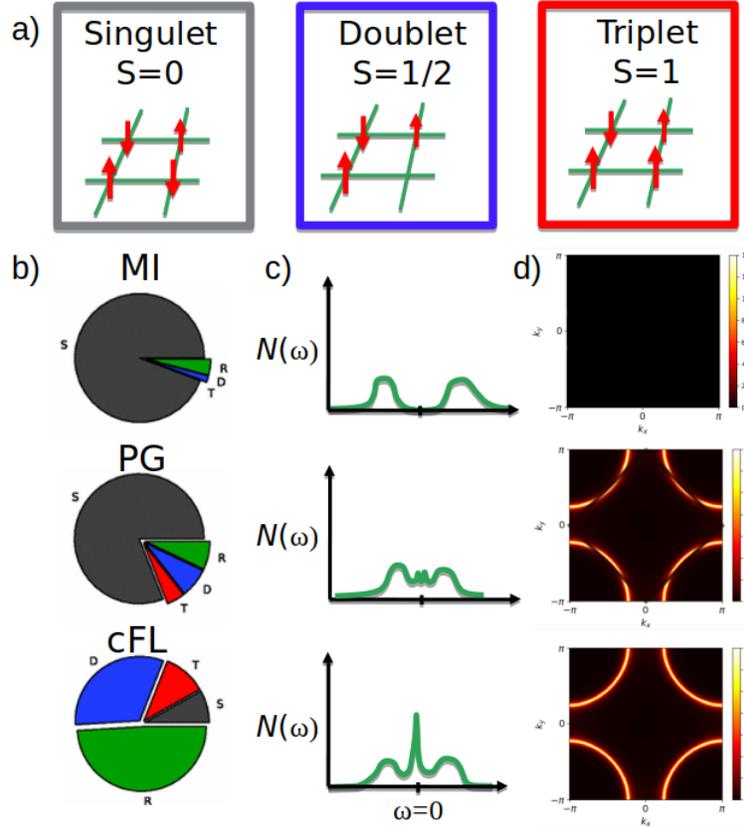


FIGURE 2.4 – Cette figure montre certaines propriétés des phases **MI**, **PG** et **cFL**. a) Des exemples de singulet, doublet et triplet sur une plaquette de 4 sites. Nous les définissons comme ayant respectivement un spin de 0, 1/2 et 1. b) La distribution des états propres pour les différentes phases. S est pour singulet, D est pour doublet, T est pour triplet, et R est pour tous les autres états propres. Cette figure est partiellement tirée de la référence [77]. c) Schémas de la **DOS** pour les différentes phases. d) Esquisse de la surface de Fermi pour les différentes phases dans un réseau carré avec $t' = -0.3$, une frustration qui n'est pas présente en b). La surface de Fermi du **PG** est celle d'un **PG** à interactions faibles.

ainsi un gap. La figure 2.5 permet de visualiser les effets des interactions sur les bandes d'énergie. La façon dont nous détecterons la présence d'un **MI** dans ce mémoire est par la **DOS** en fonction de la fréquence, comme à la figure 2.4 c).

Ce genre d'isolant a une tendance à favoriser les fluctuations de l'**AFM** à longue portée [41] et la formation de singulets, comme nous le voyons à la figure 2.4 b). Nous parlons ici de fluctuation de l'**AFM** plutôt que d'**AFM** parce que dans un système en deux dimensions, le théorème de Mermin-Wagner stipule que l'antiferromagnétisme à longue portée ne peut pas exister [85]. Ce comportement est dû aux fortes interactions et à la faible frustration dans les réseaux carrés. À la section 2.1.2, nous avons vu que les fortes interactions permettaient d'approximer le modèle de Hubbard et obtenir un modèle de style Heisenberg, où un anti-alignement des spins voisins minimise l'énergie.

Ce qui explique la figure 2.4 d) pour le **MI** est assez trivial : il ne peut pas y avoir de surface de Fermi dans un matériau isolant.

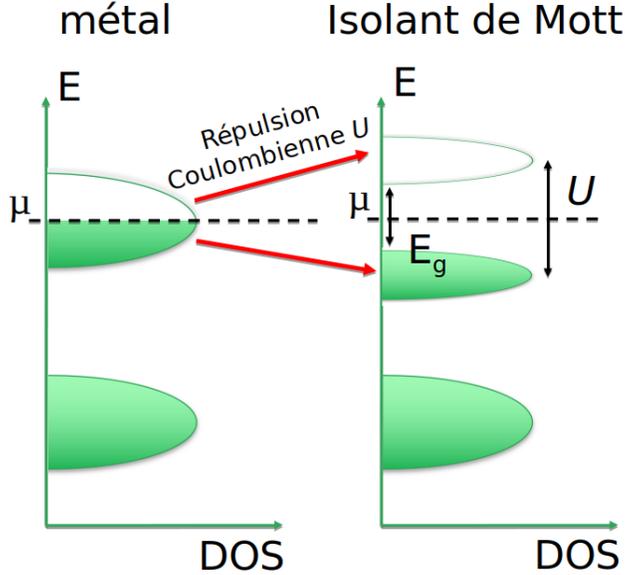


FIGURE 2.5 – Une esquisse de l’effet des fortes interactions U sur une bande à moitié remplie. Nous y voyons deux bandes, celle du bas est bien remplie, alors que celle du dessus n’est remplie qu’à moitié. Cette figure a pour but de montrer comment le paramètre U crée un gap E_g dans la DOS.

2.2.2 Liquide de Fermi corrélé (cFL)

Ce que nous appelons le liquide de Fermi corrélé est un amalgame de plusieurs phases métalliques, particulièrement le liquide de Fermi et le métal étrange. Nous ne montrerons pas ici en détail la théorie derrière le liquide de Fermi, une phase décrite à la référence [63], ou celle du métal étrange, qui est mal comprise. Discutons donc rapidement de quelques aspects que nous utiliserons pour contraster le **cFL** avec le **MI** et le **PG**.

Le liquide de Fermi et le métal étrange ont des points en commun. Par exemple, ces deux phases métalliques ne sont pas ordonnées, tel que vu à la figure 2.4 b). Bien que le concept de quasiparticules soit bien défini pour le liquide de Fermi, ce n’est probablement pas le cas pour le métal étrange. Il reste toutefois qu’on peut observer un pic dans la DOS près de $\omega = 0$ pour ces deux types de métaux, comme nous suggérons sur la figure 2.4 c). Dans le texte, nous ferons référence à un pic de quasiparticule dans le sens dont nous venons de parler. Les expériences de magnétorésistance dépendantes de l’angle suggèrent aussi l’existence d’une surface de Fermi bien définie [19], comme à la figure 2.4 d).

Le liquide de Fermi et le métal étrange se distinguent par le comportement de leur taux de diffusion $-\text{Im}(\Sigma)$ à basse température. La théorie du liquide de Fermi prédit que le taux de diffusion dans un métal à basse température devrait être $\propto T^2$, en contraste avec le métal étrange qui est $\propto T$. De plus, contrairement au liquide Fermi, le théorème de Luttinger n’est pas respecté dans le métal étrange [98]. Puisque nous n’étudierons pas en détail la dépendance en température du taux de diffusion, il nous est alors impossible de distinguer les deux, justifiant alors un nom commun pour ces deux phases, **cFL**.

2.2.3 Pseudogap

Nous distinguons normalement deux types de **PG**, celui à faibles interactions [58] et celui à fortes interactions, une dichotomie décrite dans la référence [75]. Le premier est généralement associé aux cuprates dopés aux électrons ou aux organiques sous forte pression. Il est par ailleurs en grande partie résolu [67]. Le second est un des grands sujets de controverse en physique des électrons fortement corrélés [45, 68]. Bien qu'il existe un clivage clair entre les deux types de **PG**, une origine commune aux deux reste probable [38]. Décrivons d'abord le comportement général des **PG**, puis, montrons en quoi ils diffèrent.

À la figure 2.4 c), nous présentons une esquisse de ce à quoi ressemble la **DOS** d'un **PG**. Nous y remarquons l'absence d'un pic de quasi-particules près de la fréquence nulle dans la **DOS** complète ou pour certains vecteurs d'onde. En fait, le concept de quasi-particule perd son sens dans le **PG** [22]. Bien que cet indice d'entrée dans le **PG** soit assez simple à obtenir et que nous l'utiliserons souvent pour savoir si nous sommes dans celui-ci, il ne constitue pas en soit une preuve formelle de la présence d'un **PG**. Pour cela, il faut plutôt montrer que la perte de poids spectral est dépendante du vecteur d'onde \mathbf{k} . À la figure 2.4 d), nous voyons un exemple de cet effet de perte de poids spectral dépendant du vecteur d'onde sur la surface de Fermi. Ainsi, la perte de poids spectral près de $\omega = 0$ en c) est généralement due à l'apparition de ces trous dans la surface de Fermi.

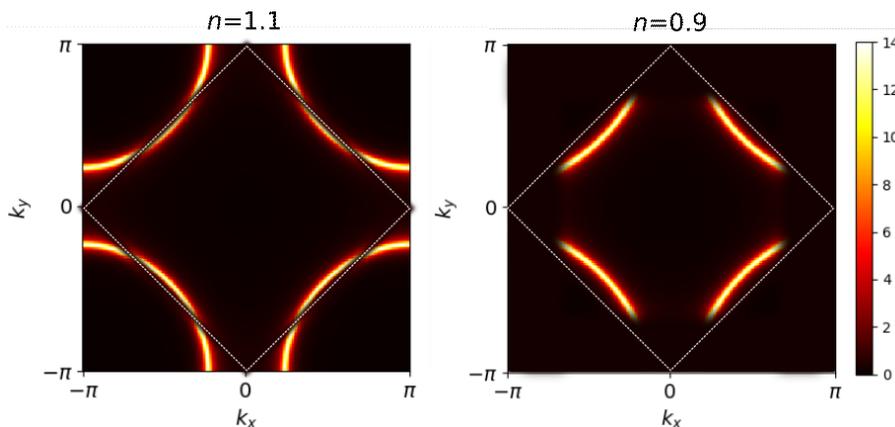


FIGURE 2.6 – À gauche, l'esquisse d'un pseudogap dans un cuprate dopé aux électrons tel que vu aux références [32, 86]. À droite, l'esquisse d'un **PG** dans un cuprate dopé aux trous tel que vu à la référence [45]. La zone en traits blancs est la limite de la zone de Brillouin **AFM**.

Nous en venons alors à décrire ce qui distingue les différents **PG**. Nous reconnaissons souvent le **PG** à interactions faibles dans deux cas : dans les organiques au demi-remplissage en dessous de la transition de Mott [40, 58, 70], ou dans les cuprates dopés aux électrons [22]. Ces deux cas sont similaires sous plusieurs points, particulièrement, la perte de poids spectral se trouve à des vecteurs d'onde croisant la zone de Brillouin **AFM**. Cet effet est illustré à la figure 2.6. Le cas des **PG** à interactions faibles est normalement corrélé aux fluctuations de l'**AFM** à longue portée, expliquant du même temps l'ouverture du **PG**. Dans un cas où le système est dans la phase **AFM**, la cellule unité contient deux sites plutôt qu'un. La zone de Brillouin de l'**AFM** est deux fois plus petite que la zone de Brillouin usuelle, comme à

la figure 2.6 en pointillés blancs. Ainsi, dans le cas où il y aurait de l'ordre AFM à longue portée, la surface de Fermi se referme autour de la nouvelle zone de Brillouin, tel qu'expliqué à la référence [13]. Nous appelons cet effet, la reconstruction de la surface de Fermi. Dans le cas où l'ordre est à courte portée, il n'y a que de la perte de poids spectral à l'intersection avec la zone antiferromagnétique, les "points chauds" [88].

Les mécanismes exacts en cause dans la formation du PG à interactions fortes restent à recueillir un consensus de la communauté. Nous le retrouvons dans les cuprates dopés en trous [67]. Jettons un coup oeil à la figure 2.6 à droite, les pertes de poids spectral sont bien différentes du cas à faibles interactions, les pertes partant de l'anti-noeud⁰ [45] au lieu d'être localisées sur les croisements entre la surface de Fermi et la zone de Brillouin AFM. De plus, puisqu'aucune fluctuation de l'AFM à longue portée ne peut justifier la reconstruction de la surface de Fermi aux limites de la zone de Brillouin AFM, c'est-à-dire qu'aucune poche de trous ou d'électrons peut se former aux limites de cette zone, il pourrait sembler qu'un nouveau mécanisme soit nécessaire. Il avait alors été proposé que la VHS jouait un rôle dans sa formation [11], mais il fût montré par la suite que ces deux phénomènes ne peuvent pas être liés [68].

De telles constatations nous ramènent à la thèse initiale, semblable à celle du PG à interactions faibles. La référence [19] a alors proposé une reconstruction de la surface de Fermi autour de la zone de Brillouin AFM, montrant par le fait même que cette reconstruction est compatible avec plusieurs résultats expérimentaux. De là découle l'idée que les fluctuations de l'AFM à courte portée pourraient être la cause de la formation de ce PG. Sordi et al. [77] ont testé cette hypothèse avec la CDMFT et ont montré que sur une plaquette 2×2 , la formation de singulets est grandement favorisée dans la phase PG. Nous voyons à la figure 2.4 b) que les singulets sont les états propres les plus favorisés par le PG. Une critique qu'on peut émettre de ces derniers travaux porte sur leur l'utilisation d'un réseau carré : un tel réseau favorise les fluctuations de l'AFM à longue portée.

Le PG à interactions fortes n'étant toujours pas résolu, un des objectifs du chapitre 5 sera de vérifier si les fluctuations AFM à courte portée sont vraiment à l'origine du PG.

2.3 Physique de Mott

Il n'existe pas de définition précise de la physique de Mott. Toutefois, la physique de Mott inclut généralement la physique causée par le MI et tous les phénomènes liés au MI, sans transition de phase claire [77]. Les sous-sections suivantes permettront d'éclaircir cette définition, en exposant comment les phases autour du MI sont liées à celui-ci.

La section précédente a décrit les différentes phases qui compétitionnent près du MI, mais nous n'avons pas montré comment elles sont reliées. Nous verrons ici deux moyens utilisés

0. On distingue le noeud et l'anti-noeud comme deux endroits différents de la surface de Fermi. Le noeud étant la partie de la surface de Fermi croisant une droite qu'on peut tracer entre les points $(0,0)$ et (π, π) dans l'espace réciproque. L'anti-noeud est plutôt la partie de la surface de Fermi près des points $(0,\pi)$ et $(\pi, 0)$.

pour observer la transition entre ces phases. D’abord, nous discuterons de la transition de Mott par pression, puis celle par dopage.

2.3.1 Transition de Mott induite par la pression

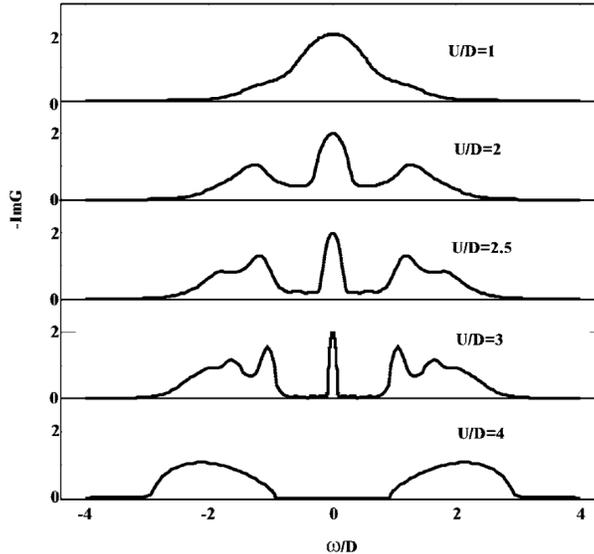


FIGURE 2.7 – Spectre de la transition de Mott par pression au demi-remplissage fait avec la **DMFT** dans un réseau carré sans frustration. D est ici le double du terme de saut au premier voisin t . Cette image est tirée de la référence [47].

La transition de Mott induite par la pression est une transition de phase qui survient quand la pression est appliquée à un matériel, soit lorsque les termes de sauts t et t' augmentent par rapport à U . Cette transition permet de passer d’un **MI** à faible pression, à un **cFL** à forte pression.

Imaginons un réseau infini carré au demi-remplissage comme à la figure 2.2 1,c). S’il n’y a pas d’interaction, rien hormis l’exclusion de Pauli n’empêche la mobilité des électrons, ce qui résulte en une phase métallique. Cependant, si le rapport U/t augmente, c’est-à-dire le coût pour avoir deux électrons au même endroit par rapport aux avantages de faire des sauts entre des sites, nous pouvons nous imaginer qu’un rapport très élevé forcerait les électrons à se localiser sur des sites pour éviter les doubles occupations. La conduction électrique devient alors nulle et nous retrouvons le **MI**. Cette image illustre bien les cas extrêmes du rapport U/t , mais ce qui nous intéresse, c’est comment la transition entre les deux se produit. C’est dans cet optique que s’inscrit le travail en physique numérique de plusieurs personnes comme Kotliar [47], Park [64] et Walsh [91].

La figure 2.7 est idéale pour visualiser la transition de Mott. Cette figure basée sur les calculs de **DMFT** illustre comment la **DOS** évolue avec l’interaction. À faible interaction, les électrons se concentrent autour de la fréquence nulle, soit un comportement typique des métaux. À plus forte interaction, les électrons se localisent plutôt vers des fréquences non nulles jusqu’à ce qu’il n’y ait plus d’états à $\omega = 0$, créant ainsi le **MI**.

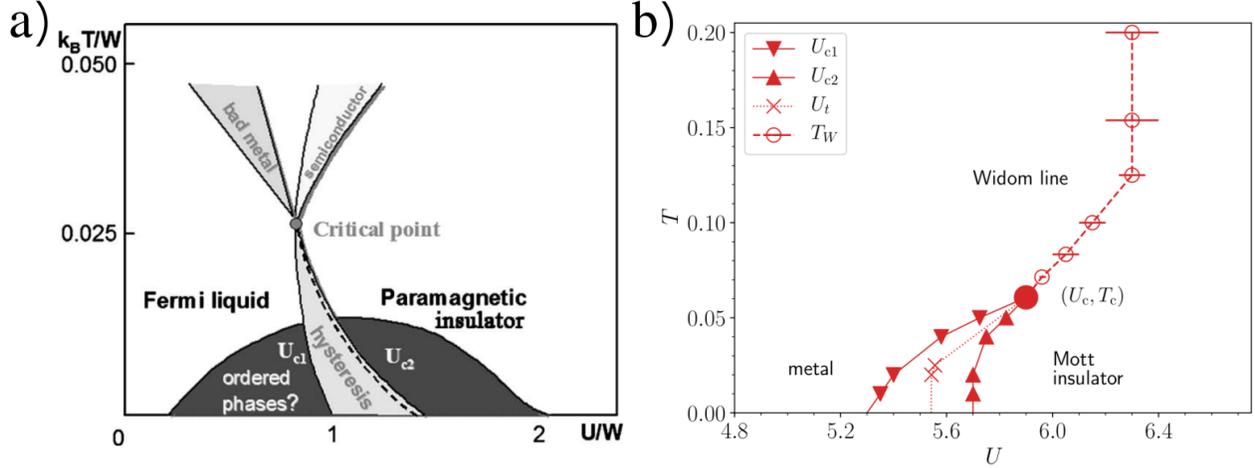


FIGURE 2.8 – Transition de Mott au demi-remplissage pour le réseau carré. a) Le cas qualitatif de la **DMFT** tiré de la référence [47]. W est la valeur de U pour la transition de Mott à $T = 0$. b) Le cas de la **CDMFT**, tiré de la référence [91].

La façon par laquelle cette transition survient dépend fortement de la température. Si nous nous fions aux figures 2.8 a) et b), il semble exister une transition de phase de premier ordre à basse température, puis, à plus haute température, une transition continue. Nous verrons au chapitre suivant que la **DMFT** ne considère que les interactions locales. Sachant cela, et sachant que cette transition de premier ordre existe dans de vrais matériaux [51], l'existence de cette transition est donc due à des interactions locales.

2.3.2 Transition de Mott induite par le dopage

En 2002, Kotliar *et al.* ont découvert l'existence d'une transition de premier ordre par dopage en utilisant la **DMFT** pour un réseau carré dans le modèle de Hubbard [46]. Nous montrons ce résultat à la figure 2.9 a), un résultat par la suite obtenu par Werner [94]. Il avait alors été montré que si nous changeons le potentiel chimique μ , il y avait une discontinuité entre une phase métallique et le **MI**. Considérons la conductivité donnée par la formule d'Einstein

$$\sigma = e^2 \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right) \mathcal{D}, \quad (2.25)$$

où \mathcal{D} est la constante de diffusion et e est la charge de l'électron. Avec les informations données par les graphiques de la figure 2.9, nous ne pouvons pas déduire \mathcal{D} . Toutefois, ayant accès à la compressibilité $\partial n / \partial \mu$, nous avons un isolant lorsque celle-ci est nulle et un métal autrement. La figure 2.9 a) nous montre alors une transition de premier ordre entre un isolant et un métal. On considère généralement cette transition comme une partie intégrante de la physique de Mott. Puisque la transition induite par le dopage n'a jamais été montrée expérimentalement, rien n'exclut qu'elle ne puisse être qu'un artefact de la **DMFT**.

Par la suite, l'étude de cette transition a été faite en utilisant de petits amas. Les résultats de **CDMFT** et de **DCA** des références [54, 76] montrent les premiers exemples de transition de phase de premier ordre par dopage dans les amas. Macridin *et al.* ont trouvé une petite

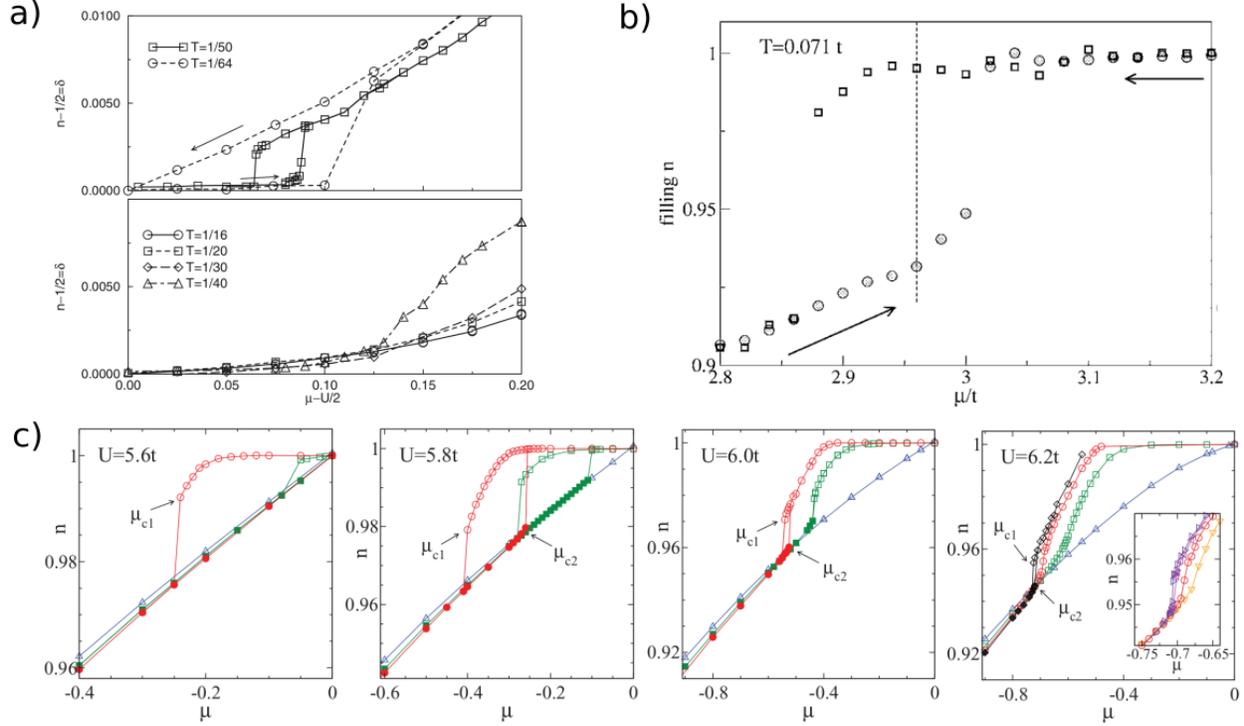


FIGURE 2.9 – a) Résultats obtenus par le groupe de Kotliar pour la transition de phase par dopage dans un réseau carré [46]. Les conventions pour la figure sont différentes des conventions que nous utilisons, à savoir que, dans leur cas, $n = 1$ signifie que la bande est entièrement remplie. Aussi, comme discuté à la Sec. 2.1.2, les symétries d’un réseau carré permettent d’obtenir le demi-remplissage à $\mu = U/2$. Kotliar *et al.* utilisent alors cette convention pour présenter leurs résultats à $U > U_{c1}$. b) Transition de phase par dopage avec quatre sites en DCA. Ce résultat a été obtenu par Macridin *et al.* à la référence [54]. c) Transition de phase par dopage avec la plaquette de quatre sites en CDMFT. Les températures pour les différentes valeurs de U sont $T/t = 1/10$ (triangles bleus), $1/25$ (carrés verts), $1/50$ (cercles rouges), $1/100$ (diamants noirs). Cette image est tirée de la référence [77].

région dopée et connectée de façon continue à l’isolant [54], résultat affiché à la figure 2.9 b). Cette région est toutefois métastable, en plus d’être très imprécise, ce qui n’a pas permis d’en conclure qu’un métal peut être continûment connecté au MI malgré la présence d’une transition de premier ordre. Werner *et al.* ont été les premiers à montrer que la transition continue par dopage a une dépendance en vecteur d’onde [92], donc un comportement de PG. Sordi *et al.* ont par la suite prouvé que le PG est thermodynamiquement stable lors d’une transition de premier ordre dans les réseaux carrés [77]. Ces résultats sont présentés aux figures 2.9 c). Cela permet de définir la transition de Sordi comme une transition de premier ordre entre deux métaux thermodynamiquement stables. Cependant, puisque ces derniers résultats ont été obtenus avec un petit réseau de quatre sites, il n’est toujours pas exclu que cette transition soit un artefact de la taille du réseau. La référence [79] présente une discussion détaillée de cette transition. Puisque le PG est délimité par la transition de premier ordre, Sordi *et al.* ont proposé que le PG est lié à la physique de Mott, une conclusion similaire celle de Horio *et al.* [38].

Étant donné que les résultats de Sordi sont nombreux et précis, il est utile de les commenter afin de les comparer avec ce qui est observé dans les cuprates. En considérant la figure 2.9 c), sachant que le **PG** et le **cFL** sont séparés par la transition de premier ordre ou approximativement par un point d'inflexion, nous voyons que le **PG** grandit en dopage lorsque la température diminue ou que U augmente. Dans les cuprates dopés en trous, U_{eff} pour le modèle à une bande est autour de 10, soit dans une plage de valeur pour laquelle ces derniers résultats numériques sont valides. Ces résultats sont également cohérents avec les résultats expérimentaux en pression [27] et en température [83] pour les cuprates dopés en trous.

Ces résultats permettent encore une fois de lever une partie du voile sur les origines du **PG** à interactions fortes. Nous avons observé que celui-ci n'était pas présent pour des calculs de **DMFT**, mais qu'il l'était pour les techniques par amas. Cela implique que des corrélations non-locales sont nécessaires à l'apparition du **PG**. Nous avons aussi vu qu'il semblait lié à la physique de Mott elle-même, quelque chose que nous tenterons de vérifier dans ce mémoire.

Transition de Sordi

Puisque nous reviendrons à plusieurs reprises à ce sujet, il peut être utile de mieux comprendre comment nous définissons plus précisément la transition de Sordi. D'abord introduite par Sordi *et al.* [77], elle représente un cas particulier de la transition de Mott induite par le dopage. En fait pour avoir une transition de Sordi, il faut une transition par dopage de premier ordre entre deux métaux thermodynamiquement stables. Par thermodynamiquement stables, nous insinuons que les deux métaux aient une part hors de la zone de coexistence en potentiel chimique.

Pour bien la visualiser, la figure 2.9 c) montre plusieurs transition de phase par dopage. On peut y identifier deux transitions de Sordi, une à $U = 6.0$ et $T = 1/50$, et $U = 6.2$ et $T = 1/100$. Les figures a) et b) n'ont pas une telle transition pour les raisons suivantes. Dans le premier cas, travaillant avec la **DMFT**, il n'y a pas de **PG** qui peut se former pour faire office de métal connecté de façon continue au **MI**. Dans le second cas, il n'y a tout simplement pas assez eu de calculs pour la trouver.

Cette transition est liée à la physique de Mott [78]. Étant donné que cette transition est souvent ce qui sépare le **PG** et le **cFL**, il semble que la physique de Mott est aussi liée à la formation du **PG**.

Chapitre 3

Méthodes

Pour résoudre le Hamiltonien de Hubbard, nous utiliserons deux techniques de calcul au cours de ce mémoire, soit la **DMFT** et une de ses généralisations pour amas, la **DCA**. Le présent chapitre se concentrera sur la compréhension de ces techniques de calcul, en plus de présenter les algorithmes de style Monte Carlo Quantique en Temps Continu / *Continuous-Time Quantum Monte Carlo* (**CT-QMC**), tel que CT-INT et CT-AUX.

3.1 Théorie de Champ Moyen Dynamique (DMFT)

La **DMFT** a d'abord été introduite par Georges et Kotliar en 1992 ^[23], par la suite proposée de façon indépendante par Jarell la même année ^[42]. Cette technique a connu un immense succès. En particulier, elle a pu prédire la transition de premier ordre par pression, que nous avons montrée à la figure 2.8 a). Nous n'avons donc plus à justifier son utilisation.

Le principe de la **DMFT** est simple. Nous souhaitons résoudre notre problème en supposant l'existence d'une impureté placée dans un champ moyen, un endroit où toutes les interactions se produiront. Contrairement aux champs moyens usuels, celui-ci est dit dynamique, puisqu'il dépend de la fréquence. Pour pouvoir créer une telle théorie de champ moyen, il faut poser un nouvel Hamiltonien adapté à notre problème. Nous introduisons alors le modèle d'impureté d'Anderson / *Anderson Impurity Model* (**AIM**).

3.1.1 Modèle d'impureté d'Anderson

D'abord introduit en 1961 par Anderson ^[1] pour mieux comprendre le rôle des impuretés magnétiques dans les métaux, l'**AIM** s'explique comme suit. Le Hamiltonien est séparé en trois parties. Nous appelons la première le bain, représentant un réseau infini sans interactions. La deuxième partie se nomme l'impureté, s'occupant de tout ce qui se passe sur un site, particulièrement les interactions sur l'impureté. La dernière partie, l'hybridation, couple le bain et l'impureté en permettant un échange d'électrons entre les autres parties. Ainsi, séparés

de cette façon, nous avons

$$H_{\text{AIM}} = \underbrace{\sum_{\langle i, j \rangle \sigma} t_{ij}^{\text{bain}} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma}}_{\text{bain}} + \underbrace{\sum_{i, \sigma} \left(t_{0i} c_{0\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + c.h. \right)}_{\text{hybridation}} + \underbrace{U n_\uparrow n_\downarrow - \mu (n_\uparrow + n_\downarrow)}_{\text{impureté}} \quad (3.1)$$

$$H_{\text{AIM}} = H_{\text{bain}} + H_{\text{hyb}} + H_{\text{imp}} \quad (3.1)$$

où $c_{0\sigma}$ et $c_{0\sigma}^\dagger$ sont les opérateurs d'annihilation et de création d'un électron de spin σ sur l'impureté de l'amas à un site (Cluster), $f_{i\sigma}$ et $f_{i\sigma}^\dagger$ sont ceux pour le bain au site i (free). U et μ sont encore, respectivement, les mêmes termes d'interaction et de potentiel chimique que dans le modèle de Hubbard. Finalement, les termes t_{ij}^{bain} et t_{0i} représentent respectivement le terme de saut entre les sites de bain et le terme de saut entre l'impureté et un site de bain i . *À priori*, nous n'avons pas connaissance des valeurs t_{ij}^{bain} et t_{0i} . Cette façon de représenter l'AIM est bien utile pour comprendre comment notre problème est local, mais, pour présenter l'hybridation plus tard, il nous sera plus utile d'avoir l'AIM dans une base où H_{bain} est diagonal,

$$H_{\text{AIM}} = \sum_{\alpha\sigma} \epsilon_\alpha^{\text{bain}} f_{\alpha\sigma}^\dagger f_{\alpha\sigma} + \sum_{\alpha\sigma} \left(V_{\alpha\sigma} c_{0\sigma}^\dagger f_{\alpha\sigma} + c.h. \right) + U n_\uparrow n_\downarrow - \mu (n_\uparrow + n_\downarrow) \quad (3.2)$$

où les nouveaux termes d'énergie du bain $\epsilon_\alpha^{\text{bain}}$ et d'hybridation $V_{\alpha\sigma}$ seront, en DMFT, déterminés de façon auto-cohérente.

3.1.2 Fonction de Green locale \mathcal{G}_{loc}^σ , de l'impureté \mathcal{G}_{imp}^σ et libre \mathcal{G}_0^σ

Pour bien comprendre la DMFT, il faut savoir différencier trois différentes fonctions de Green, soit celle **locale** \mathcal{G}_{loc} , de l'**impureté** \mathcal{G}_{imp} et **libre** \mathcal{G}_0 . À la différence de la section 2.1.1, définissons la fonction de Green dans l'espace des positions

$$G^\sigma(i, j, \tau, \tau') = - \left\langle T_\tau c_{i,\sigma}(\tau) c_{j,\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle_{H_{\text{Hubbard}}} \quad (3.3)$$

Nous pouvons interpréter cette dernière équation comme la moyenne thermodynamique sur l'Hamiltonien de Hubbard pour ce qui se produit quand nous créons une particule au temps τ' et au site j , puis qu'on la détruit au temps τ au site i . Nous visualisons alors bien comment la fonction de Green agit comme une évolution dans le temps imaginaire des particules sur le réseau réel. Nous avons aussi le produit chronologique qui apparaît naturellement lorsqu'on travaille avec la représentation d'interaction en temps imaginaire. Nous présentons la représentation en d'interaction à la section 3.3.1. Dans le cas de la DMFT, ce qui nous intéresse est plus particulièrement la fonction de Green **locale**, donc l'évolution dans le temps sur un seul site

$$G^\sigma(i, i, \tau, \tau') = - \left\langle T_\tau c_{i,\sigma}(\tau) c_{i,\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle_{H_{\text{Hubbard}}} \quad (3.4)$$

En général, nous voulons la fonction de Green en fonction du vecteur d'onde et de la fréquence imaginaire, quelque chose que nous avons déjà rapporté à la section 2.1.1. À partir

de celle-ci, nous pouvons obtenir la fonction de Green **locale** en sommant sur tous les vecteurs d'onde

$$\mathcal{G}^\sigma(i, i, i\omega_n) = \mathcal{G}_{loc}^\sigma(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma^\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \quad (3.5)$$

où cette fois, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ est l'énergie sans interactions au vecteur d'onde \mathbf{k} , une énergie qu'on a explicité pour certains modèles de réseau aux équations 2.20 à 2.22.

Vient par la suite la fonction de Green de l'**impureté**. Cette fonction est utilisée dans la résolution du problème de l'**AIM**. Formellement, nous le définissons comme

$$G_{imp}^\sigma(\tau, \tau') = -\left\langle T_\tau c_{0,\sigma}(\tau) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle_{H_{AIM}}, \quad (3.6)$$

ce qui équivaut à

$$\mathcal{G}_{imp}^\sigma(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_0 + \mu - \Delta^\sigma(i\omega_n) - \Sigma_{imp}^\sigma(i\omega_n)}, \quad (3.7)$$

où $\epsilon_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}$ est généralement 0 avec la **DMFT**. Nous voyons aussi apparaître la fonction d'hybridation $\Delta^\sigma(i\omega_n)$, parfois appelée champ de Weiss. Nous le définissons à partir des éléments de l'équation 3.2 comme

$$\Delta^\sigma(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{|V_{\mathbf{k}, \sigma}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}^{bain}}. \quad (3.8)$$

Nous avons alors tous les outils pour définir la dernière fonction de Green utile à la **DMFT**, soit, la fonction de Green **libre** de l'impureté, ou dite sans interactions. Nous disons sans interactions parce que c'est la fonction de Green de la portion sans interactions de l'**AIM**, qu'il ne faut donc pas confondre avec la fonction de Green sans interactions du modèle de Hubbard. Ainsi, nous la définissons formellement comme

$$G_0^\sigma(\tau, \tau') = -\left\langle T_\tau c_{0,\sigma}(\tau) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle_{H_{bain} + H_{hyb}}, \quad (3.9)$$

ou

$$\mathcal{G}_0^\sigma(i\omega_n) = ((\mathcal{G}_{imp}^\sigma)^{-1} + \Sigma_{imp}^\sigma)^{-1} = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_0 + \mu - \Delta^\sigma(i\omega_n)}. \quad (3.10)$$

Cette dernière fonction peut sembler, pour l'instant, assez inutile. Toutefois, nous verrons à la section 3.3.1 que la représentation d'interaction nous permet de séparer H_{AIM} en deux portions, une avec et l'autre sans interactions. Il se trouve que ce sera nécessaire pour calculer nos différentes observables.

3.1.3 Principe de la DMFT

Ce que Georges et al. avaient particulièrement prouvé en 1992 [23], c'est qu'en dimension infinie, l'équation

$$\Sigma_{imp}^{\sigma}(i\omega_n) = \Sigma^{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (3.11)$$

est exacte. Nous avons déjà vu la partie de droite de l'équation 3.11 à l'équation 2.18 dans un contexte où nous n'avons pas inclus le spin. Inclure celui-ci n'a pas d'impact sur nos équations. Dans le but de résoudre le modèle de Hubbard, l'équation d'auto-cohérence pour la résolution du problème demande que la fonction de Green de l'**impureté** de l'**AIM** soit identique à celle de la fonction de Green **locale** du modèle de Hubbard. Formellement,

$$\mathcal{G}_{loc}^{\sigma}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{imp}^{\sigma}(i\omega_n). \quad (3.12)$$

Une autre façon de comprendre ce problème est de regarder la figure 3.1 où nous pouvons facilement visualiser les deux différentes fonctions de Green.

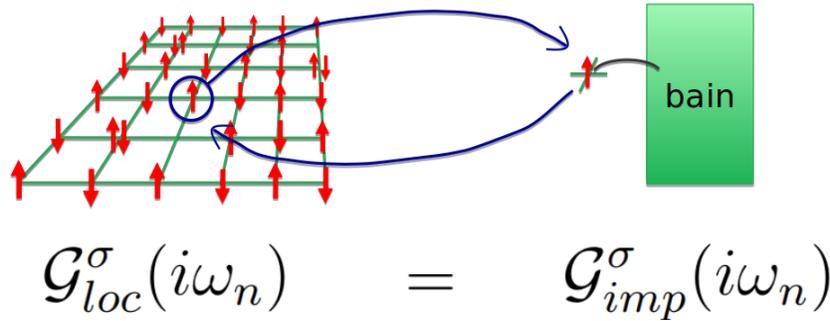


FIGURE 3.1 – Visualisation de l'auto-cohérence de la DMFT. À gauche, nous voyons la fonction de Green **locale** dans le modèle de Hubbard, alors qu'à droite, nous voyons la fonction de Green de l'**impureté** de l'**AIM**. Les flèches d'un modèle à l'autre représentent la boucle d'auto-cohérence qui nous fait passer d'un problème à l'autre de façon auto-cohérente.

Montrons maintenant ce que fait la boucle de la DMFT. Il y a bien des façons possibles de démarrer la boucle. Nous allons montrer celle de Charles-David Hébert et Maxime Charlesbois dans le programme Multi-orbital en Temps Continu / *Continuous Time Multi-Orbital (CTMO)*.

1. Choisir une fonction d'hybridation $\Delta^{\sigma,(l)}(i\omega_n)$ quelconque, mais préférablement près de la solution réelle de notre problème.
2. Trouver la fonction de Green **libre**

$$\mathcal{G}_0^{\sigma,(l)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_0 + \mu - \Delta^{\sigma}(i\omega_n)} \quad (3.13)$$

3. Envoyer la fonction de Green **libre** à un solveur de type **CT-QMC**, qu'on introduira à la section **3.3.2**.
4. Récupérer la fonction de Green de l'**impureté** à la sortie de l'algorithme **CT-QMC**, puis, à l'aide de la fonction de Green **libre**, calculer la self-énergie de l'**impureté**

$$\Sigma_{imp}^{\sigma,(l)}(i\omega_n) = (\mathcal{G}_0^{\sigma,(l)}(i\omega_n))^{-1} - (\mathcal{G}_{imp}^{\sigma,(l)}(i\omega_n))^{-1} \quad (3.14)$$

5. Trouver la fonction de Green **locale**

$$\mathcal{G}_{loc}^{\sigma,(l)}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_{imp}^{\sigma,(l)}(i\omega_n)} \quad (3.15)$$

6. Trouver la nouvelle fonction d'hybridation

$$\Delta^{\sigma,(l+1)}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - (\mathcal{G}_{loc}^{\sigma,(l)}(i\omega_n))^{-1} - \Sigma_{imp}^{\sigma,(l)}(i\omega_n) \quad (3.16)$$

7. Vérifier la condition d'auto-cohérence

$$\mathcal{G}_{loc}^{\sigma}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{imp}^{\sigma}(i\omega_n) \quad (3.17)$$

8. Envoyer la nouvelle fonction d'hybridation $\Delta^{\sigma,(l+1)}$ à l'étape **2** jusqu'à convergence.

3.2 Dynamical Cluster Approximation (DCA)

D'abord introduite par Hettler et al. [34,35] en 1998, la **DCA** est une technique de calcul qui découle de la **DMFT**, mais prend en compte les interactions non-locales à courte portée. Le choix de la **DCA** pour nos travaux s'est basée sur plusieurs critères : sa convergence plus rapide pour certaines observables, tel que discuté aux références [3,9,10], et sa propriété d'invariance sous translation, une propriété importante pour les amas, mais absente de la **CDMFT**.

Étant donné que la **DCA** est une technique d'amas, il faut d'abord savoir comment construire l'amas et ses connections au bain dans le modèle d'impureté d'Anderson. Par la suite, nous aurons les outils pour montrer l'invariance sous translation de la technique et nous finirons par la procédure de calcul.

3.2.1 Construction de l'Amas

Il est difficile de rendre la construction d'un amas en **DCA** très général. Pour cette raison, la section **4.2** expliquera en détail les caractéristiques qui permettent de créer un amas de qualité, mais en prenant l'exemple des réseaux utilisés dans ce mémoire. Une certaine base peut toutefois être établie, permettant de comprendre un peu cette technique de calcul.

Supposons que nous ayons un total de N_c sites dans notre amas aux positions \mathbf{X}_i . Une des caractéristiques, aussi ce qui fait la force de la **DCA**, est que les sauts intra-amas doivent inclure des conditions aux limites périodiques, comme si l'amas était un tore. Généralement, nous définissons la périodicité de notre amas par les vecteurs de translation R_{x,N_c} et R_{y,N_c}

pour un réseau en deux dimensions. Avec ces vecteurs, nous pouvons trouver les vecteurs qui nous serviront à positionner nos sites sur le réseau réciproque

$$R_{x,N_c}^* = \frac{2\pi}{V} R_{y,N_c} \wedge \hat{z} \quad (3.18)$$

$$R_{y,N_c}^* = \frac{2\pi}{V} \hat{z} \wedge R_{x,N_c} \quad (3.19)$$

où \hat{z} est le vecteur unité dans la direction z et $V = |R_{x,N_c} \cdot (R_{y,N_c} \wedge \hat{z})|$ est le volume. Prenons la base $\hat{\mathbf{X}}$ et $\hat{\mathbf{Y}}$ qui définit notre réseau réel, la position des sites sur le réseau réel sera alors donnée par

$$\mathbf{X}_i = \alpha_i \hat{\mathbf{X}} + \gamma_i \hat{\mathbf{Y}}, \quad (3.20)$$

où α_i et γ_i sont des constantes spécifiques à chaque site. Cela nous amène à trouver la position de chacun de ces sites sur le réseau réciproque en utilisant les vecteurs du réseau réciproque que nous avons trouvé aux équations 3.18 et 3.19

$$\mathbf{K}_i = \alpha_i R_{x,N_c}^* + \gamma_i R_{y,N_c}^*. \quad (3.21)$$

À partir de là, il faut créer des zones d'intégration dans l'espace réciproque autour de chacun de ces sites. Celles-ci ont peu de conditions, mais elles sont bien importantes. D'abord, les zones ne doivent pas s'entrecouper, ensuite elles doivent être de volume égal et couvrir toute la zone de Brillouin.

3.2.2 Modèle d'impureté d'Anderson pour amas

Nous verrons à la section 3.3 que nous utiliserons deux Hamiltoniens pour résoudre notre problème, soit, celui de Hubbard et celui du modèle d'impureté d'Anderson. Dans le second cas, le modèle doit pouvoir être séparé en deux portions, soit une portion avec interactions et une autre sans interactions. L'AIM généralisé aux amas H_{AIMc} ressemble à

$$H_{\text{AIMc}} = \underbrace{\sum_{\alpha,\sigma} \epsilon_\alpha f_{\alpha\sigma}^\dagger f_{\alpha\sigma}}_{\text{bain}} + \underbrace{\sum_{\alpha,i,\sigma} \left(V_{i\alpha} c_{i\sigma}^\dagger f_{\alpha\sigma} + c.h. \right)}_{\text{hybridation}} + H_{\text{imp}}, \quad (3.22)$$

avec

$$H_{\text{imp}} = \underbrace{\sum_{i=0}^{N_c} \left(\bar{\epsilon}_{\mathbf{K}_i} c_{\mathbf{K}_i,\sigma}^\dagger c_{\mathbf{K}_i,\sigma} - \mu n_{\mathbf{K}_i,\sigma} \right)}_{\text{Sans Interactions (SI)}} + \underbrace{\sum_{i=0}^{N_c} U \left(n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \frac{n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}}{2} \right)}_{\text{Interactions (I)}}, \quad (3.23)$$

où $\bar{\epsilon}_{\mathbf{K}_i} = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \epsilon_{\mathbf{K}_i + \tilde{\mathbf{k}}}$, $c_{\mathbf{K}_i,\sigma}^\dagger$ et $c_{\mathbf{K}_i,\sigma}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation sur la zone \mathbf{K}_i , $n_{\mathbf{K}_i,\sigma}$ est l'opérateur nombre sur cette même zone et la somme sur les α est une somme sur les sites de bain. Notons aussi la somme $\tilde{\mathbf{k}}$ sur les vecteurs d'onde de la zone de Brillouin originale entourant chacun des vecteurs \mathbf{K}_i . Les $\tilde{\mathbf{k}}$ dépendent évidemment du \mathbf{K}_i considéré et de la façon dont les zones entourant chacun des \mathbf{K}_i sont définies. Nous avons alors

$$H_{\text{AIMc}} = H_{\text{bain}} + H_{\text{hyb}} + H_{\text{SI}} + H_{\text{I}}. \quad (3.24)$$

3.2.3 Invariance sous translation

Pour avoir l'invariance sous translation, il est nécessaire de l'imposer dans l'hybridation. Pour comprendre, nous explicitons l'hybridation dans l'espace réel

$$\Delta_{ij}(i\omega_n) = \sum_{\alpha} V_{i\alpha} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\alpha}} V_{\alpha j} \quad (3.25)$$

où nous comprenons que l'hybridation est faite entre deux sites, i et j . Pour assurer l'invariance sous translation, il faut imposer qu'un même type de saut, par exemple en \hat{y} , ait la même fonction d'hybridation.

Suivons la démarche de la référence [57]. En **CDMFT**, cette propriété d'invariance sous translation est absente comme le révèle un élément de la matrice de saut entre les sites aux positions \mathbf{X}_i et \mathbf{X}_j

$$[\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{X}_i \mathbf{X}_j} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot(\mathbf{X}_i-\mathbf{X}_j)} \epsilon_{\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} \quad (3.26)$$

où $\epsilon_{\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}}$ est l'énergie dans un cas sans interaction, tel que nous l'avions vu aux équations 2.20, 2.21 et 2.22.

Pour mieux comprendre l'équation 3.26, il est utile de mentionner que c'est un peu comme si nous avions une transformée de Fourier de l'énergie dans l'espace réciproque vers le réseau réel. De façon générale, les super vecteurs du réseau réciproque \mathbf{K} représentent les sauts entre les sites du réseau réel, alors que $\tilde{\mathbf{k}}$ représente les sauts inter-amas dans le réseau réel, $\tilde{\mathbf{x}}$. La dépendance de $[\mathbf{t}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{X}_i \mathbf{X}_j}$ en $\tilde{\mathbf{k}}$ dans l'exponentielle nous montre que l'invariance sous translation est brisée. En particulier, l'exponentielle ne dépend pas seulement de la différence de position entre deux sites, mais aussi de l'amas choisi à travers la dépendance en $\tilde{\mathbf{k}}$. Pour corriger ce problème, la périodicité du réseau en **DCA** nous permet d'ajouter un facteur de phase à notre élément de matrice

$$\begin{aligned} [\mathbf{t}_{\text{DCA}}(\tilde{\mathbf{k}})]_{\mathbf{X}_i \mathbf{X}_j} &= \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot(\mathbf{X}_i-\mathbf{X}_j)} \epsilon_{\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}}\cdot(\mathbf{X}_i-\mathbf{X}_j)}, \\ &= \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{X}_i-\mathbf{X}_j)} \epsilon_{\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

nous amenant à avoir le saut inter-amas

$$[\mathbf{t}_{c,\text{DCA}}]_{\mathbf{X}_i \mathbf{X}_j} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{X}_i-\mathbf{X}_j)} \bar{\epsilon}_{\mathbf{K}}. \quad (3.28)$$

où $\bar{\epsilon}_{\mathbf{K}}$ est l'énergie moyenne dans la zone d'intégration \mathbf{K} . L'hybridation est traitée de la même façon, c'est à dire qu'elle ne dépend que de \mathbf{K} et de $i\omega_n$.

3.2.4 Procédure de calcul

La procédure de calcul est très similaire à ce que nous avons vu pour la **DMFT** à la section 3.1.3. Le programme **CTMO** requiert la fonction d'hybridation $\Delta^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n)$ en entrée. Ainsi, en suivant la figure 3.2, nous envoyons les N_c fonctions de Green **libres**

$$\mathcal{G}_0^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{K}_i} + \mu - \Delta^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n)} \quad (3.29)$$

au solveur CT-AUX, un solveur habilité aux calculs sur amas ^[57] qu'on discutera à la section 3.3.5. Le solveur d'impureté en ressort les fonctions de Green des **impuretés** $\mathcal{G}_{imp}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n)$.

Nous calculons maintenant la self-énergie des **impuretés**

$$\Sigma_{imp}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n) = (\mathcal{G}_0^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n))^{-1} - (\mathcal{G}_{imp}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n))^{-1} \quad (3.30)$$

pour trouver l'analogie des fonctions de Green **locales**, qui dépendent maintenant des \mathbf{K}_i

$$\mathcal{G}_{loc}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{K}_i + \tilde{\mathbf{k}}} + \mu - \Sigma_{imp}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n)} \quad (3.31)$$

où N est le nombre de point total dans l'espace réciproque. Le terme «**locale**» n'a plus vraiment le même sens qu'avec la **DMFT**, mais nous conservons cette désignation pour bien en comprendre l'analogie avec celle-ci. Par la suite, nous pouvons calculer la prochaine fonction d'hybridation

$$\Delta^{\sigma,(l+1)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n) = i\omega_n + \mu - (\mathcal{G}_{loc}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n))^{-1} - \Sigma_{imp}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n). \quad (3.32)$$

La condition d'auto-cohérence est que $\mathcal{G}_{loc}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n) = \mathcal{G}_{imp}^{\sigma,(l)}(\mathbf{K}_i, i\omega_n)$. Si elle n'est pas remplie, on renvoie une nouvelle fonction de Green **libre** au solveur d'impureté pour faire une nouvelle itération de calcul.

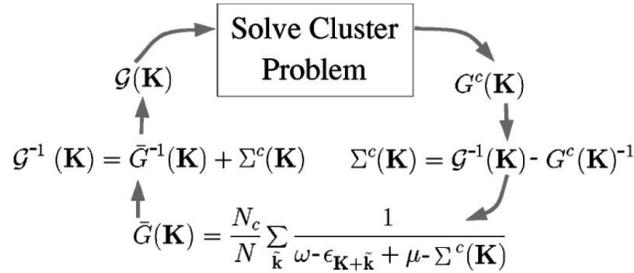


FIGURE 3.2 – Procédure générale pour un calcul de **DCA**. L'image est tirée de la référence [34].

3.3 Monte Carlo Quantique en Temps Continu

Nous avons discuté, avec la **DMFT** et la **DCA**, de l'importance du solveur d'impureté, sans lequel ces dernières techniques n'ont aucun intérêt. Il en existe heureusement plusieurs,

chacun adapté à des problèmes différents. Ici, nous discuterons particulièrement des solveurs de type **CT-QMC**, avec une attention particulière à CT-INT et CT-AUX, où la résolution se fait en puissance des interactions.

La section suivante portera sur la représentation d'interaction, nécessaire pour la suite, où nous introduirons les algorithmes de type **CT-QMC**, pour finir avec les algorithmes CT-INT et CT-AUX.

3.3.1 Représentation d'interaction

L'objectif général du solveur est bien entendu de faire ressortir la moyenne thermodynamique de quelques observables. Prenons l'exemple de l'observable quelconque $\mathcal{O}(t)$, nous trouvons sa moyenne thermodynamique avec le Hamiltonien H

$$\langle \mathcal{O} \rangle_H = \frac{\sum_{l \in \Omega} \mathcal{O}_l(\tau) e^{-\beta H_l}}{Z} \quad (3.33)$$

où $\beta = 1/T$, $\tau = it$, H_l est l'énergie de l'Hamiltonien dans la configuration donnée par le point l dans l'ensemble des états propres de l'énergie Ω , \mathcal{O}_l est la valeur de l'observable dans la configuration l et Z est la fonction de partition qu'on définit comme

$$Z = \sum_{l \in \Omega} e^{-\beta H_l}. \quad (3.34)$$

Une autre façon d'écrire l'équation 3.33 est de la mettre sous la forme d'une trace comme $Tr(\mathcal{O}(\tau)e^{-\beta H})/Z$, une notation qui nous sera plus utile pour la suite.

Maintenant que nous savons qu'est-ce que nous devons calculer, concentrons-nous sur le comment. L'idée générale de la stratégie est de commencer par séparer notre Hamiltonien H en deux parties $H = H_a + H_b$ en considérant que la partie H_a est la partie non-perturbée de l'Hamiltonien. À partir de là, il serait plutôt utile de trouver une façon de séparer $e^{-\beta H}$ en deux parties, dont l'une seule prendrait en charge les perturbations. Pour ce faire, il faut passer par la représentation d'interaction, pour laquelle une lecture détaillée de la référence [85] peut s'avérer utile. Posons alors une équation ayant la forme

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_a} U_I(\beta). \quad (3.35)$$

Nous pouvons alors dériver les deux côtés de l'équation

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta H} &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left(e^{-\beta H_a} U_I(\beta) \right) \\ -(H_a + H_b) e^{-\beta H} &= -H_a e^{-\beta H_a} U_I(\beta) + e^{-\beta H_a} \frac{\partial}{\partial \beta} U_I(\beta) \\ -e^{\beta H_a} H_b e^{-\beta H_a} U_I(\beta) &= \frac{\partial}{\partial \beta} U_I(\beta) \\ -H_{Ib}(\beta) U_I(\beta) &= \frac{\partial}{\partial \beta} U_I(\beta), \end{aligned} \quad (3.36)$$

où nous comprenons que $H_{Ib}(\beta)$ est la partie perturbatrice de notre Hamiltonien dans la représentation d'interaction. Nous pouvons alors résoudre l'équation différentielle

$$\int_0^\beta \frac{\partial}{\partial \tau} U_I(\tau) d\tau = - \int_0^\beta H_{Ib}(\tau) U_I(\tau) d\tau$$

$$U_I(\beta) = 1 - \int_0^\beta H_{Ib}(\tau) U_I(\tau) d\tau \quad (3.37)$$

$$(3.38)$$

où le 1 apparaît parce que $U_I(0) = 1$. Nous avons alors

$$U_I(\beta) = 1 - \int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau + \int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau \int_0^\tau H_{Ib}(\tau') d\tau'$$

$$- \int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau \int_0^\tau H_{Ib}(\tau') d\tau' \int_0^{\tau'} H_{Ib}(\tau'') d\tau'' + \dots \quad (3.39)$$

Nous pouvons constater un fait intéressant de la dernière équation : chaque terme d'ordre k peut être réarrangé de $k!$ façons pour que chaque intégrale couvre l'intervalle de 0 à β . Ainsi, nous pouvons réécrire

$$U_I(\beta) = 1 - \int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau + \frac{1}{2!} T_\tau \int_0^\beta H_{Ib}(\tau_1) d\tau_1 \int_0^\beta H_{Ib}(\tau_2) d\tau_2$$

$$- \frac{1}{3!} T_\tau \int_0^\beta H_{Ib}(\tau_1) d\tau_1 \int_0^\beta H_{Ib}(\tau_2) d\tau_2 \int_0^\beta H_{Ib}(\tau_3) d\tau_3 + \dots \quad (3.40)$$

ou

$$U_I(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} T_\tau \left(\int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau \right)^k \quad (3.41)$$

où T_τ est l'opérateur d'ordre chronologique, lequel s'assure que l'ordre des intégrales soit toujours du temps le plus tard (à gauche) au temps le plus tôt (à droite). Nous pouvons réécrire l'équation sous sa forme la plus concise

$$U_I(\beta) = T_\tau e^{-\int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau}. \quad (3.42)$$

Nous en arrivons donc finalement à chercher

$$T_\tau \left(\mathcal{O}(\tau) e^{-\beta H_a} T_\tau e^{-\int_0^\beta H_{Ib}(\tau) d\tau} \right). \quad (3.43)$$

Donc, concrètement, il est légitime de se demander quel est notre Hamiltonien, une question pour laquelle la réponse dépend bien entendu du problème qu'on veut résoudre. Prenons le cas le plus simple, celui de la **DMFT**. Dans ce cas, nous utilisons l'**AIM** de l'équation **3.1**. Nous distinguons alors trois grandes classes d'algorithme **CT-QMC**. Il y a CT-HYB ^[93],

pour lequel le développement de l'exponentiel est en puissance de l'hybridation entre le bain et l'impureté, posant donc $H_a = H_{bain} + H_I$ et $H_b = H_{hyb}$. Il existe aussi CT-INT [71] et CT-AUX [29], tous deux des développements en puissance des interactions, c'est-à-dire que $H_a = H_{bain} + H_{hyb}$ et $H_b = H_I$, à la différence que CT-AUX utilise un champ auxiliaire pour la résolution du problème.

Chacune de ces techniques a ses propres avantages, par exemple, l'ordre de développement k de l'équation 3.41 est moins élevé pour CT-HYB que CT-INT, ce qui lui permet de se rendre à des températures plus basses ou des U plus élevés. CT-INT et CT-AUX sont équivalentes [62] et ont plutôt l'avantage de pouvoir être utilisés avec de grands amas. Dans ce mémoire, l'algorithme CT-AUX est utilisé.

3.3.2 Introduction aux techniques de CT-QMC

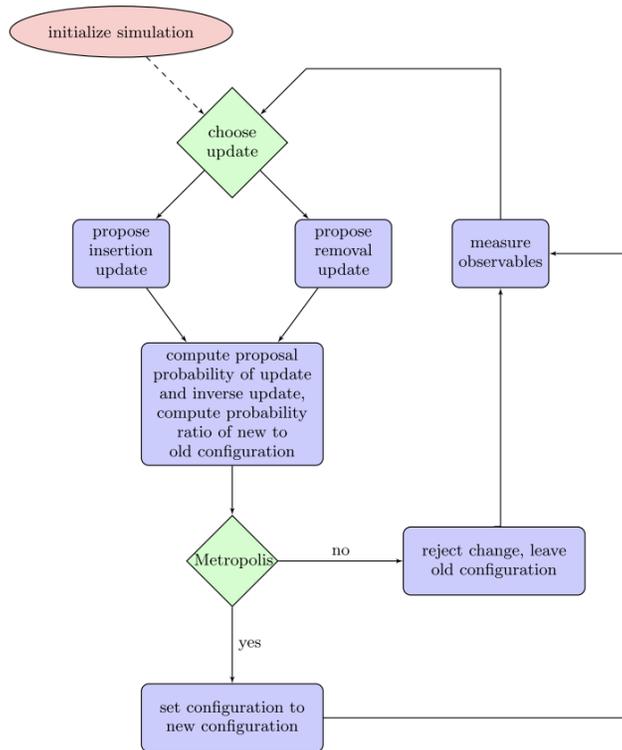


FIGURE 3.3 – Procédure générale pour un algorithme CT-QMC. L'image est tirée de la référence [30].

Ce type de solveur se base sur deux piliers très importants pour résoudre des problèmes. D'abord, pour converger, notre problème doit être ergodique, c'est-à-dire que tous les états du système doivent être accessibles à partir de tout autre état \mathbf{x} . Un cas trivial d'un problème non ergotique serait d'avoir un spin figé sur un site, ce qui empêcherait d'accéder à tous les états d'un système. Ce genre de cas n'est pas attendu ici, mais il existe certaines exceptions non triviales qui peuvent amener à un système non-ergotique, tel que quand certaines symétries spatiales sont brisées dans le bain [82]. Un autre point important est que le bilan détaillé soit

respecté, soit

$$\frac{P(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})}{P(\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{y})}{p(\mathbf{x})} \quad (3.44)$$

où $p(\mathbf{x})$ est la probabilité de se trouver dans la configuration \mathbf{x} , et $P(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})$ est la probabilité de passer de la configuration \mathbf{x} à la configuration \mathbf{y} . Cette dernière a deux parties, la probabilité de proposer une certaine transition, fois la probabilité de l'accepter.

De telles conditions amènent bien entendu à se questionner sur la définition qu'on donne à une configuration. Une configuration \mathbf{x} est donnée par $(k, \gamma, (\tau_1, \dots, \tau_k))$, où k est l'ordre de développement de l'équation 3.41, γ est un indice qui associe, par exemple, un spin ou un site à la configuration. Pour simplifier, nous utiliserons la notation $(k, \gamma, \dots, \tau_k)$. Puis, les τ_i indiquent les temps associés à chaque vertex. En langage commun, un vertex est un événement qui se produit au temps τ , entre les temps 0 et β .

À la figure 3.3, nous y voyons la boucle de l'algorithme CT-QMC. Pour bien comprendre son déroulement, nous procéderons étape par étape en supposant que l'initialisation ait déjà été faite.

1. Choisir le type de mise à jour.

À cette étape, nous devons choisir si nous allons insérer ou retirer un vertex. Une façon de faire consiste à prendre l'un ou l'autre au hasard, avec une probabilité égale.

2. Proposer la nouvelle configuration

Dépendamment de l'étape précédente, la nouvelle configuration sera d'un ordre $k - 1$ ou $k + 1$. Dans le cas où nous retirons un vertex, celui-ci est choisi au hasard parmi ceux qui sont présents. Ainsi, le vertex i a une chance $1/k$ d'être retiré. Dans le cas où nous ajoutons un vertex i , nous le faisons à un temps aléatoire entre 0 et β . Sachant que le temps est continu, nous avons une probabilité $d\tau/\beta$ d'ajouter le vertex i au temps τ_i .

3. Calculer la probabilité d'accepter la mise à jour proposée

À cette étape, nous devons vérifier si la nouvelle configuration sera acceptée. Il incombe donc de vérifier la probabilité qu'on le fasse en trouvant d'abord le rapport dont nous aurons besoin pour calculer la probabilité d'acceptation

$$R((k, \gamma, \dots, \tau_k) \rightarrow (k + 1, \gamma, \dots, \tau_{k+1})) = \frac{w(k + 1, \gamma, \dots, \tau_{k+1})}{w(k, \gamma, \dots, \tau_k)} \frac{\beta}{k + 1} \quad (3.45)$$

où $w(k, \gamma, \dots, \tau_k)$ est un poids associé à la configuration d'ordre k , que nous spécifierons à la section suivante pour l'algorithme CT-INT. Le facteur $\beta/(k + 1)$ nous vient de la probabilité de proposer ce type de transition. Il est à noter que tous les $d\tau_i$ se simplifient, justifiant pourquoi il n'y a pas de facteur $d\tau$ dans l'équation précédente. Dans le cas où nous retirons un vertex, le rapport est plutôt

$$R((k, \gamma, \dots, \tau_k) \rightarrow (k - 1, \gamma, \dots, \tau_{k-1})) = 1/R((k - 1, \gamma, \dots, \tau_{k-1}) \rightarrow (k, \gamma, \dots, \tau_k)) \quad (3.46)$$

Cette étape peut s'avérer très coûteuse en calcul, particulièrement dû au fait qu'il faut calculer le déterminant d'une matrice possiblement très grande.

4. Algorithme de Metropolis-Hastings

Ici, en utilisant l'algorithme de Metropolis, nous acceptons la nouvelle configuration avec une probabilité donnée par

$$P^{acc}(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}) = \min[1, R(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y})]. \quad (3.47)$$

Si elle n'est pas acceptée, l'ancienne configuration est conservée.

5. Mesure des observables

À cette étape, nous mesurons toutes les observables dont nous avons besoin. La façon de faire cela dépend énormément de la technique de calcul utilisée. Nous en discuterons donc plus en détail à la section sur CT-INT. Cette étape est très coûteuse en temps de calcul, il est donc d'usage de ne pas calculer toutes les observables à chaque boucle **CT-QMC**, d'autant plus qu'entre chaque essai Monte Carlo, la corrélation est très forte, ce qui n'apporte donc pas vraiment d'informations importantes.

6. Retourner à l'étape 1

S'il advient que le présent solveur est utilisé pour la **DMFT**, il incombe qu'après avoir moyenné plusieurs fois sur chacune de nos observables, nous retournions à la boucle de **DMFT** pour faire l'auto-cohérence.

3.3.3 Monte Carlo en temps continu, en puissance des interactions (CT-INT)

Dans cette section, l'essentiel des simulations **CT-QMC** devrait avoir été compris. En fait, seulement quelques spécificités sont encore nécessaires pour s'assurer de la compréhension de **CT-QMC**. En particulier, ici nous utiliserons l'exemple de CT-INT. Dans le but de simplifier la compréhension de cette section, nous présentons l'algorithme CT-INT dans le cadre de la **DMFT**. Une généralisation en amas demanderait simplement que l'ajout des vertex se fasse aléatoirement sur un site de l'amas. La figure 3.4 montre une configuration et une contraction possible dans le contexte de l'utilisation de CT-INT.

Nous avons vu qu'avec l'algorithme **CT-QMC** il était nécessaire de séparer l'Hamiltonien en deux parties. Dans cette optique, reprenons l'**AIM** de l'équation 3.1 pour définir la partie perturbative de notre Hamiltonien. Ainsi, Nous prenons $H_a = H_{bain} + H_{hyb}$ et $H_b = H_{imp}$. Nous comprenons alors que nos vertex se résument essentiellement à $U n_{\uparrow}(\tau) n_{\downarrow}(\tau)$. Commentons par considérer la fonction de partition

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_j \langle T_{\tau} H_b(\tau_1) \dots H_b(\tau_j) \rangle_{H_a} \\ &= \frac{(-U)^1}{1!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau) n_{\downarrow}(\tau) \rangle_{H_a} + \frac{(-U)^2}{2!} \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2) \rangle_{H_a} + \dots \\ &\quad + \frac{(-U)^k}{k!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_k \langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) \dots n_{\uparrow}(\tau_k) n_{\downarrow}(\tau_k) \rangle_{H_a}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

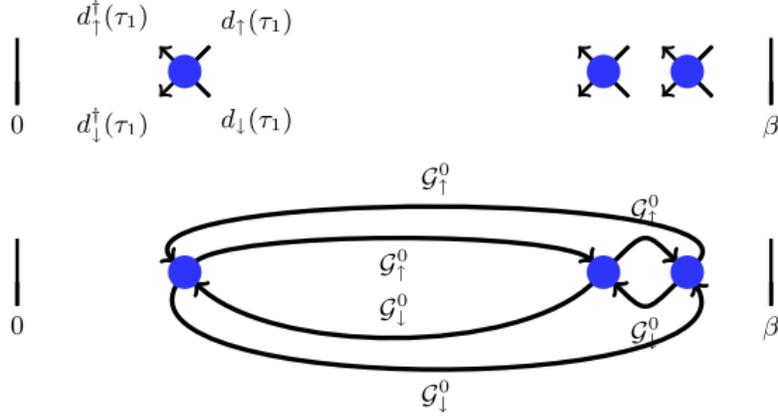


FIGURE 3.4 – Les vertex et les contractions de l’algorithme CT-INT. Sur la figure du haut, nous voyons une configuration d’ordre trois pour l’algorithme CT-INT avec des vertex $Un_{\uparrow}(\tau_i)n_{\downarrow}(\tau_i)$ de double occupation à des temps τ_i . Sur celle du bas, nous voyons une des contractions possibles. Cette figure est tirée de la référence [30].

Les moyennes que nous voyons ne sont pas très évidentes à calculer. Pour cette raison, nous utiliserons deux astuces. D’abord, nous savons bien que notre Hamiltonien H_a sur lequel les moyennes est indépendant du spin, et donc, il est diagonal en spin. Pour cette raison, nous pouvons séparer nos moyennes en deux termes multipliés, contenant des spins différents. Cette dernière étape devient plus claire quand nous regardons la trace de ce que nous avons dans le deuxième terme de l’intégrale de l’équation 3.48 et que nous considérons que H_a peut être décortiqué comme $H_a = H_{a\downarrow} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_{a\uparrow}$

$$\begin{aligned} \left\langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} &= \text{Tr} \left(e^{-\beta H_a} T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2) \right) \\ &= T_{\tau} \text{Tr} \left(e^{-\beta (H_{a\downarrow} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_{a\uparrow})} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2) \right), \end{aligned} \quad (3.49)$$

et puisque $[H_{a\downarrow} \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes H_{a\uparrow}] = 0$,

$$\begin{aligned} \left\langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} &= T_{\tau} \text{Tr} \left(e^{-\beta H_{a\downarrow} \otimes \mathbb{1}} e^{-\beta \mathbb{1} \otimes H_{a\uparrow}} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2), \right) \\ &= T_{\tau} \text{Tr} \left(e^{-\beta H_{a\downarrow} \otimes \mathbb{1}} n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_2) e^{-\beta \mathbb{1} \otimes H_{a\uparrow}} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) \right) \\ &= T_{\tau} \text{Tr} \left(\left(e^{-\beta H_{a\downarrow}} \otimes \mathbb{1} \right) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_2) \left(\mathbb{1} \otimes e^{-\beta H_{a\uparrow}} \right) n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) \right). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Étant donné qu’un état général peut être donné par $\sum_m \sum_n |m\rangle_{\downarrow} \otimes |n\rangle_{\uparrow}$, nous pouvons réécrire notre trace en deux traces s’effectuant sur chacun des sous-espaces de spin

$$\begin{aligned} \left\langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) n_{\downarrow}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} &= T_{\tau} \text{Tr}_{\downarrow} \text{Tr}_{\uparrow} \left(\left(e^{-\beta H_{a\downarrow}} \otimes \mathbb{1} \right) n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_2) \left(\mathbb{1} \otimes e^{-\beta H_{a\uparrow}} \right) n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) \right) \\ &= T_{\tau} \text{Tr}_{\downarrow} \left(e^{-\beta H_{a\downarrow}} n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_2) \right) \cdot \text{Tr}_{\uparrow} \left(e^{-\beta H_{a\uparrow}} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) \right) \\ &= T_{\tau} \text{Tr} \left(e^{-\beta H_a} n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_2) \right) \cdot \text{Tr} \left(e^{-\beta H_a} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) \right) \\ &= T_{\tau} \left\langle n_{\downarrow}(\tau_1) n_{\downarrow}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \left\langle T_{\tau} n_{\uparrow}(\tau_1) n_{\uparrow}(\tau_2) \right\rangle_{H_a}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Par la suite, dans le but de simplifier davantage, nous utilisons alors le théorème de Wick, qui stipule que nous pouvons factoriser davantage notre moyenne si nous en considérons toutes les permutations possibles. Concrètement,

$$\begin{aligned}
T_\tau \left\langle n_\downarrow(\tau_1) n_\downarrow(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \left\langle n_\uparrow(\tau_1) n_\uparrow(\tau_2) \right\rangle_{H_a} &= T_\tau \prod_\sigma \left\langle c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{0,\sigma}(\tau_1) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_2) c_{0,\sigma}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \\
&= T_\tau \prod_\sigma \left(\left\langle c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{0,\sigma}(\tau_1) \right\rangle_{H_a} \left\langle c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_2) c_{0,\sigma}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \right. \\
&\quad \left. + \left\langle c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{0,\sigma}(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \left\langle c_{0,\sigma}(\tau_1) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \right) \\
&= T_\tau \prod_\sigma \left(\left\langle c_{0,\sigma}(\tau_1) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_1) \right\rangle_{H_a} \left\langle c_{0,\sigma}(\tau_2) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \right. \\
&\quad \left. - \left\langle c_{0,\sigma}(\tau_2) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_1) \right\rangle_{H_a} \left\langle c_{0,\sigma}(\tau_1) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_2) \right\rangle_{H_a} \right) \quad (3.52)
\end{aligned}$$

où nous reconnaissons la fonction de Green sans interactions $G_\sigma^0(\tau_i - \tau_j) = -\langle T_\tau c_{0,\sigma}(\tau_i) c_{0,\sigma}^\dagger(\tau_j) \rangle_{H_a}$. Il se trouve que cette fonction de Green est liée à la fonction d'hybridation par l'équation

$$\mathcal{G}_\sigma^0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_0 - \Delta_\sigma(i\omega_n)} \quad (3.53)$$

où ϵ_0 est le niveau d'énergie de l'impureté, habituellement 0 en **DMFT**. Nous relient la fonction de Green en temps imaginaire à celle en fréquence de Matsubara avec la transformée de Fourier

$$G_\sigma^0(\tau_i - \tau_j) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}_\sigma^0(i\omega_n). \quad (3.54)$$

Maintenant que nous comprenons comment nous simplifions la résolution de notre problème pour le terme de deuxième ordre, nous pouvons généraliser le tout pour un terme d'ordre k . La façon de faire consiste à calculer le déterminant

$$\left\langle n_\uparrow(\tau_1) n_\downarrow(\tau_1) \dots n_\uparrow(\tau_k) n_\downarrow(\tau_k) \right\rangle_{H_a} = \det \mathbf{D}_k^\uparrow \det \mathbf{D}_k^\downarrow \quad (3.55)$$

avec $(\mathbf{D}_k^\sigma)_{ij} = \mathcal{G}_\sigma^0(\tau_i - \tau_j)$. Tous ces calculs nous amènent finalement au ratio de l'ajout d'un vertex dont nous avons besoin à l'étape 3 de l'algorithme **CT-QMC**

$$R((k, \gamma, \dots, \tau_k) \rightarrow (k+1, \gamma, \dots, \tau_{k+1})) = \frac{\beta U}{(k+1)} \prod_\sigma \frac{\det \mathbf{D}_{k+1}^\sigma}{\det \mathbf{D}_k^\sigma}. \quad (3.56)$$

Ne reste plus que l'expression d'une mesure pour CT-INT à l'étape 5 de l'algorithme **CT-QMC**. En particulier, la mesure de la fonction de Green s'avérant être d'un grand intérêt pour la compréhension du modèle de Hubbard, il semble donc naturel de donner l'exemple de sa mesure.

Pour la i -ième configuration Monte Carlo, nous obtenons la fonction de Green

$$G_{\sigma,i}(\tau - \tau') = - \frac{\langle T_{\tau} c_{\sigma}(\tau) c_{\sigma}^{\dagger}(\tau') n_{\sigma}(\tau_1) n_{\sigma}(\tau_2) \dots n_{\sigma}(\tau_k) \rangle_{H_a}}{\langle n_{\sigma}(\tau_1) n_{\sigma}(\tau_2) \dots n_{\sigma}(\tau_k) \rangle_{H_a}} \quad (3.57)$$

avec, encore une fois, $\langle \dots \rangle_{H_a}$ dénotant toutes les contractions de Wick qui peuvent être faites. Le dernier dénominateur se calcule comme à l'équation 3.55, et le numérateur est calculé similairement, sauf qu'une colonne ($[\mathcal{G}_{\sigma}^0(\tau - \tau'), \mathcal{G}_{\sigma}^0(\tau_1 - \tau'), \dots, \mathcal{G}_{\sigma}^0(\tau_k - \tau')]$) et une rangée ($[\mathcal{G}_{\sigma}^0(\tau - \tau'), \mathcal{G}_{\sigma}^0(\tau - \tau_1), \dots, \mathcal{G}_{\sigma}^0(\tau - \tau_k)]$) s'ajoutent. Les rapports de déterminants peuvent se calculer avec des formules assez rapides dues à Sherman-Morrison et Woodbury [33].

Finalement, nous avons alors une bonne estimation de la fonction de Green locale après N essais

$$G_{\sigma}(\tau - \tau') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G_{\sigma,i}(\tau - \tau'). \quad (3.58)$$

3.3.4 Problème de signe

Nous n'en avons pas discuté à la section précédente, mais la technique de calcul présente un problème majeur pour la convergence, soit le problème de signe. Le problème est le suivant : alors qu'on tente de converger vers la solution d'une fonction habituellement positive, le problème de signe consiste à rencontrer une contribution négative à cette fonction, ralentissant ainsi la convergence. Dans la situation que nous avons présentée pour CT-INT, il se trouve qu'il y a deux sources différentes menant au problème de signe. Il est possible de se débarrasser de la première en étant ingénieux dans la façon de procéder au calcul, mais le deuxième, beaucoup plus fondamental, est jusqu'à présent impossible à éviter [87]. Ici, nous présentons formellement ce qu'est le problème de signe, expliquons ses deux sources pour l'algorithme CT-INT et comment régler sa portion triviale.

Formellement, ce que nous tentons de faire avec un algorithme de style **CT-QMC**, c'est de calculer des observables en utilisant l'échantillonnage par Monte Carlo, soit une technique bien adaptée pour échantillonner des distributions de probabilité afin de calculer la moyenne d'une observable A

$$\langle A \rangle_p = \frac{1}{Z} \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{x} \mathcal{A}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) \quad (3.59)$$

où \mathcal{C} est l'espace dans lequel nous intégrons, \mathcal{A} est une certaine quantité associée à A , et $p(\mathbf{x})$ est le poids à \mathbf{x} de \mathcal{A} . Dans le cas d'une distribution de probabilité, le poids $p(\mathbf{x})$ est strictement positif, mais qu'arrive-t-il si ce même poids pouvait être négatif? Bien entendu, ça n'a pas vraiment de sens d'avoir une distribution de probabilité négative, toutefois, si nous n'échantillonons pas une distribution de probabilité, rien n'empêche le poids de devenir négatif. Il suffit de s'adapter et de créer une distribution purement positive comme $|p(\mathbf{x})|$ où nous envoyons plutôt le signe dans l'observable. Dans ce cas, il faut plutôt calculer notre observable à l'aide de

$$\langle A \rangle_p = \frac{\int_{\mathcal{C}} d\mathbf{x} |p(\mathbf{x})| \text{sign}(p(\mathbf{x})) \mathcal{A}(\mathbf{x})}{\int_{\mathcal{C}} d\mathbf{x} |p(\mathbf{x})| \text{sign}(p(\mathbf{x}))}. \quad (3.60)$$

Maintenant, autant le numérateur que le dénominateur peuvent être échantillonnés par Monte Carlo. Dans le cas qui nous concerne pour les algorithmes de type **CT-QMC**, nous tentons d'évaluer le poids de Boltzmann dans une base qui n'est pas diagonale et qui n'a donc pas, *a priori*, de raisons d'être strictement positif, justifiant alors de se concentrer sur le problème de signe $\langle S \rangle$ et de le quantifier. Nous pouvons aisément le définir comme

$$\langle S \rangle = \frac{\int_{\mathcal{C}} d\mathbf{x} \text{sign}(p(\mathbf{x})) |p(\mathbf{x})|}{\int_{\mathcal{C}} d\mathbf{x} |p(\mathbf{x})|} \quad (3.61)$$

où $|p(\mathbf{x})|$ est la valeur absolue du poids $p(\mathbf{x})$. Nous comprenons alors que si $\langle S \rangle = 1$, il n'y a aucun problème de signe, mais si $0 < \langle S \rangle < 1$ alors la convergence sera plus difficile, voir impossible parce qu'on échantillonne alors une observable faite de contributions qui sont parfois positives, parfois négatives.

Maintenant, d'où peut bien provenir le problème de signe dans notre cas? La première source est assez évidente si nous regardons l'équation 3.48. Nous y voyons le terme $(-U)^k$, ce qui veut dire qu'à chaque exposant k impaire, nous avons un poids négatif qui désavantagera forcément la convergence. Heureusement, tel que démontré par Rubtsov ^[71], nous pouvons corriger ce problème pour CT-INT en posant que le développement ne se fait plus avec les termes d'interaction $n_{\uparrow}(\tau)n_{\downarrow}(\tau)$, mais plutôt avec $(n_{\uparrow}(\tau) - \alpha_{\uparrow})(n_{\downarrow}(\tau) - \alpha_{\downarrow})$ où $\alpha_{\uparrow} + \alpha_{\downarrow} = 1$ et $\alpha_{\uparrow}\alpha_{\downarrow} \leq 0$. Une telle transformation implique que la fonction de Green \mathcal{G}_{σ}^0 devient $\tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0 = 1/(i\omega_n - \epsilon_{0,\sigma} - U\alpha_{-\sigma} - \Delta_{\sigma})$ et que les déterminants de l'équation 3.55 deviennent

$$\mathbf{D}_k^{\sigma} = \begin{vmatrix} \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(0) - \alpha_{\sigma} & \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(\tau_1 - \tau_2) & \dots & \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(\tau_1 - \tau_k) \\ \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(\tau_2 - \tau_1) & \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(0) - \alpha_{\sigma} & \ddots & \vdots \\ \dots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(\tau_k - \tau_1) & \dots & \dots & \tilde{\mathcal{G}}_{\sigma}^0(0) - \alpha_{\sigma} \end{vmatrix}. \quad (3.62)$$

Pour retrouver la symétrie entre spins up et down qui semble être brisée en général par ce choix, les variables α_{σ} deviennent des variables aléatoires. Ces variables aléatoires sur lesquelles nous devons sommer deviennent analogues aux champs auxiliaires qu'on introduit dans la section suivante pour l'algorithme CT-AUX.

Bien que le dernier changement ait corrigé le problème de signe trivial, l'équation 3.62 en contient un autre, cette fois bien plus difficile et fondamental. En effet, l'anticommutation des fermions a pour conséquence de créer de nouveaux poids négatifs, limitant la vitesse de convergence de notre algorithme CT-INT. Ce problème de signe n'est toutefois pas une limite appartenant simplement à CT-INT, mais bien à tous les algorithmes de type de Monte Carlo Quantique ^[52].

3.3.5 Monte Carlo en temps continu avec champ auxiliaire (CT-AUX) sur amas

Il existe bien d'autres façons de formuler un algorithme de type **CT-QMC**. Discutons de celui utilisé pour la réalisation de ce mémoire, CT-AUX. Cet algorithme est très similaire à CT-INT, toutefois, il est intrinsèquement exempt du problème de signe trivial grâce à un champ auxiliaire, d'où son nom. Ici, nous présentons quelques-unes des caractéristiques principales de CT-AUX généralisé aux amas. Nous n'entrons pas dans les détails ici vu les similarités de l'algorithme avec CT-INT.

Commençons par séparer notre Hamiltonien en deux portions, une sans interactions, et une autre avec interactions, en partant de l'équation 3.24. Nous avons alors

$$H_U = U \sum_{i=0}^{N_c} \left(n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \frac{n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}}{2} \right) - \frac{K}{\beta},$$

$$H_0 = H_{AIMc} - H_U + K/\beta, \quad (3.63)$$

où K n'est qu'une constante. Nous pouvons maintenant trouver la décomposition en champ auxiliaire de la partie interaction de notre Hamiltonien

$$1 - \frac{\beta U}{K} \sum_{i=0}^{N_c} \left(n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \frac{n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}}{2} \right) = \frac{1}{2N_c} \sum_{i,s_i=\pm 1} e^{\gamma s_i (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})}, \quad (3.64)$$

en posant que $\cosh(\gamma) = 1 + \frac{U\beta N_c}{2K}$. Nous avons ensuite la fonction de partition

$$Z = \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k \left(\frac{K}{2\beta N_c} \right)^k \text{Tr} \prod_{i=k}^1 e^{-\Delta\tau_i H_0} e^{s_i \gamma (n_{x_i,\uparrow} - n_{x_i,\downarrow})}, \quad (3.65)$$

où x est le site, et $\Delta\tau_i \equiv \tau_{i+1} - \tau_i$ pour $i < k$ et $\Delta\tau_k \equiv \beta(\tau_k - \tau_1)$. Nous voyons ainsi que le terme $(\frac{K}{2\beta N_c})^k$ ne peut plus être négatif, réglant ainsi le problème de signe trivial.

Le reste des calculs est plutôt similaire, du moins dans l'esprit du calcul, à l'algorithme CT-INT. Pour conclure sur les calculs d'amas avec CT-AUX, il y a quelques différences à prendre en considération dans l'élaboration de l'algorithme, notamment, la définition d'un vertex, auquel un spin et un site doivent maintenant y être associé, et des probabilités de transitions qui sont évidemment différentes de CT-INT. Nous pouvons retrouver les calculs détaillés et les probabilités de transition dans un article de revu par Gull et al. [30], lequel est une référence pour tous les algorithmes principaux du style **CT-QMC**.

Chapitre 4

Modèle

Jusqu'ici, nous devrions comprendre comment les calculs procèdent de manière générale. Toutefois, avant de faire des calculs, il est important de savoir comment nous implémenterons le tout. Dans cette section, nous définissons d'abord le Hamiltonien et les conventions de celui-ci, puis, nous présentons et commentons les amas qui seront utilisés pour le mémoire. Par la suite, nous discutons des observables du programme **CTMO**, suivi d'une définition pour les valeurs critiques que nous rencontrerons dans les résultats. La dernière section de ce chapitre présente l'algorithme de compilation des données en sortie du programme **CTMO**.

4.1 Hamiltonien et conventions

Nous utiliserons le Hamiltonien du modèle de Hubbard à une bande sur un réseau triangulaire en deux dimension. Explicitons-le dans le langage de la seconde quantification

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t' c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (4.1)$$

Nous avons déjà vu cette dernière équation à l'équation 2.23, où nous n'avions toutefois pas spécifié les valeurs de t et t' . Ici, t' représente le terme de saut dans la direction (1,1) sur le réseau réel. Ainsi, notre réseau infini peut être compris en regardant la section de réseau de la figure 2.2 a), donc un réseau de style triangulaire à base carrée. Le choix de base ne change bien sûr pas la topologie du réseau, ni sa physique, mais a des implications sur la forme de la zone de Brillouin. Cela a ensuite des conséquences sur la division en sous-zones, que nous expliquerons à la prochaine section.

Nous travaillons dans des unités où t est l'unité. En d'autres termes, U , T et t' sont en unités de t . De même, \hbar , k_B et l'espacement du réseau sont l'unité.

Nous avons vu dans la section 2.1.2 que le choix du signe de t' influence la forme que prennent les résultats finaux. Pour cette raison, nous avons choisi d'utiliser la convention des cuprates pour nos travaux, c'est-à-dire que $t > 0$ et $t' < 0$.

4.2 Implémentation de la DCA

Pour réaliser nos calculs, nous utiliserons l'algorithme CT-AUX, expliqué à la section 3.3.5. Suivant ce que nous avons appris à la section sur la DCA, sec. 3.2, nous devons définir nos amas et leur périodicité pour notre travail. À la figure 4.1, nous définissons tous les amas qui seront utilisés au cours de ce mémoire.

Dans ces amas, nous avons le cas de la DMFT, où nous intégrons sur toute la zone de Brillouin, et les cas de DCA, où nous intégrons sur chacune des zones autour des vecteurs \mathbf{K}_i , où i est l'indice de la zone. Pour les amas en DCA, la définition des vecteurs de translation du réseau réel peut avoir un impact important sur les résultats puisqu'ils définissent les conditions aux limites périodiques du réseau. Ces vecteurs vont comme suit, avec \mathbf{R}_{1, N_c} , \mathbf{R}_{2, N_c} les deux vecteurs de translation pour le réseau N_c :

1. $\mathbf{R}_{1, N_c=4} = (2, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=4} = (0, 2)$
2. $\mathbf{R}_{1, N_c=6^*} = (3, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=6^*} = (0, 2)$
3. $\mathbf{R}_{1, N_c=6} = (3, -1)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=6} = (0, 2)$
4. $\mathbf{R}_{1, N_c=16} = (4, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=16} = (0, 4)$

Ces vecteurs nous permettent de définir ceux dans l'espace réciproque les vecteurs \mathbf{R}^* qui servent à définir les vecteurs \mathbf{K}_i :

1. $\mathbf{R}_{1, N_c=4}^* = (\pi, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=4}^* = (0, \pi)$
2. $\mathbf{R}_{1, N_c=6^*}^* = (2\pi/3, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=6^*}^* = (0, \pi)$
3. $\mathbf{R}_{1, N_c=6}^* = (2\pi/3, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=6}^* = (\pi/3, \pi)$
4. $\mathbf{R}_{1, N_c=16}^* = (\pi/2, 0)$, $\mathbf{R}_{2, N_c=16}^* = (0, \pi/2)$

Dans cette section, nous étudierons la littérature liée à la définition des amas, en s'assurant de commenter les nôtres, sur la base de 3 critères, soit, la taille des amas, la périodicité des réseaux réels, et finalement, les zones d'intégration dans l'espace réciproque.

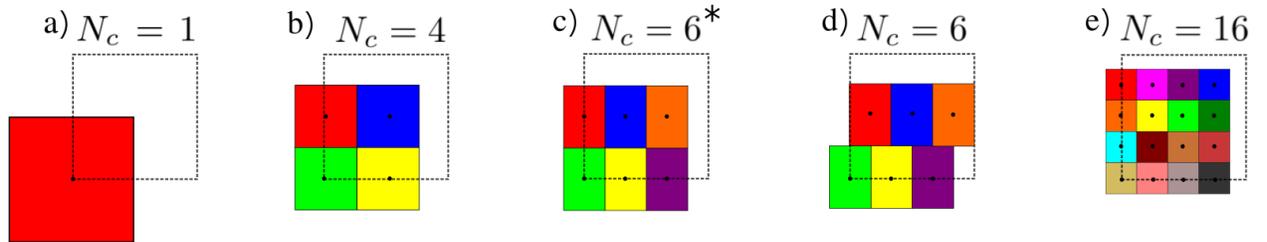


FIGURE 4.1 – a) Les cinq divisions de la zone de Brillouin. Le pointillé gris représente la zone de Brillouin de 0 à 2π . La self-énergie est calculée sur chacune des zones indiquées par les points noirs, définis comme \mathbf{K} , en leur centre. Nous avons 4 différentes tailles d'amas, soit, $N_c = 1$, $N_c = 4$, $N_c = 6$ et $N_c = 16$, et deux différentes façons de définir l'amas à six sites, $N_c = 6^*$ étant non-bipartite quand $t' = 0$, contrairement à $N_c = 6$. La bipartité est discutée en plus de détails à l'Annexe S.3. L'amas $N_c = 1$ est le cas de la DMFT.

4.2.1 Taille des amas

Dans le but de savoir quelle taille d’amas est idéale, étudions le cas de la référence [56]. Dans ce papier, plusieurs tailles d’amas sont comparées en utilisant la température de Néel comme outil de comparaison, c’est-à-dire la température au delà de laquelle un matériau AFM devient paramagnétique. Il semble alors qu’un amas de 16 sites est assez grand pour décrire un réseau infini. Avec des amas de taille pareille, il ne faut pas compter sur le fait de réussir à travailler à des températures comparables à Sordi et al. [77]!

La raison pour laquelle il faut autant de sites est plutôt simple. Dans un réseau carré où $t' = 0$, l’AFM n’étant pas frustré, il faut beaucoup de sites pour le simuler sur l’amas. Heureusement, décrire l’AFM à longue portée n’est pas toujours nécessaire. Dans les références [28, 72], l’étude d’amas de taille plus petite est faite dans des cas avec un peu de frustration, révélant que de petites tailles révèlent des effets intéressants, aussi présents dans des amas de grande taille.

L’ordre magnétique à longue portée a bien sûr un effet sur la rapidité de convergence en taille des amas. Dans le papier d’Hébert et al. [41], il est montré comment la frustration détruit la phase AFM dans le bain. Ainsi, la taille nécessaire pour simuler un amas sans AFM est beaucoup plus petite.

C’est dans le papier de Dang et al. [15] que nous retrouvons la convergence des amas pour un réseau triangulaire. Pour vérifier quelle taille d’amas était nécessaire pour un réseau triangulaire, ils ont étudié comment la transition de Mott de premier ordre convergeait. Ainsi, ils ont pu observer qu’un amas à 4 sites pouvait être assez grand pour décrire la complexité de la transition de Mott au demi-remplissage.

Bien que toutes ces études aient été intéressantes, la façon dont nous avons formé les amas nous force à revisiter la convergence des amas selon leur taille. Ainsi, nous avons sélectionné 4 tailles différentes, soit 1, 4, 6 et 16 sites, présentés à la figure 4.1.

4.2.2 Périodicité des réseaux

On sait bien qu’avec la DCA, la périodicité du réseau réel est un point bien important pour la qualité d’un réseau. Pour améliorer les réseaux avec conditions périodiques, Haan et al. [31] ont d’abord introduit les conditions périodiques hélicoïdales à des modèles pour représenter les cuprates. C’est par la suite que Betts et al. ont repris l’idée et l’ont grandement améliorée pour créer ce que nous appelons maintenant les réseaux de Betts [7, 8]. À partir de ceux-ci, nous pouvons définir plusieurs critères importants qui guideront la qualité de l’amas utilisé, dont trois qui nous intéresseront particulièrement, soit, la bipartité, la tripartité, et les imperfections ferromagnétiques.

Le premier critère sur la bipartité est certainement le plus important pour nous. Dans la théorie des graphes, nous définissons la bipartité comme étant la qualité qu’a un réseau de n avoir aucun cycle avec un nombre de vertex impair. La généralisation de la bipartité à un ordre k est nommé la k -colorabilité. À la section 2.1.2, c’est la bipartité qui nous a permis de révéler d’importantes symétries dans le réseau carré. C’est aussi la bipartité du saut au premier voisin qui nous permet de faire une transformation particule-trou en changeant seulement le signe de t' , tel que vu à l’annexe S.2.

Pour comprendre comment la bipartiticité peut affecter nos travaux, nous devons regarder la figure 4.2. Cette figure compare notre seul amas non-bipartite $N_c = 6^*$ avec son homologue bipartite $N_c = 6$. Une condition pour la symétrie particule-trou, discuté à l'annexe S.2, est que le réseau infini puisse être divisé en deux sous-réseaux, et qu'ainsi, le terme de saut crée un trou dans un des sous-réseaux en même temps qu'il crée un électron dans l'autre sous-réseau. Dans notre exemple, nous avons que la séparation en deux sous-réseaux de l'amas $N_c = 6^*$ impose qu'un saut au premier voisin ne fait pas toujours changer de sous-réseau. Le non respect de cette bipartiticité a des conséquences importantes sur un réseau carré, où les particules et les trous ont alors des comportements différents. Les conséquences d'un tel réseau ne se font pas seulement sentir sur les réseaux carrés, mais aussi sur les réseaux triangulaires où les transformations particules-trous ne sont plus respectées. Aussi, sachant que les fluctuations AFM à longue portée sont fondamentalement bipartites, nous en comprenons que cet ordre s'en trouve interdit dans un tel réseau. À l'annexe S.3, nous parlons plus en détail des conséquences de la non-bipartiticité sur les réseaux que nous avons choisi. Il se trouve qu'un seul de nos amas de respecte pas la bipartiticité, soit l'amas $N_c = 6^*$.

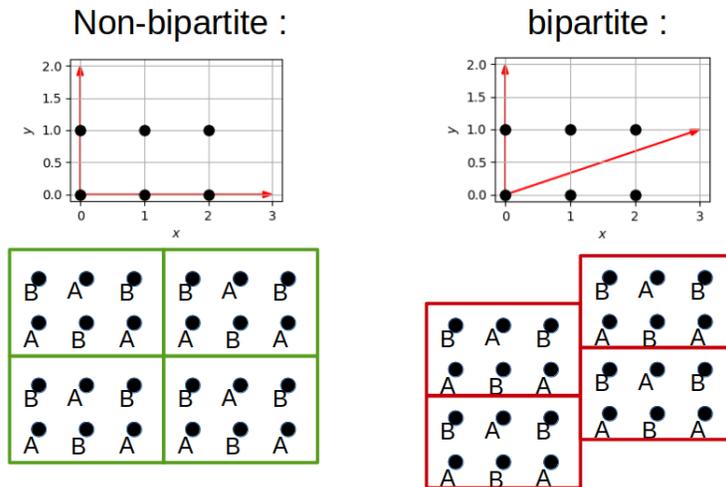


FIGURE 4.2 – Preuve de la non-bipartiticité et de la bipartiticité, respectivement, des réseaux $N_c = 6^*$ et $N_c = 6$. En haut, nous voyons les vecteurs de translation des réseaux $N_c = 6^*$ et $N_c = 6$. En bas, nous voyons la conséquence sur les conditions aux limites périodiques des amas. A et B dénote le nom de deux sous-réseaux

Le deuxième critère que nous devrions regarder est la tripartiticité. C'est la caractéristique qu'à un réseau à pouvoir être séparé en trois sous-réseaux qui se répètent. Il est possible de lier la tripartiticité à la 3-colorabilité. N'importe quel réseau triangulaire ou carré infini a cette propriété qui est montrée à la figure 4.3 a). Bien que les conditions aux limites de l'amas b) permettent la tripartiticité quand les premiers voisins sont connectés, ce n'est plus le cas quand les seconds voisins le sont aussi. Il est plutôt malheureux qu'aucun de nos amas ne permette cette propriété car l'ordre spiral dans les réseaux triangulaires peut seulement se révéler dans un tel cas. Sur la figure 4.3, nous montrons deux de nos réseaux qui ne permettent pas d'ordre tripartite. Pour les réseaux $N_c = 4$ et $N_c = 16$, il est assez trivial de comprendre qu'ils n'ont également pas cette propriété.

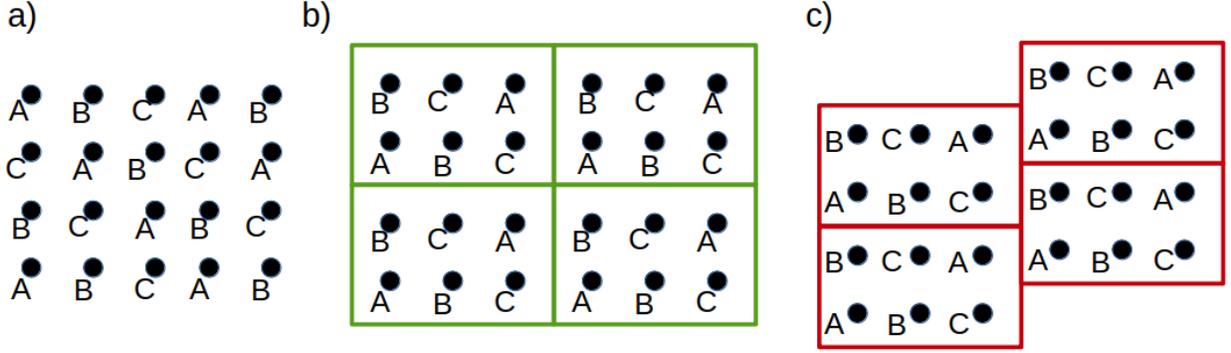


FIGURE 4.3 – a) Réseau tripartite divisé en 3 sous-réseaux. b-c) Preuve de la non-triparticit  des r seaux $N_c = 6^*$ et $N_c = 6$. Nous montrons que les conditions aux limites p riodiques ne permettent pas un ordre comme en a). A, B et C d notent le nom de trois sous-r seaux

La derni re propri t  qui nous int resse est une de celles introduites par Betts et al. [7], pr cis ment, celle de la perfection ferromagn tique. Cette propri t  topologique des amas avec conditions p riodiques se mesure par ce que Betts et al. appellent le nombre d'imperfections ferromagn tiques \mathcal{I}_f . Il devient alors utile de d finir ce que c'est. Dans un r seau carr  infini, nous nous attendons   avoir 4 premiers voisins, 8 deuxi mes voisins, et 12 troisi mes voisins, soit, pour le n -i me voisin, $4n$ sites. Le nombre d'imperfections ferromagn tiques est d fini comme le nombre de sites du dernier voisin si l'avant-dernier n'est pas complet.

Dans les exemples de la figure 4.4, les m mes qu'utilis s par Betts et al. pour expliquer \mathcal{I}_f , nous utilisons ces amas que nous r p tons pour cr er notre r seau infini. Prenons un site, le site 0 dans l'exemple du r seau 22B, nous trouvons les premiers voisins, soit 4, puis les deuxi mes voisins, 8, et pour finir, les troisi mes voisins, 9. Bien que le nombre de troisi mes voisins ne soit pas complet, l'important, c'est que les premiers et deuxi mes voisins soient complet. Ainsi $\mathcal{I}_f(22B) = 0$. Dans l'exemple 22C, il y a 4 premiers voisins, 8 deuxi mes voisins, 8 troisi mes voisins et 1 quatri me voisin. Puisque l'ensemble des troisi mes voisins possibles n'est pas complet et qu'il y a un quatri me voisin, il y a une imperfection ferromagn tique, donc $\mathcal{I}_f(22C) = 1$.

Connaissant maintenant cette qualit  des r seau avec conditions p riodiques, voici ce que nous avons comme r sultat :

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{fc}(N_c = 4) &= 1 \\ \mathcal{I}_{fc}(N_c = 6^*) &= 2 \\ \mathcal{I}_{fc}(N_c = 6) &= 2 \\ \mathcal{I}_{fc}(N_c = 16) &= 1\end{aligned}$$

o  \mathcal{I}_{fc} sont les imperfections pour un r seau carr . Il semble alors que nous utilisons des r seaux hautement imparfaits. Toutefois, il est   noter que nous utiliserons des r seaux triangulaires, ce qui a pour cons quence que nous ne devons pas regarder seulement les voisins de la base carr e, mais aussi ceux dans la diagonale qui peuvent aussi  tre consid r s comme des premiers voisins ! Ainsi, nous pouvons facilement v rifier que tous les sites sont connect s ensemble au premier voisin pour les r seaux ($N_c = 4$), ($N_c = 6^*$) et ($N_c = 6$), ce qui les rend

22B

22C

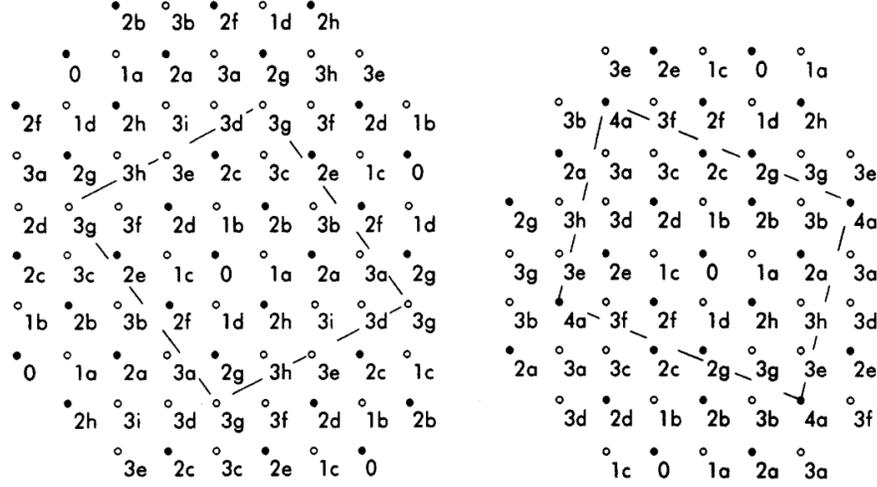


FIGURE 4.4 – Deux réseaux de Betts, soit le 22B et le 22C ayant les vecteurs de translation $\mathbf{R}_1(22B) = (4, 2)$, $\mathbf{R}_2(22B) = (-4, 3)$ et $\mathbf{R}_1(22C) = (1, 4)$, $\mathbf{R}_2(22C) = (-5, 2)$. Le numéro des premiers, deuxième, troisième et, le cas échéant, quatrième voisin sont donnés. Cette figure est tirée de la référence [7]

parfaits. Pour le réseau $N_c = 16$, nous pouvons remarquer que nous pouvons identifier les 6 premiers voisins, et qu'il n'y a aucun troisième voisin, cela rend le réseau parfait du point de vu des imperfections ferromagnétiques d'un réseau triangulaire. En résumé, nous avons

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{ft}(N_c = 4) &= 0 \\ \mathcal{I}_{ft}(N_c = 6^*) &= 0 \\ \mathcal{I}_{ft}(N_c = 6) &= 0 \\ \mathcal{I}_{ft}(N_c = 16) &= 0\end{aligned}$$

où \mathcal{I}_{ft} sont les imperfections ferromagnétiques d'un amas triangulaire.

4.2.3 Effet du choix des zones d'intégration

Après avoir choisi l'amas et sa périodicité, nous pouvons trouver la position de nos sites sur l'espace réciproque. Avec ces positions en tête, nous devons définir les zones sur lesquelles nous intégrerons la self-énergie. À la référence [28], il est montré sur des réseaux de 4 sites de même périodicité qu'il y a des façons de définir la forme des zones pour améliorer les résultats. Il est expliqué que pour avoir des résultats plus près des grands amas, inclure une portion de la surface de Fermi sans interaction dans une zone normalement sans surface de Fermi peut aider.

Puisque ce mémoire se veut très exploratoire, les zones d'intégration se sont limitées à ce qu'il y a de plus simple, soit des zones d'intégration strictement rectangulaires, tel que nous le voyons sur la figure 4.1.

4.3 Observables

Utilisant le programme **CTMO** de Charles-David Hébert et Maxime Charlebois, il faut savoir que nous avons accès à plusieurs observables intéressantes pour nos travaux.

Nous avons d'abord accès à la fonction de Green en fréquence de Matsubara. Nous l'avons en fait pour chacune des zones d'intégration que nous définirons dans les sections suivantes. Il en découle naturellement que nous avons accès aux fonctions d'hybridation et de self-énergie pour chacune de nos zones d'intégration, mais celles-ci seront beaucoup moins utilisées pour la compréhension de nos résultats. Par la suite, dans les observables non matricielles, donc des scalaires, nous avons accès à l'occupation $\langle n \rangle$, soit, le nombre moyen d'électrons par site, que nous noterons simplement n . Dans le cas du demi-remplissage plus spécifiquement, nous utiliserons la double occupation pour suivre les changements de phase. Nous définissons la double occupation D comme $\langle n_{\downarrow} n_{\uparrow} \rangle$, où nous avons la moyenne du nombre de fois où un site a deux électrons. Bien que nous ayons accès à plusieurs autres observables, nous nous concentrons particulièrement sur ces dernières pour réaliser nos travaux.

4.4 Définition des valeurs critiques

Dans les sections suivantes, beaucoup de valeurs critiques sont utilisées. Dans le but d'alléger le texte, et dans le but de ne jamais avoir à chercher trop longtemps la définition d'une valeur critique, cette section les définit toutes.

Les lignes de Widom peuvent être utilisées comme indicateur d'une transition de premier ordre pour un ensemble de paramètres proches, ou pour montrer certaines tendances qui ne seraient pas claires à l'œil nu. Elles sont généralement définies comme le point d'inflexion d'un paramètre thermodynamique.

Lorsque nous voulons montrer la présence de la transition de Mott de premier ordre par rapport à U , nous pouvons utiliser la double occupation, définie à la Sec. 4.3. Cette observable a été utilisée dans de nombreux articles, tel que les références [64, 91]. Nous pouvons alors trouver la ligne de Widom de la double occupation simplement en faisant :

$$U_W = \min_U \left(\frac{\partial D}{\partial U} \right) \quad (4.2)$$

où U_W est le U de la ligne de Widom. Sur les figures de gauche de la Fig. 4.5, nous montrons exactement comment nous trouvons U_W .

Le changement de U ne conduit pas toujours à un point d'inflexion, il peut aussi conduire à une discontinuité dans la dérivée première, une transition du premier ordre. Sur l'image de droite de la Fig. 4.5, nous montrons ce que nous considérons être les U_{c1} et U_{c2} critiques pour la transition de Mott de premier ordre. Ces dernières étant respectivement la transition MI-métal et la transition métal-MI. Une dernière valeur critique a été trouvée dans nos calculs,

soit, une certaine limite de bi-stabilité, que nous avons décidé de nommer U_{c3} . Nous en parlons avec plus de détails à l'Annexe S.4.

Si une ligne de Widom et une transition de premier ordre existent dans un diagramme de phase $T - U$, il s'en suit qu'une transition de phase de second ordre existe. Nous utilisons (U_c, T_c) pour décrire les valeurs attendues pour celles-ci. Pour trouver ces valeurs, nous utilisons une projection linéaire des U critiques de la transition de Mott de premier ordre.

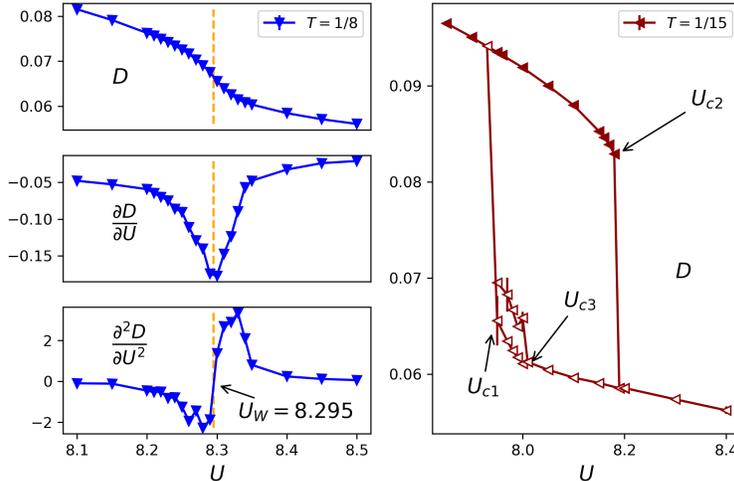


FIGURE 4.5 – Ligne de Widom et transition de premier ordre du point de vue de la double occupation. En utilisant l'amas $N_c = 6$, cette figure affiche les valeurs de la double occupation et sa dérivée pour certaines températures, montrant ensuite notre définition pour U_{c1} , U_{c2} et U_{c3} comme le coût critique de la double occupation pour lequel des valeurs plus petites (plus grandes) de U conduisent à une transition isolant-métal (métal-isolant), U_W étant le point d'inflexion si $T > T_c$, la température pour la transition de second ordre.

Pour les transitions par dopage, de nouvelles valeurs critiques devront être créées. Suivant l'occupation n , plusieurs événements peuvent se produire, comme des transitions de premier ordre, second ordre, ou des points d'inflexion. Cela avait été montré dans plusieurs articles que l'occupation était empreinte de valeurs critiques importantes [46, 54, 77]. Les points d'inflexion se traduisent par des maximums ou des minimums de la compressibilité $\partial n / \partial \mu$, comme :

$$\mu_{x,extremum} = extremum_{\mu} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right) \quad (4.3)$$

où x remplace le nom que nous lui donnons, et *extremum* est un maximum ou un minimum.

Ainsi, les transitions de premier ordre du côté dopé aux trous seront appelées μ_{hc1} et μ_{hc2} , les transitions de second ordre, (U_{hc}, μ_{hc}) , et les points d'inflexion causés par la physique de Mott, $\mu_{hW,max}$. En suivant la même logique que précédemment, les transitions de premier ordre du côté dopé aux électrons seront appelées μ_{pc1} et μ_{pc2} , les transitions de second ordre, (U_{pc}, μ_{pc}) , et les points d'inflexion causés par la physique de Mott, $\mu_{pW,max}$.

Dans la Sec. 5.2, nous montrerons l'existence de plusieurs nouvelles lignes de points d'inflexion dans la densité jusqu'alors méconnues. Nous suivrons la ligne de compressibilité maximale dû à la singularité de Van Hove, et nous l'appellerons $\mu_{VHS,max}$. Nous suivrons également

les lignes $\mu_{sh,min}$ et $\mu_{sp,min}$, conséquences de la physique de Mott, respectivement pour un dopage au trou et aux électrons. Puis, finalement, $\mu_{int,min}$ et $\mu_{sp,max}$, causés par les fortes interactions, respectivement près du demi-remplissage et dans la région sur-dopée.

4.5 Algorithme de compilation des données

Comme nous disposons d'un grand nombre de données, nous devons trouver un algorithme de post-traitement permettant de calculer automatiquement les résultats convergés et l'incertitude de chaque simulation avec précision. Parmi les nombreux algorithmes que nous avons créés, l'un d'entre eux s'est avéré très efficace pour notre objectif précis, celui de maximiser l'utilisation et la précision de nos données.

Notre programme prend en entrée une observable X calculée sur n itérations, les valeurs de la i -ième itération x_i avec $0 \leq i \leq n$, et l'erreur de Monte-Carlo de chaque itération $\sigma_{M,i}$. Puisque nous avons l'erreur Monte-Carlo, nous pouvons pondérer chaque itération par un poids w_i que nous définissons comme suit :

$$w_i = 1/\sigma_{M,i}^2 \quad (4.4)$$

Avec ces poids nouvellement définis, nous pouvons calculer la moyenne des m dernières itérations \bar{x}_m :

$$\bar{x}_m = \frac{1}{w_{T,m}} \sum_{i=n-m}^n w_i \cdot x_i \quad (4.5)$$

où $w_{T,m} = \sum_{i=n-m}^n w_i$, soit le poids total de la m -ième itération à la dernière. Nous pouvons maintenant calculer l'écart type non corrélé pondéré de la simulation totale :

$$\sigma_m = \sqrt{\frac{\sum_{i=n-m}^n w_i^2}{w_{T,m}^2} \left(\frac{1}{w_{T,m}} \sum_{i=n-m}^n x_i^2 w_i - \bar{x}_m^2 \right)} \quad (4.6)$$

où le terme entre parenthèses représente l'écart type de chacune des itérations, alors que l'autre permet de pondérer ce dernier écart type, de façon analogue à $1/\sqrt{N}$ dans le cas sans poids. En utilisant le facteur d'intervalle de confiance $\text{CIF}(0,9999,m)$, nous nous assurons que, dans une simulation non corrélée, nous sommes sûrs à 99,99% que \bar{x}_m est à l'intérieur de l'incertitude :

$$\sigma_{\text{CIF},m} = \sigma_m \cdot \text{CIF}(0.9999,m) \quad (4.7)$$

A partir de là, l'objectif de notre algorithme est de trouver le m optimal (m_{op}), qui est défini comme suit

$$m_{op} = \min_m (\sigma_{\text{CIF},m}) \quad (4.8)$$

Nous avons décidé que $m \geq 15$, une limite définie arbitrairement et rendue nécessaire par les corrélations entre itérations.

La sortie de notre algorithme est donc notre résultat $\bar{x}_{m_{op}}$ et $\sigma_{\text{CIF},m_{op}}$ que nous utilisons pour donner une idée de l'incertitude sur nos données. Un exemple de l'utilisation de l'algorithme est donné à la figure 4.6.

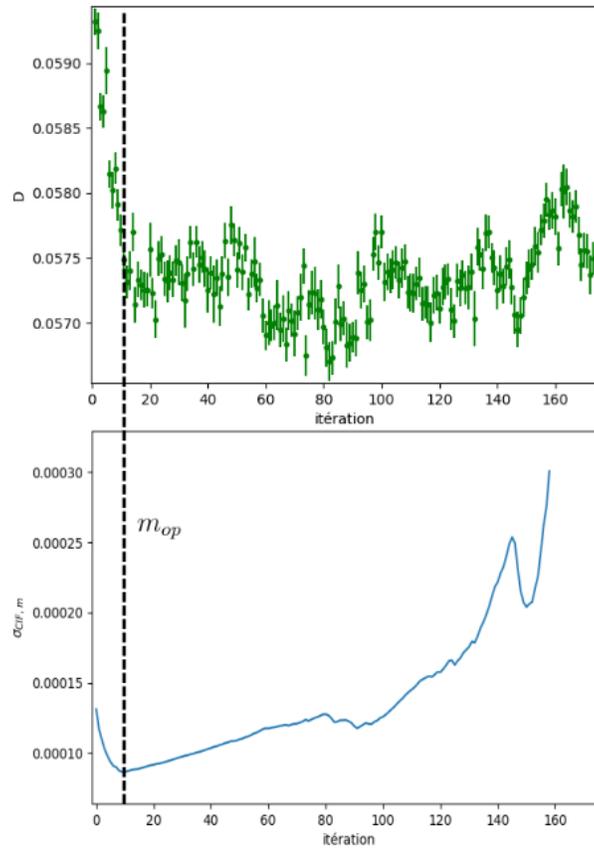


FIGURE 4.6 – a) Exemple de l’algorithme de compilation de données près d’un point critique. En haut, le résultat de la double occupation par rapport à l’incertitude, en bas, c’est $\sigma_{CIF, m}$ par rapport à l’itération. La ligne pointillée, c’est m_{op} .

Chapitre 5

Résultats

Dans cette section, nous présentons les résultats du mémoire en deux grandes parties distinctes.

Dans la première partie, nous décrivons en détails la transition de Mott par pression au demi-remplissage. Cela implique de trouver l'amas idéal pour des calculs plus détaillés, d'expliquer la distribution des phases dans un diagramme de phase et de proposer un mécanisme pour la formation du **PG** dans le réseau triangulaire au demi-remplissage.

Dans la seconde partie, a) nous étudions le rôle des interactions locales et de celles à courtes portées sur la transition de Mott et l'apparition du **PG**, b) nous proposons un mécanisme pour l'apparition du **PG** dans le réseau triangulaire dopé, c) nous discutons du rôle précis de la physique de Mott et des **VHS** sur la formation du **PG** d) nous finissons par proposer une expérience pour prouver l'existence du **PG** dans les réseaux triangulaires.

5.1 Transition de Mott au demi-remplissage

Bien que la physique de Mott au demi-remplissage ait été bien décrite dans un réseau carré avec la **DMFT** [47,64,89] et la **CDMFT** [77], elle est plutôt mal connue dans le cas d'un réseau triangulaire, se limitant à une analyse de la transition de Mott au demi-remplissage [15]. Dans cette section, nous allons donc étudier en détail la transition de Mott dans le réseau triangulaire au demi-remplissage.

Dans cette section, nous utilisons les amas choisis à la section 4.2 pour trouver comment la ligne de Widom de la double occupation évolue en taille d'amas. Utilisant la taille de réseau convergé, nous analysons les phases présentes autour de la transition de Mott. Nous proposons par la suite un mécanisme de formation du **PG** au demi-remplissage.

5.1.1 Convergence des amas

Trouver la transition de Mott au demi-remplissage est un peu plus complexe pour les réseaux triangulaires par rapport au réseau carré non frustré. À la section 2.1.2, nous mentionnons que la symétrie particule-trou du réseau carré nous permet de connaître la valeur exacte du potentiel chimique nécessaire pour obtenir le demi-remplissage, quelque chose qui n'est plus vrai dans le cas d'un réseau triangulaire. Pour ces raisons, nous devons ajuster μ pour atteindre le bon remplissage au fil des itérations.

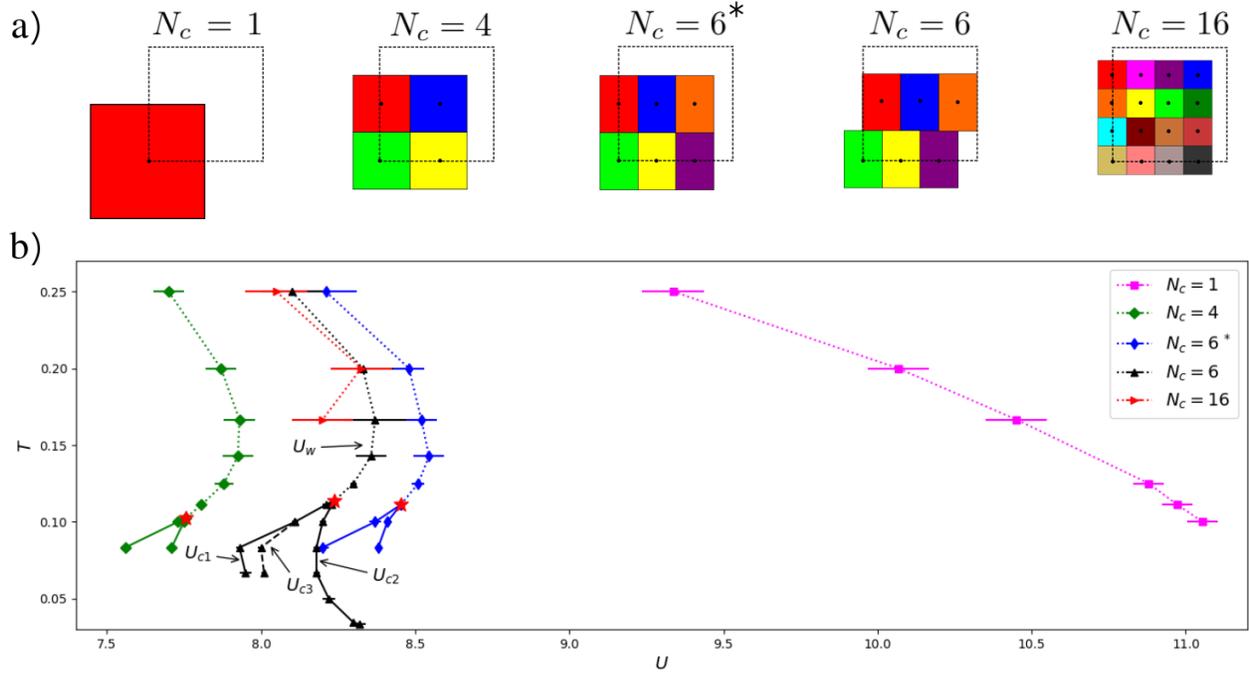


FIGURE 5.1 – a) Les 5 divisions de la zone de Brillouin, un rappel de la figure 4.1. La self-énergie est calculée sur chacune des zones indiquées par les points noirs en leur centre, définis comme \mathbf{K}_i . i représente l'indice de la zone, indice que nous définissons pour l'amas $N_c = 6$ à la figure 5.3. Plus de détails sur les amas sont à la section 4.2. L'amas $N_c = 1$ est le cas de la DMFT. b) Transition de Mott et ligne de Widom pour les différents amas de la Fig. a). Sur cette figure, nous y voyons toutes les lignes de comportements critiques, tel que les lignes U_W en pointillés, U_{c1} et U_{c2} en ligne pleine, et U_{c3} en traits, avec particulièrement beaucoup de détails pour l'amas $N_c = 6$. Nous n'avons pas cherché U_{c3} pour d'autres amas que $N_c = 6$. Les transitions de second ordre en température T_c et en potentiel U_c , les étoiles rouges, sont obtenues par le prolongement des lignes U_{c1} et U_{c2} . Les valeurs obtenues sont $(U_c, T_c)_{N_c=4} = (7.76, 0.103)$, $(U_c, T_c)_{N_c=6} = (8.24, 0.114)$ and $(U_c, T_c)_{N_c=6^*} = (8.45, 0.111)$. Les incertitudes peuvent être deux choses, ou bien le pas en U pour obtenir la ligne, ou le pas plus la distance entre 2 proches minimums causés par les erreurs des simulations Monte-Carlo. C'est surtout vrai pour les grands amas, ou à haute température.

Ligne de Widom

La ligne de Widom est une particularité bien intéressante de la transition de Mott, bien connue des calculs numériques sur le modèle de Hubbard [64,69,89,91]. Toutefois, son existence est parfois attribuée à la petite taille des amas étudiés. À la Fig. 5.1 b), l'existence d'une ligne de Widom telle que définie à la section 4.4 pour tous les amas, même le plus grand amas $N_c = 16$, montre que les lignes de Widom ne sont pas attribuable à la taille des amas.

Ce dernier exercice montre la pertinence de l'étude de cette ligne. En suivant le déplacement de celles-ci, nous constatons que non seulement nos lignes de Widom convergent, mais que leur forme semble très robuste aux changements de taille d'amas où de zones d'intégration. Seuls les résultats de la DMFT ont une forme différente. Voyant que l'amas $N_c = 6$ a la taille nécessaire pour être considéré suffisamment près d'un amas convergé, ce sera l'amas retenu pour les calculs plus détaillés. C'est un compromis qui permet d'aller à des interactions plus fortes et des températures plus basses que ce qui serait possible avec des amas plus gros.

Le cas de la DMFT est particulier car nous y voyons une pente strictement négative, un résultat différent des amas. Ce résultat est toutefois très comparable au réseau carré en DMFT [64,69]. Seul Vučićević *et al.* [89] y voient un comportement différent, probablement parce qu'ils regardent cette ligne à des températures plus basses que les autres. Dans le régime de basse température ($T \sim 0.1$), cette différence entre le calcul à un site et celui par amas vient de la différence d'entropie entre la phase métallique et isolante. En fait, un amas avec un nombre impair de sites tant à proposer des configurations où un électron ne peut pas être apparié en singulet, ce qui augmente l'entropie, favorisant ainsi une phase métallique [64]. Cela prend tout son sens si nous considérons les amas à trois sites des références [69] et [15]. En effet, les amas avec un nombre de sites impair donnent lieu à des lignes de Widom ou à des transitions de premier ordre avec des pentes négatives à basse température. Dans l'ensemble, ces observations ancrent l'idée que la ligne de Widom n'est pas un artefact des calculs de petits amas.

Puisque la ligne de Widom tend à disparaître à température élevée, nous n'avons pas cherché de point d'inflexion au-delà de $T = 0.25$. Peut-être qu'avec plus de précision et plus de ressources, nous pourrions trouver la ligne de Widom à ces températures. Néanmoins, nos résultats sur la Fig. 5.1 montrent sans l'ombre d'un doute que la ligne de Widom à haute température a une pente négative et une pente positive à plus basse température, tout comme la CDMFT [64,69,90]. Park *et al.* [64] ont trouvé une explication à ce comportement en température. Ils expliquent que des températures au-delà de $T > 0.15$ augmentent l'entropie de la phase isolante, la favorisant ainsi [64]. Autour de $0.11 < T < 0.15$, l'abaissement de la température tend à former des singulets, ce qui favorise la phase isolante, ce qui explique la pente positive à cette échelle de température [64].

Transition de deuxième ordre

Au plus bas de la ligne de Widom apparaît un point d'inflexion pour lequel la dérivée tend vers l'infini, c'est une transition de second ordre. En raison de la limitation des calculs, nous n'avons pas été en mesure de faire quoi que ce soit en dessous de $T = 1/6$ pour l'amas $N_c = 16$, donc, nous n'avons pas pu trouver la valeur critique pour cet amas. En utilisant la technique décrite dans la section 4.4, nous avons pu approximer (U_c, T_c) pour les amas $N_c = 4$, $N_c = 6^*$ et $N_c = 6$. Ces valeurs sont inscrites dans la description de la Fig. 5.1. Il est

intéressant de constater que ces valeurs sont assez indépendantes de la taille de l’amas. Si nous comparons nos résultats à ceux de la référence [90], nous pouvons constater que nos valeurs sont beaucoup plus élevées que les leurs, soit environ deux fois plus. Cette augmentation des valeurs critiques est généralement liée à la frustration. Dans le cas de U_c , l’augmentation de t'/t supprime la phase de Néel-AFM, augmentant ainsi U_c [48,49]. Jusqu’à présent, aucune explication n’a été donnée pour T_c .

Transition de premier ordre

Nous n’avons pas cherché à travailler sur les détails de U_{c1} et U_{c2} pour d’autres amas que $N_c = 6$, car des articles précédents l’ont déjà fait [15], bien que la définition des zones et des amas aient normalement un impact sur les résultats quantitatifs [28,72]. Il est utile de comparer les précédents résultats sur amas dans un réseau carré présentés à la figure 2.8 b) et à la référence [64] avec les nôtres sur le réseau triangulaire.

Bien que la transition de premier ordre ne se produise pas au même U , soulignons que le comportement à haute température de la transition de premier ordre suit vraiment un comportement similaire pour tous les amas.

La véritable différence entre les réseaux carrés et triangulaires se situe à des températures plus basses, tant pour U_{c1} que U_{c2} . Dans ce régime, U_{c2} est très similaire à celui des amas de Dang [15], ayant une pente négative à basse température ($T < 0.6$). Puisque l’analyse de la pente permet de révéler des détails sur l’ordre magnétique du MI au demi-remplissage, nous en parlons plus en détail à la section 5.1.2.

Le comportement de notre U_{c1} peut sembler, à haute température, suivre le même chemin que celui des petits amas de Dang [15], mais à $\beta = 15$, nous trouvons une courbe «brisée». Nous croyons que cette courbe brisée pourrait n’être qu’un artefact causé par l’instabilité de la solution bistable de la région $U_{c1} < U < U_{c3}$. Nous parlons plus en détails de cette zone à l’annexe S.4.

5.1.2 Phases autour de la transition de Mott

À bien des égards, la transition de Mott peut paraître bien surprenante, et c’est encore plus vrai si nous regardons comment les phases sont en compétition autour de celle-ci. La réalité, c’est que relativement peu d’études théoriques montrent avec précision la distribution des phases autour de la transition, se limitant le plus souvent à identifier des comportements métalliques versus isolant, tant pour la DMFT [47] que pour les extensions de la technique pour des amas [90]. Ainsi, afin de mieux comprendre toute la physique entourant la transition de Mott, nous proposons l’étude des phases autour de celle-ci dans le contexte de l’amas $N_c = 6$ plongé dans un réseau triangulaire.

Dans la prochaine sous-section, nous analysons la figure 5.2 et discutons des trois phases de la matière en compétition, le cFL, le MI et le PG.

Correlated Fermi-liquid

Nous avons défini le cFL à la section 2.2.2. Cette définition a pour effet que toutes les zones d’intégration incluant assez de surface de Fermi à $U = 0$ pour avoir un comportement

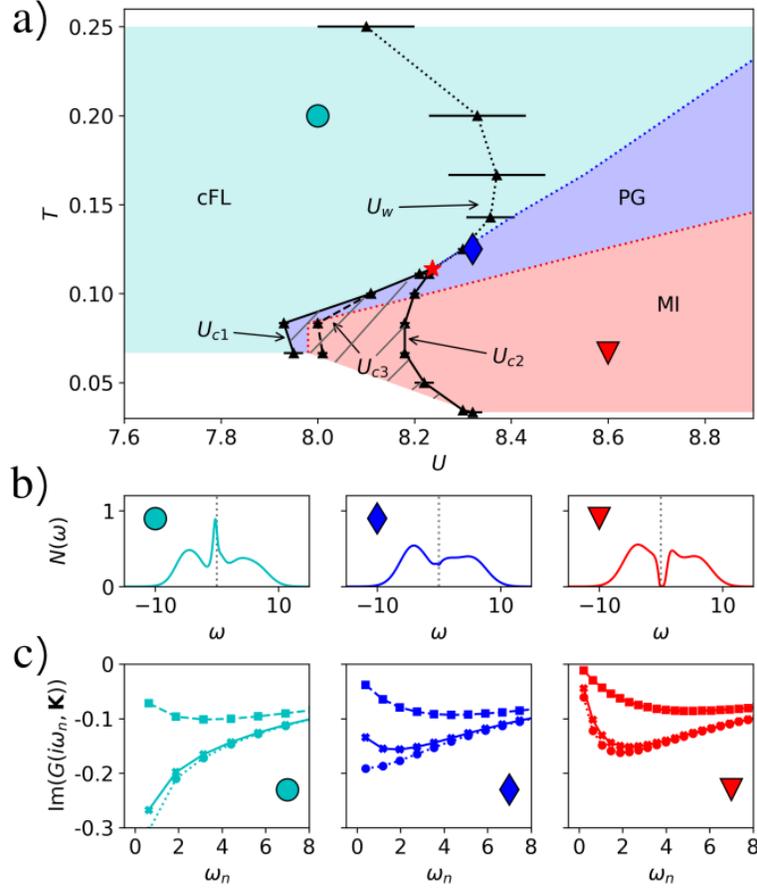


FIGURE 5.2 – a) Diagramme de phase de l’amas de taille $N_c = 6$. Cette figure montre les différentes phases identifiables reliées à la transition de Mott à demi-rempli, en les identifiant à l’aide de trois couleurs : rouge pour le **MI**, bleu pour le **PG**, et cyan pour le **cFL**. La zone de coexistence est représentée par la zone hachurée, dans laquelle la priorité dans les couleurs est donnée aux phases **MI/PG**, qui sont méta-stables par rapport au **cFL** dans cette région. Les couleurs sont uniquement destinées à guider l’œil. b) **DOS** pour différents ensembles de paramètres. Toutes les formes colorées en haut à gauche de chaque **DOS** se retrouvent sur le diagramme de phase $T - U$, nous indiquant le jeu de paramètres utilisé pour le tracer. Toutes les **DOS** ont été réalisées en utilisant la technique d’entropie maximale de la référence [6]. c) Partie imaginaire de la fonction de Green en fréquences de Matsubara pour trois différents \mathbf{K}_i , où i est l’indice de la zone défini à la figure 5.3 a). Là encore, la forme colorée en bas à droite représente un ensemble de paramètres que nous retrouvons sur la figure a). La ligne pleine avec les \times est pour le vecteur d’onde $\mathbf{K}_0 = (0, 0)$, la ligne pointillée avec les cercles est $\mathbf{K}_1 = (2\pi/3, 0)$ et la ligne en traits avec les carrés est $\mathbf{K}_4 = (\pi, \pi)$.

métallique doivent conserver un comportement métallique. Ainsi, seule la zone $\mathbf{K}_4 = (\pi, \pi)$ est exempte d’avoir un comportement métallique au demi-remplissage. Il y a plusieurs autres façons de repérer cette phase, mais formellement, notre condition est

$$\text{Im}(\mathcal{G}(i\omega_0, \mathbf{K}_i)) < \text{Im}(\mathcal{G}(i\omega_1, \mathbf{K}_i)) \forall \mathbf{K}_i \setminus i = 4. \quad (5.1)$$

Nous l’avons utilisée pour dessiner la limite de la **cFL** sur à la figure 5.2 a), bien que la limite réelle de la phase **cFL** soit floue et dépendante de notre définition. Sur la Fig. c), la figure de

gauche nous montre le comportement typique des premières fréquences de Matsubara dans cette phase.

Si cette fois nous observons la figure 5.2 b), la DOS nous donne deux informations intéressantes. Bien que nous soyons au demi-remplissage, nous pouvons remarquer une asymétrie entre les ω positifs et négatifs. Ce comportement est attendu pour les réseaux triangulaires puisque ce ne sont pas des réseaux bipartites, comme nous en avons discuté à la section 2.1.2. Notre critère d'identification de la cFL est très pertinent car cette dernière phase a toujours un pic de quasi-particule clair près de $\omega = 0$. Il semble donc que ces deux critères soient concomitant au demi-remplissage pour définir la sortie de la phase cFL. En utilisant la définition d'un bon métal de la référence [17], nous concluons que notre cFL est un bon métal.

D'un point de vue plus qualitatif, le cFL semble être la phase dominante à température élevée et à faibles interactions. C'est sensé puisqu'un comportement métallique est attendu lorsque les électrons ont plus d'énergie cinétique que d'énergie potentielle. Cela peut même sembler douteux que le cFL aille si loin au-delà de la ligne de Widom, mais notre condition pour avoir un cFL est encore respectée dans une partie de la région $U > U_W$. Nous comprenons donc que cette ligne de Widom n'est pas vraiment une séparation de phase, mais plutôt un signe précoce que la phase est sur le point de changer. Ce comportement n'est pas étranger aux transitions de phase en général. En effet, la ligne séparant le cFL et le PG pourrait n'être qu'une manifestation de la ligne de Frenkel [12]. Cette ligne loin de la ligne de Widom distingue normalement les comportements à tendance liquide comparés à ceux plus gazeux dans des transitions de phase plus classiques.

Isolant de Mott

Le MI est généralement caractérisé par un poids spectral nul à $\omega = 0$. C'est notamment le cas pour la figure de droite de 5.2 b). D'un point de vue plus pratique pour a), nous considérons que le MI commence lorsque $\text{Im}(\bar{G}(\omega = 0)) > -0.045$, une limite arbitraire car la transition entre le MI et le PG est plutôt continue.

Il est tout à fait regrettable que nos calculs n'aient pas donné d'information directe sur l'ordre magnétique dans notre amas, mais heureusement, la transition de premier ordre peut nous donner quelques informations à ce sujet.

Utilisons maintenant la pente à basse température de U_{c2} pour chercher des indices au sujet de cette phase. Nous pouvons définir le grand potentiel comme $d\Omega = -SdT - nd\mu + DdU$, où S est l'entropie thermodynamique. Pour le définir ainsi, nous supposons que nous sommes à volume fixe et nous considérons que DdU est une portion de l'énergie interne de notre système. À partir de là et sachant que le grand potentiel Ω varie de la même façon pour le MI et le cFL le long de U_{c2} , c'est-à-dire que $d\Omega_{ins} = d\Omega_{met}$, nous trouvons facilement qu'au demi-remplissage,

$$\frac{dT_{c2}}{dU_{c2}} = \frac{D_{MI} - D_{cFL}}{S_{MI} - S_{cFL}}, \quad (5.2)$$

où D_X est la valeur de la double occupation dans la phase X et que S_X est l'entropie thermodynamique dans la phase X . Sachant que $\frac{dT_{c2}}{dU_{c2}} < 0$ à basse température et que $D_{MI} < D_{cFL}$, nous concluons que l'entropie thermodynamique des deux phases satisfait l'inégalité

$S_{MI} > S_{cFL}$. Ceci indique qu'il est possible que notre état fondamental n'ait pas d'ordre de spin, pouvant même être un liquide de spin. Cette conclusion serait en accord avec la référence [49] sur l'état fondamental d'un réseau triangulaire isolant avec $6.0 < U < 9.0$.

À la référence [69], une limite pour l'ouverture du gap de Mott avait été établie, une limite très similaire à ce que nous utilisons pour séparer le **MI** des autres phases.

Pseudogap

Nous comprenons maintenant deux des phases de la figure 5.2 a), soit les phases **cFL** et **MI**. Cela nous laisse avec une phase intermédiaire que nous allons essayer de définir. La première partie de notre analyse consiste à vérifier que cette phase n'est ni un **MI**, ni un **cFL**.

Sur la Fig. 5.2 b), le graphique du milieu nous donne la **DOS** dans cette région intermédiaire. Nous remarquons d'abord une différence importante avec le graphique de droite puisque la **DOS** à $\omega = 0$ n'est pas près d'être nulle, excluant ainsi la possibilité d'être un **MI**. De plus, comparé au graphique de gauche, le pic proche de $\omega = 0$ est absent, ce qui nous indique qu'aucune quasi-particule n'est présente, ce qui est un bon signe que nous n'avons pas un **cFL**.

Selon ce que nous avons vu jusqu'à présent, cette phase intermédiaire semble vraiment correspondre à la définition de ce que la référence [17] définirait comme un mauvais métal. En fait, deux différentes phases pourraient expliquer la perte de poids spectral à $\omega = 0$ par rapport au **cFL**. Nous pourrions être confrontés à un semi-conducteur avec un très petit gap, ou un **PG**. À la section 2.2.3, nous avons expliqué que le **PG** était défini par une perte de poids spectral dépendante du vecteur d'onde \mathbf{k} , un point qui le distingue très clairement d'un semi-conducteur. Dans les faits, bien que ça n'ait jamais été prouvé dans un réseau triangulaire au demi-remplissage, un **PG** au demi-remplissage ne serait pas tant une surprise étant donné que ça avait déjà été montré à la référence [55], mais la façon par laquelle cette phase est connectée à la transition de Mott n'avait jamais été montrée.

La figure 5.2 c) nous donne la fonction de Green en fonction des fréquences de Matsubara et du vecteur d'onde \mathbf{K}_i . À partir de cette fonction, nous pouvons définir ce qu'est un comportement métallique et un comportement isolant

$$\text{Métal : } \quad \text{Im}(\mathcal{G}(i\omega_0, \mathbf{K}_i)) < \text{Im}(\mathcal{G}(i\omega_1, \mathbf{K}_i)), \quad (5.3)$$

$$\text{Isolant : } \quad \text{Im}(\mathcal{G}(i\omega_0, \mathbf{K}_i)) > \text{Im}(\mathcal{G}(i\omega_1, \mathbf{K}_i)). \quad (5.4)$$

En discutant du **cFL**, nous avons dit que seule la zone de vecteur d'onde $\mathbf{K}_4 = (\pi, \pi)$ n'est pas métallique, même quand nous avons un **cFL**. Nous le voyons bien si nous nous référons à la figure 5.3 a), où seule la zone $\mathbf{K}_4 = (\pi, \pi)$ ne contient pas de surface de Fermi. Parmi les autres zones, la première cessant d'agir comme un métal quand on s'approche du **MI** est la zone $\mathbf{K}_0 = (0, 0)$ selon la figure 5.2 c).

Cet indice d'une perte de poids spectral qui dépend du vecteur d'onde est un argument fort en faveur d'ouverture d'un **PG**, mais pourrait ne pas suffire. En effet, les autres zones perdent aussi du poids spectral comme le montre la figure 5.3 c), d'autant plus que toutes les zones sont sujettes au même sort que la zone 0 lorsque nous approchons le **MI** en ce qui concerne la partie imaginaire de la fonction de Green en fréquence de Matsubara. Cela indique que la perte de poids spectral est, soit généralisée à toutes les zones, ce qui signifierait

qu'il n'y a peut être pas vraiment un **PG**, soit les points chauds du **PG** sont distribués sur de nombreuses zones. Si nous souhaitons maintenant prouver hors de tous doutes raisonnables que nous avons un **PG**, nous devons changer de stratégie.

Si nous supposons qu'il existe plusieurs points chauds, nous pouvons nous imaginer qu'ils ne sont possiblement pas distribués de façon uniforme entre chacune de nos zones. Ces points chauds, peut importe où ils se trouveraient, sont les points sur lesquels nous nous attendons à perdre de la surface de Fermi. Nous savons par ailleurs que les zones se partagent chacune une portion de la surface de Fermi totale. Nous proposons alors l'hypothèse suivante : plus une zone a de points chauds par surface de Fermi incluse, plus elle devrait perdre de poids spectral rapidement en entrant dans la phase **PG**. Donc, en prenant le rapport de poids spectral entre deux zones ayant une densité de points chaud par surface de Fermi différente, nous nous attendrions à y voir un rapport presque constant dans un **cFL** et en changement dans un **PG**. Ce rapport est noté

$$\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_i)/\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_j), \quad (5.5)$$

avec i, j les indices de deux zone différentes définies à la figure 5.3 a). Le rapport de l'équation 5.5 devrait nous informer sur deux points importants, les pertes de poids spectral dû à un **PG** et une redistribution de la surface de Fermi par l'ajustement de nos différents paramètres, tel que le dopage.

Pour visualiser si le rapport de poids spectral entre les zones change, utilisons le rapport entre les zones 0 et 1 sur la figure 5.3 b). Sur cette figure, nous pouvons identifier trois régimes différents. Dans la phase **MI**, nous remarquons que le changement de ratio est très léger en se dirigeant vers la phase **PG**. De l'autre côté, dans le **cFL**, ce rapport est généralement stable, bien que très différent de celui de la **MI**. Nous nous attendons à un rapport stable dans ces deux phases, car les différences de poids spectral ne devraient pas dépendre énormément du vecteur d'onde. La situation change dans le régime intermédiaire, où ce rapport change très rapidement. C'est une preuve sans équivoque que le régime que nous voyons entre le **cFL** et le **MI** est en bel et bien un **PG**.

5.1.3 Mécanisme proposé pour l'ouverture du pseudogap dans le réseau triangulaire.

L'**AFM** à longue ou à courte portée est généralement accepté comme un des principaux mécanismes de la formation des **PG** dans les amas carrés, comme nous l'avons vu à la section 2.2.3. Si le **PG** dans les réseaux triangulaires était lié à ces ordres magnétiques, nous nous attendrions à des pertes de poids spectral principalement situés à l'anti-noeud, c'est-à-dire dans les zones 1, 2, 3 et 5. Cependant, la figure 5.3 a) montre que ce n'est pas le cas. En effet, la zone qui n'est pas en contact avec la zone de Brillouin **AFM** perd proportionnellement plus de **DOS** que les autres. Ceci jette de réels doutes sur le mécanisme habituellement accepté pour la formation du **PG**. Nous suggérons donc un nouveau mécanisme impliquant l'ordre spiral. Un exemple de l'ordre spiral est donné à la figure 5.4 pour aider à visualiser.

Commençons par trouver les vecteurs de l'ordre spiral. Nous savons que les vecteurs de base de notre réseau en particulier sont $e_1 = (0, 1)$ et $e_2 = (1, 0)$, mais un ordre tripartite

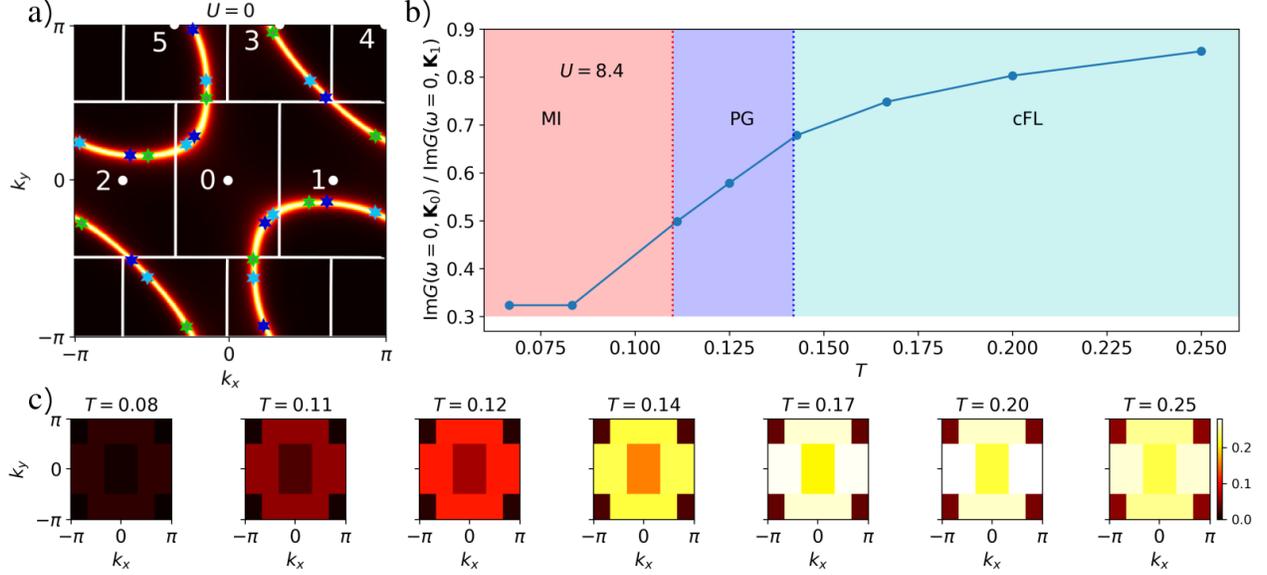


FIGURE 5.3 – a) Surface de Fermi à $U = 0$ avec la disposition des zones d'intégration de l'amas $N_c = 6$ et des points chauds de l'ordre spiral. Cette figure a pour but de montrer comment la surface de Fermi est distribuée à travers les zones. Les étoiles indiquent les points chauds proposés par les vecteurs associés à un ordre spiral. Les étoiles bleues correspondent aux vecteurs $(0, 2\pi/3)$, les étoiles cyans aux vecteurs $(2\pi/3, 0)$ et les étoiles vertes aux vecteurs $(2\pi/3, -2\pi/3)$. b) Rapport de la partie imaginaire de la fonction de Green de la zone 0 avec la zone 1 en fonction de la température à $U = 8.4$. Les trois couleurs sont un guide pour l'œil, réalisé en utilisant les données et les critères utilisés pour les couleurs de la figure 5.2 a). c) Poids spectral dépendant du moment à $\omega = 0$ pour différentes températures. Les différentes zones sont positionnées exactement de la même façon qu'en a). Le poids spectral à $\omega = 0$ est calculé à l'aide d'un ajustement d'un polynôme du deuxième degré sur les 3 premières fréquences de Matsubara.

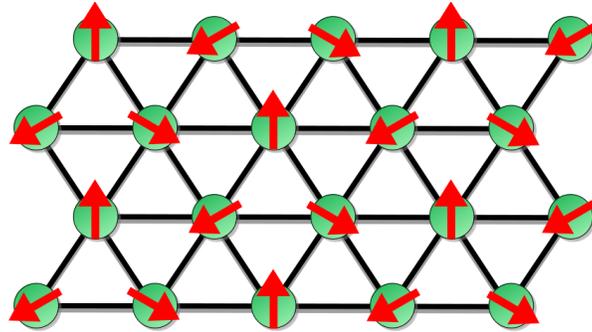


FIGURE 5.4 – Cette figure montre un exemple d'une orientation de spin nommée ordre spiral dans un réseau triangulaire. Elle est parfois référée par l'appellation d'ordre AFM à 120° .

est également périodique dans une troisième direction, $e_1 + e_2 = (1, 1)$. Il est assez facile de trouver que leurs vecteurs associés dans le réseau réciproque sont $E_1 = (2\pi, 0)$, $E_2 = (0, 2\pi)$ et $E_3 = E_2 - E_1 = (-2\pi, 2\pi)$. Puisqu'un ordre spiral a une périodicité de trois sites, il incombe aux vecteurs réciproques d'avoir un tiers de leur longueur. Ainsi, les trois vecteurs associés à un ordre spiral sont $Q_1 = (2\pi/3, 0)$, $Q_2 = (0, 2\pi/3)$ et $Q_3 = (-2\pi/3, 2\pi/3)$. Sur la

figure 5.3 a), toutes les étoiles sont des points reliant 2 endroits différents sur la surface de Fermi en utilisant les vecteurs de l'ordre spiral.

Si l'ouverture du **PG** est liée à l'ordre spiral, nous nous attendrions alors que la perte de poids spectral survienne autour des points chauds de cet ordre. Suivant cette idée, sur la figure 5.3 a), chaque zone a des points chauds. Cela signifie que toutes les zones dans le régime **PG** devraient perdre du poids spectral, ce qui est cohérent avec la figure 5.3 c). Ce qui change réellement, c'est le rapport du nombre de points chauds par surface de Fermi dans les zones, un rapport qualitativement beaucoup plus élevé dans le \mathbf{K}_0 que dans le \mathbf{K}_1 , ce qui expliquerait pourquoi, entre le **cFL** et le **MI**, le ratio entre les zones 0 et 1 change de cette façon.

Bien que cette explication puisse être intéressante, il faut noter que notre amas ne permet pas d'ordres tripartites à longue portée, comme nous l'avons fait remarquer à la section 4.2. Cela signifie que si une forme de l'ordre spiral est impliqué dans la formation du **PG**, il doit forcément être à très courte portée. Nous pouvons y voir une sorte d'analogie à l'**AFM** à courte portée, proposé comme une part du mécanisme de la formation du **PG** dans le réseau carré [77]. Alternativement, la formation de singulets à courte portée pourrait être impliquée dans la formation de ce **PG**, de façon analogue à la proposition du "Resonating Valence Bond" d'Anderson [2].

5.2 Transition induite par dopage

Une foule d'articles ont déjà montré que le **PG** dopé à interactions fortes existe pour des réseaux peu frustrés [21, 41, 55, 77], pour autant qu'il y ait un amas. En effet, la **DMFT** ne permet pas de trouver de **PG** [46]. Un **PG** n'a toutefois jamais été cherché dans les réseaux triangulaires.

Dans cette section, en utilisant la **DMFT**, nous vérifions si les interactions purement locales sont suffisantes pour l'apparition d'un **PG**. Avec l'amas suffisamment convergé de la section 5.1, nous analysons le **PG** dopé. Par la création de diagrammes de phase, nous cherchons par la suite à comprendre comment la physique de Mott et le **PG** sont liés. Wu et al. [95] avaient proposé que le **PG** était lié à la **VHS**, nous discutons aussi de cette possibilité. Le **PG** dans les réseaux triangulaires n'étant pas prouvé expérimentalement, nous proposons une méthode qui permettrait à terme de vérifier qu'il y est lié.

5.2.1 Rôle des interactions locales sur l'apparition du pseudogap

Kotliar et al. [46] avait déjà prouvé l'existence de la transition de Mott par dopage dans les réseaux carrés, mais ça n'avait jamais été réalisé sur le réseau triangulaire jusqu'à maintenant. À la figure 5.5 a), nous montrons l'existence de la transition de Mott de premier ordre par dopage. Pour trouver cette transition, nous avons suivi une suggestion de la référence [77] qui affirme que ces transitions existent seulement à $U > U_{c1}$, ce que nous avons fait en nous fiant aux résultats de Dang [15] au demi-remplissage pour la **DMFT**.

Bien que nous avons trouvé une transition de premier ordre, nous n'en avons trouvé qu'une seule. Elle présente un comportement fortement asymétrique, ce qui n'est pas une caractéristique usuelle des réseaux carrés avec sauts aux premiers voisins [46, 77], tel que nous en avons

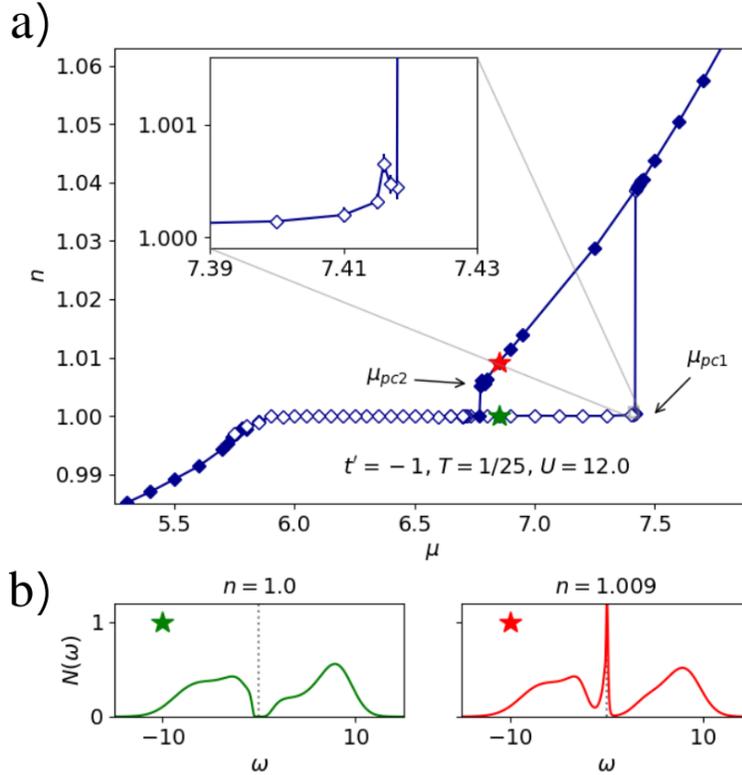


FIGURE 5.5 – a) Transition de phase par dopage dans le réseau triangulaire en DMFT. Les symboles vide représentent une section isolante, alors que les symboles remplis représentent plutôt des points faits dans la section métallique. Les valeurs critiques de la transition sont définies à la section 4.4. b) Densité d'états à fréquence réelles pour les deux solutions possibles à $\mu = 6.85$. Cette figure a été faite grâce à la technique d'entropie maximale pour le prolongement analytique [6].

discuté à section 2.1.2. En effet, nous voyons que pour le côté dopé aux électrons, nous avons une très grande transition MI-métal du premier ordre, mais aucune pour le côté dopé aux trous. Même si nous n'avons pas trouvé de transition, il est à noter que les résultats près du coude dopé aux trous sont empreints d'une importante corrélation entre les itérations, ce qui rend difficile d'affirmer avec certitude qu'aucune transition de premier ordre n'est présente. Elle pourrait aussi se situer à plus basse température ou à des interactions légèrement plus faible.

Nous ne savons pas pourquoi la transition dopée aux trous est plus petite que celle aux électrons, mais le fait que les deux transitions soient différentes est une conséquence de la non-bipartité du réseau triangulaire. Nous en avons discuté à la section 2.1.2, où cette asymétrie entre les trous et les électrons est même présente quand $U = 0$.

À partir de la transition par dopage de la DMFT triangulaire à la figure 5.5 a), nous pouvons voir deux phases, un cFL et un MI. Pour les identifier, il est simple de regarder la conductivité à l'équation 2.25, proportionnelle à la compressibilité $dn/d\mu$. Ainsi, les endroits où la compressibilité est nulle, nous avons un MI, et autrement, nous avons un cFL.

Nous notons par ailleurs que ces deux phases sont séparées par une transition de premier ordre ou de second ordre. La seule exception à cette règle survient très proche de la transition de premier ordre vers l'état métallique, près de μ_{pc1} , où la phase isolante atteint une certaine

valeur de dopage, avec une compressibilité non nulle. Ce comportement ressemble beaucoup à ce qui a été vu par Kotliar et al. [46], où il avait été établi qu’une petite excitation thermique des électrons en était la cause. Il est difficile de vraiment vérifier cette idée, particulièrement parce que l’incertitude calculée pour ces points avec l’hypothèse d’erreurs non corrélées est importante par rapport aux excitations thermiques. Cela signifie que, si nous devons prendre en compte les corrélations entre les itérations, nous estimerions certainement une incertitude proche de la valeur de l’excitation thermique attendue. En effet, être très proche d’une transition implique que les itérations sont fortement corrélées. Le calcul aurait nécessité plus de temps afin de révéler l’excitation thermique, si présente.

La façon la plus précise d’identifier les phases que nous observons est sans doute d’utiliser la Fig. 5.5 b). Sur cette dernière figure, nous pouvons distinguer les deux phases par la présence d’états à $\omega = 0$, où une DOS nulle signifie que nous sommes en présence d’un MI, alors que le contraire nous prouve la présence d’un cFL. Une constatation importante pour les futures sections est de remarquer la présence de quasi-particules proche de $\omega = 0$ dans le métal, définit comme un bon métal par la référence [17].

Puisque le PG dopé ne semble pas exister ni dans un réseau carré, ni dans un réseau triangulaire lorsque la DMFT est utilisée, nous en concluons que des corrélations non-locales sont nécessaires à son ouverture, similairement au terme de super échange J émanant des systèmes à fortes interactions comme nous l’avons vu à la section 2.1.2. Ceci est cohérent avec les conclusions des références [54, 77], qui attribuent les fluctuations de l’AFM à courte ou à longue portée à l’existence du PG.

5.2.2 Rôle des interactions à courte portée sur l’apparition du pseudo-gap à dopage fini

Dans cette section, nous analysons la transition de phase par dopage dans l’amas $N_c = 6$ dont la convergence a été discuté à la section 5.1, puis identifions les phases présentes autour de la transition pour finir par la proposition d’un mécanisme de formation du PG dopé dans le réseau triangulaire. Pour trouver la transition de Mott par dopage, nous utilisons le diagramme de phase demi-rempli de la section 5.1 avec $U > U_{c1}$, tel que suggéré par Sordi et al. [77].

Transition de premier ordre par dopage

Notre analyse commence par la figure 5.6 a). Alors que nous changeons le potentiel chimique, nous notons qu’une transition de premier ordre est bien présente à la figure 5.6 a). C’est vrai, autant pour le côté dopé aux électrons que pour le côté dopé aux trous. Ceci est en accord avec le résultat de la DMFT à la section 5.2.1 et les résultats des références [21, 46, 54, 77]. La découverte de cette transition particulière a certainement une part de surprise puisque l’amas utilisé est un amas pour lequel nous avons prouvé à la section 5.1 que sa taille était suffisante pour décrire les réseaux de grande taille. Cela signifie que la probabilité que cette transition de premier ordre soit un artefact des petits amas est maintenant très faible.

Poussons un peu les comparaisons entre nos résultats de DMFT et de DCA. Encore une fois, comme en DMFT, le comportement du réseau triangulaire est particulièrement

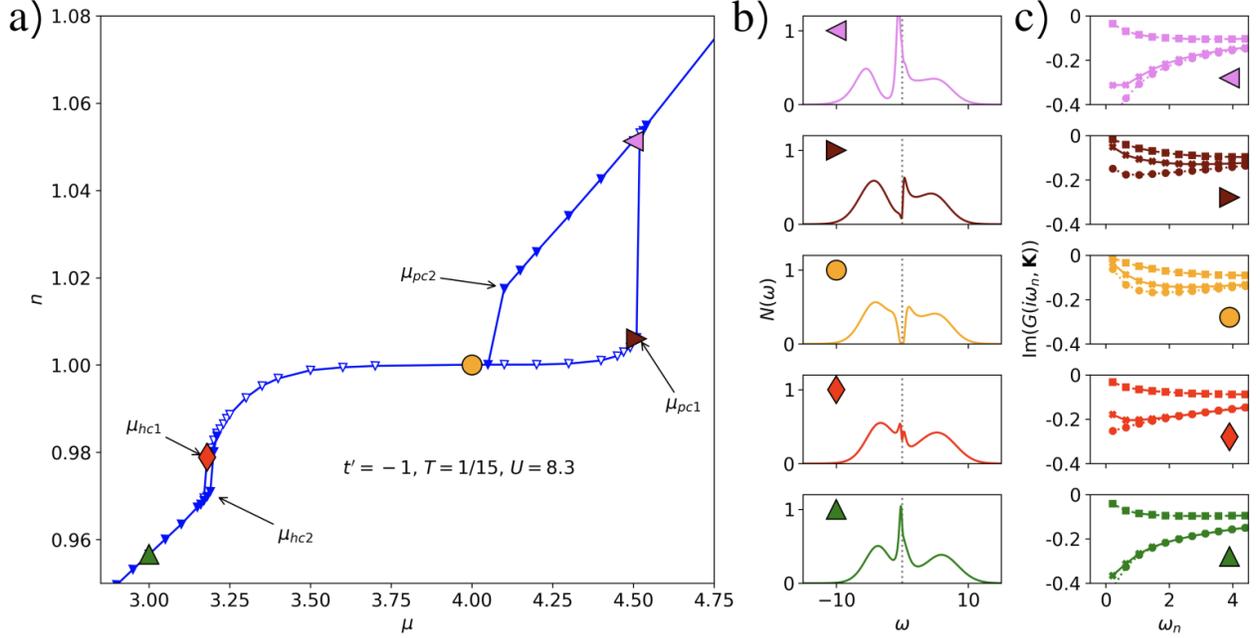


FIGURE 5.6 – a) Transition par dopage avec l’amas triangulaire $N_c = 6$. Les symboles vides représentent les points du **MI** ou du **PG**, et les symboles pleins correspondent aux points de la phase métallique. Les valeurs critiques pour le potentiel chimique sont définies à la section 4.4. b) **DOS** à cinq n différents. Cette figure montre la **DOS** aux fréquences réelles des 5 formes colorées en a). Elles ont été réalisées en utilisant l’algorithme de prolongement analytique de la référence [6]. c) Fonction de Green en fréquence de Matsubara dépendante de \mathbf{K} pour les 5 formes colorées en a). La ligne pointillée avec cercles représente la zone $\mathbf{K} = (2\pi/3, 0)$, la ligne pleine avec des X représente la zone $\mathbf{K} = (0, 0)$ et la ligne en traits avec des carrés représente la zone $\mathbf{K} = (\pi, \pi)$.

asymétrique par rapport au demi-remplissage, et certainement pour les mêmes raisons que discutées plus tôt. Il est aussi intéressant de constater que l’hystérèse le plus grand est encore une fois du côté dopé aux électrons. Un autre aspect intéressant de cette transition est la présence d’une transition de premier ordre entre deux métaux thermodynamiquement stables du côté dopé aux trous, une transition ayant tous les aspects d’une transition de Sord. Nous reparlerons plus en détails des implications de la présence de cette transition à la section 5.2.3.

Identification des phases de la transition

À la figure 5.6, nous pouvons identifier cinq différentes sections. Nous pouvons en faire une première identification facile en utilisant la compressibilité. Avec cette technique, nous identifions rapidement le **MI** au demi-remplissage, connecté de façon continu à des phases métalliques du côté dopé aux trous et aux électrons. Puis, à un dopage au delà des transitions de phase de premier ordre, la compressibilité nous indique la présence de métaux, identiquement à la section 5.2.1.

Le nouvel élément apporté par la **DCA** par rapport à la **DMFT** est bien sûr cette grande section métallique entre le **MI** et la transition de premier ordre. Kotliar et al. [46] avait trouvé une toute petite section métallique qu’il avait attribué à l’excitation thermique des électrons,

une observation que nous avons noté pour la figure 5.5. Bien que nous nous trouvions à une température plus élevée que dans ces deux cas de DMFT, le dopage auquel se rend la transition est si grand, qu’il ne peut pas être expliqué seulement par des excitations thermiques.

En utilisant les spectres de la Fig. 5.6 b), nous pouvons identifier toutes les différentes phases présentes dans a) de façon beaucoup plus précise. Le triangle vert (premier en haut) et le triangle lilas (dernier en bas) montrent tous les deux un comportement de cFL, facilement reconnaissable avec le pic élevé dans la DOS près de la fréquence nulle. Ces résultats concordent très bien avec ce que nous avons pu constater à la figure 5.5. Sur les deux DOS, les bandes de Hubbard sont aussi très apparentes et indiquent que les corrélations sont élevées. Cette fois, en regardant plutôt le cercle orange, nous y voyons la signature claire d’un MI, car la DOS est nulle à $\omega = 0$, similairement à notre résultat avec la DMFT. Avec autant d’interactions au demi-remplissage et sachant que nous sommes dans la section isolante trouvée à la section 5.1, il n’y a aucune surprise ici d’y voir un isolant. Entre le MI et la région sur-dopée, nous avons le triangle marron et le losange rouge, où il n’y a pas de pic de quasi-particule, mais de la DOS à fréquence nulle. Bien que ce soit un indicateur clair de l’absence d’un cFL, ce n’est pas en soit une preuve formelle de la présence d’un PG étant donné qu’il s’apparente au mauvais métal, tel que défini par la référence [17].

Plusieurs autres méthodes peuvent nous convaincre que nous assistons bien à l’ouverture d’un PG. D’abord, par analogie, il a été montré par Sordi et al. [77] qu’un dopage si élevé avant une transition de premier ordre indiquait bel et bien la présence d’un PG. En soit, cela pourrait suffire à prouver que nous avons bien un PG, mais nous avons les outils pour le montrer hors de tous doutes.

À la section 2.2.3, nous définissons le PG par une perte de poids spectrale dépendante du vecteur d’onde. Pour montrer que c’est bien le cas, nous pouvons tenter d’utiliser la méthode utilisant les premières fréquences de Matsubara pour chacune des zones \mathbf{K}_i . Précisément, nous utilisons les équations 5.3 et 5.4. Nous identifions le PG lorsqu’une des zones normalement métallique devient isolante, indépendamment des autres zones métalliques. Toutefois, un des problèmes avec cette technique est que chaque zone concernée doit avoir une DOS suffisante à $\omega = 0$ pour avoir un comportement métallique. Ce n’est pas un problème du côté dopé aux trous puisque, comme nous pouvons le voir à la figure 5.7, la zone 0 gagne de la surface de Fermi par rapport au cas à demi-remplissage. Toutefois, dans le cas du dopage aux électrons, la surface de Fermi à $U = 0$ s’éloigne de la zone 0 tel que vu à la figure 5.7. La perte de poids spectral est telle, que sur la figure 5.6 c), la zone 0 agit comme un isolant même si en b) il est clair que c’est un cFL. Cette technique de détection du PG est donc inutile lorsque le dopage aux électrons est trop grand ($>2\%$).

Nous pouvons vérifier avec la dernière affirmation que du côté dopé aux trous, entre le cas métallique (triangle vert) et le cas de mauvais métal (losange rouge), un PG est présent. Du côté dopé aux électrons (triangle marron), toutes les zones ont perdu du poids spectral, ce qui pourrait évoquer une perte de poids spectral généralisée, donc pas un PG.

Pour confirmer avec encore plus de vigueur la présence d’un PG du côté dopé aux trous et vérifier s’il y en a un côté dopé aux électrons, nous pouvons utiliser la dernière technique de la section 5.1, soit, utiliser le ratio de poids spectral entre les zones

$$\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_i)/\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_j)$$

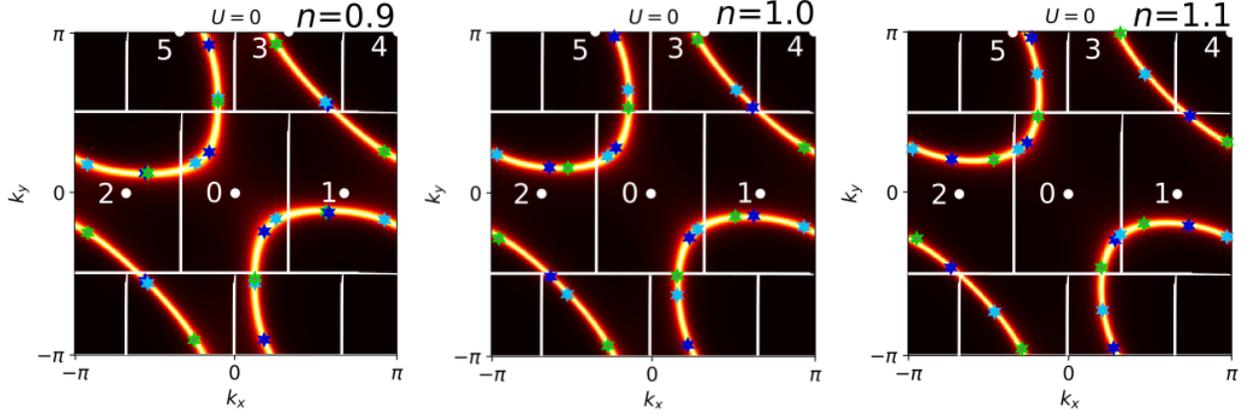


FIGURE 5.7 – Surface de Fermi et points chauds de l’ordre spiral pour différentes valeurs de dopage dans le cas sans interactions. Ces figures visent à montrer comment la surface de Fermi est distribuée à travers les zones d’intégration de l’amas $N_c = 6$. Les étoiles indiquent les points chauds proposés par les vecteurs représentant un ordre spiral. Les étoiles bleues sont pour les vecteurs $(0, 2\pi/3)$, les étoiles cyans sont pour les vecteurs $(2\pi/3, 0)$ et les étoiles vertes sont pour les vecteurs $(2\pi/3, -2\pi/3)$. Il est à noter que pour le cas $n = 0.9$, plusieurs étoiles sont dégénérées sur la surface, réduisant le nombre de points chauds à 18 au lieu de 24.

où i et j sont les indices de deux zones différentes. Si nous étudions le ratio entre les zones 0 et 1, nous pouvons obtenir la figure 5.8. Nous y remarquons alors de grandes différences de ratio entre le **cFL** à fort dopage et le **PG**. C’est vrai tant du côté dopé aux trous que de celui dopé aux électrons! Par cette preuve, il est donc établi que nous avons bel et bien des **PG** dopés aux électrons et aux trous.

La section 5.2.1 nous avait apporté un élément essentiel : le **PG** avait au minimum besoin d’interactions non-locales pour apparaître, toutefois, il n’était pas certain que des interactions à courte portée soient suffisantes à la formation du **PG**. Considérant que notre réseau triangulaire ne permet pas les fluctuations de l’**AFM** à longue portée, les résultats obtenus dans cette section nous montrent très clairement que le **PG** n’est pas lié à ces fluctuations, tant du côté dopé aux trous que dopé aux électrons.

Mécanisme de formation du pseudogap dopé

Il ne fait aucun doute que, comme le **PG** au demi-remplissage de la section 5.1, le **PG** qui apparaît par dopage dans les réseaux triangulaires est différent de celui des cuprates dopés aux trous. Nous avons vu à la figure 5.8 que c’est encore une fois la zone 0 qui perdait le plus de poids spectral, la seule zone qui n’est pas liée à la zone de Brillouin **AFM**. Nous montrons cette zone à la figure 2.6.

Identiquement à la section 5.1, nous proposons que le mécanisme de l’ordre spiral à courte portée joue un rôle dans la formation de ce **PG**. Pour vérifier si ce mécanisme est le bon, nous disposons d’un avantage stratégique par rapport à ce que nous observions au demi-remplissage, nous changeons le dopage, et par conséquent, les points chauds devraient se déplacer. À la figure 5.7, nous observons justement comment se déplacent ces points chauds avec le dopage. Du côté dopé aux trous, en comptant une seule fois les dégénérescences,

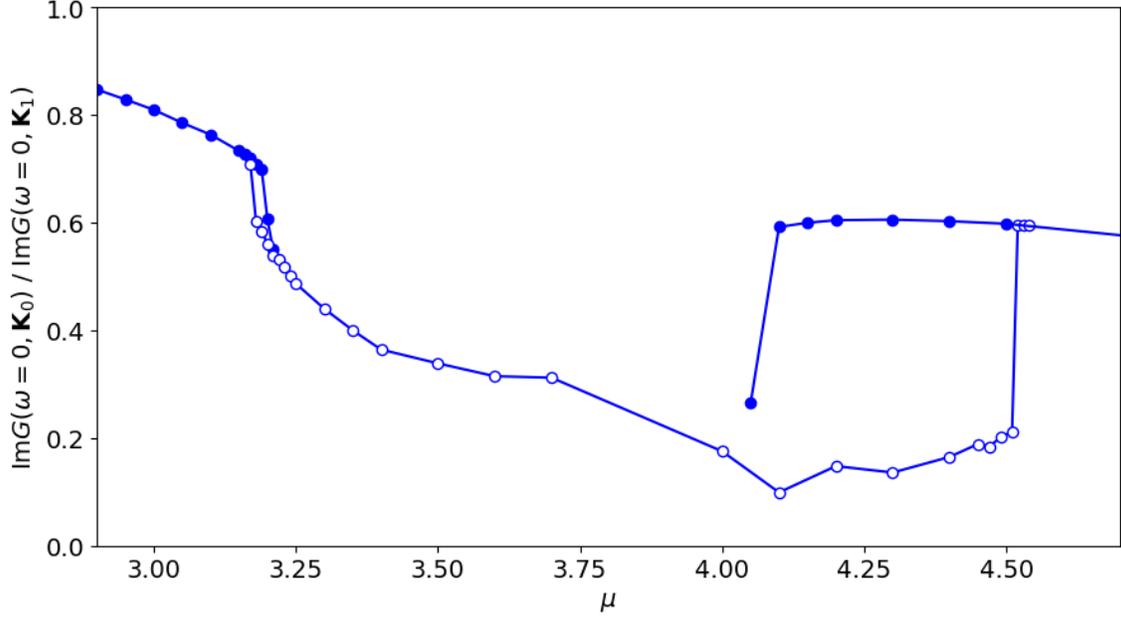


FIGURE 5.8 – Ratio de spectre entre les zones 0 et 1 à $\omega = 0$ à $U = 8.3$ et $T = 1/15$. Les zones sont définies à la figure 5.7. Les points vides appartiennent à la phase MI ou PG, alors que les points pleins appartiennent à la phase cFL.

nous voyons trois points chauds dans la zone 1, et quatre dans la zone 3. Ainsi, nous nous attendons à ce que

$$\left(\frac{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_1)}{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_3)} \right)_{n < 1.0} > \left(\frac{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_1)}{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_3)} \right)_{n = 1.0}.$$

Pour le côté dopé aux électrons, la concentration de points chauds augmente dans la zone 1, alors qu'elle diminue dans la zone 3. Nous nous attendons donc à ce que

$$\left(\frac{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_1)}{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_3)} \right)_{n > 1.0} < \left(\frac{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_1)}{\text{Im}G(\omega = 0, \mathbf{K}_3)} \right)_{n = 1.0}.$$

À la figure 5.9, il semble que ces deux dernières relations soient respectées.

Ce mécanisme semble jusqu'à présent bien intéressant, mais soulève d'importantes questions. Pour prédire la distribution des points chauds, nous avons utilisés des dopages de 10% à la figure 5.7, toutefois, si nous nous fions à la figure 5.6, le dopage est en réalité très petit. Précisément, le dopage change de 0.1%, alors que le ratio monte à 1.5 du côté dopé aux trous ou descend à 0.6 du côté dopé aux électrons. Est-ce que ce faible dopage suffit à déplacer les points chaud suffisamment pour obtenir de telles différences de ratio ? Aussi, nous avons vu à la section 4.2 que les conditions périodiques de notre amas ne permettent pas l'établissement d'un ordre spiral. Alors, est-ce que les fluctuations de l'ordre spiral à courte portée peuvent vraiment expliquer l'ouverture de ce PG ? Sachant que différents ordres magnétiques sont en compétition dans le réseau triangulaire ^[81], est-ce que nous avons proposé le bon ordre ? Pour trouver une réponse à ces questions, il faudrait faire des calculs avec une meilleure résolution de la surface de Fermi.

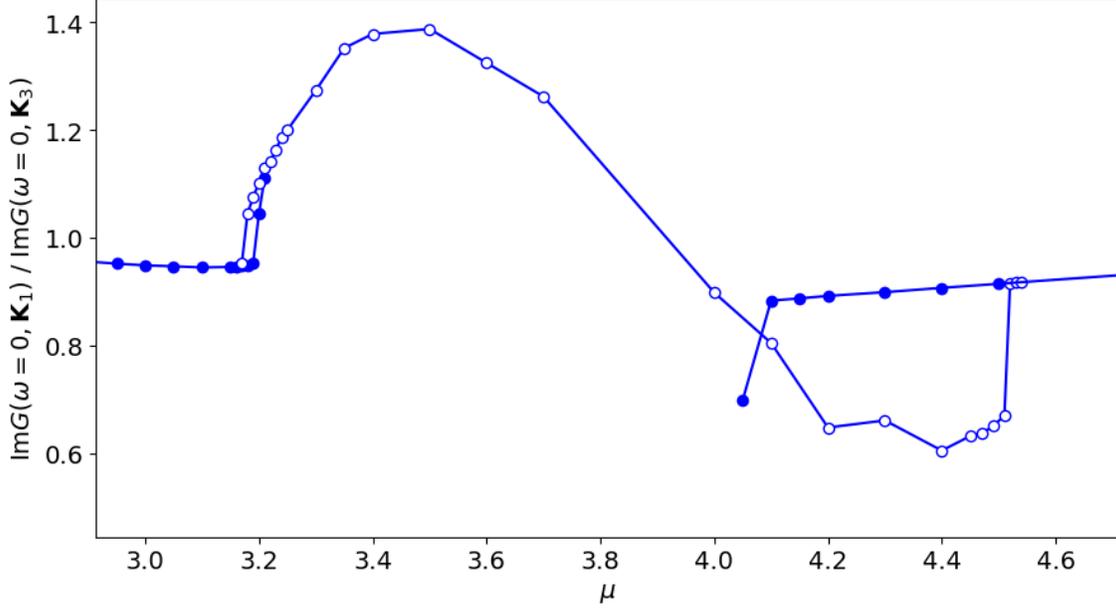


FIGURE 5.9 – Ratio de poids spectral entre les zones 1 et 3 à $\omega = 0$ à $U = 8.3$ et $T = 1/15$. Les zones sont définies à la figure 5.7. Les points vides sont calculés à partir des phases MI ou PG, alors que les points pleins sont calculés à partir de la phase cFL.

5.2.3 Physique de Mott

Dans l'article de Sordi et al. ^[77], une des conclusions était que le PG était lié à la physique de Mott. Afin de vérifier cela, nous allons faire une carte de la physique de Mott hors du demi-remplissage, y identifier les phases, et montrer de quelle façon elles y sont liées. Pour ce faire, nous avons pour objectif dans cette sous-section de comprendre et analyser les figures 5.10 et 5.11. Il peut être difficile de comprendre comment la figure 5.6 est liée aux deux dernières, surtout que celles-ci sont des résumés de plus d'une cinquantaine de graphiques $n(\mu)$. Pour cette raison, nous en donnons plusieurs exemples à l'annexe S.5.

Diagramme de phase $U - \mu$

Commençons notre analyse par la figure 5.10 et décrivons nos observations. Il n'est pas évident de se situer dans cette dernière figure, donc comparons avec le cas de la transition de Mott par pression au demi-remplissage de la figure 5.2, un cas que nous comprenons déjà bien. En suivant la ligne de demi-remplissage de notre nouveau diagramme de phase, nous croisons deux valeurs, U_{c1} et U_{c2} . Nous avons choisi d'ignorer U_{c3} pour ce diagramme de phase, mais il est à noter qu'il rend la région autour de U_{c1} plutôt instable. Dans le diagramme au demi-remplissage, nous avons constaté que le PG à une température de 1/15 existait, toutefois, ici, nous avons changé la façon de faire les points pour augmenter leur stabilité, soit, fixer le potentiel chimique. Ça a eu pour effet de diminuer la valeur moyenne de la densité d'états dans cette région, éliminant le PG au demi-remplissage à cette température.

Éloignons-nous maintenant tranquillement du demi-remplissage et étudions comment les différentes phases réagissent à la pression. Peu de commentaires sont nécessaires pour l'isolant, car nous en avons déjà en profondeur à la section 5.1.2, donc sautons au PG. Nous avons trois

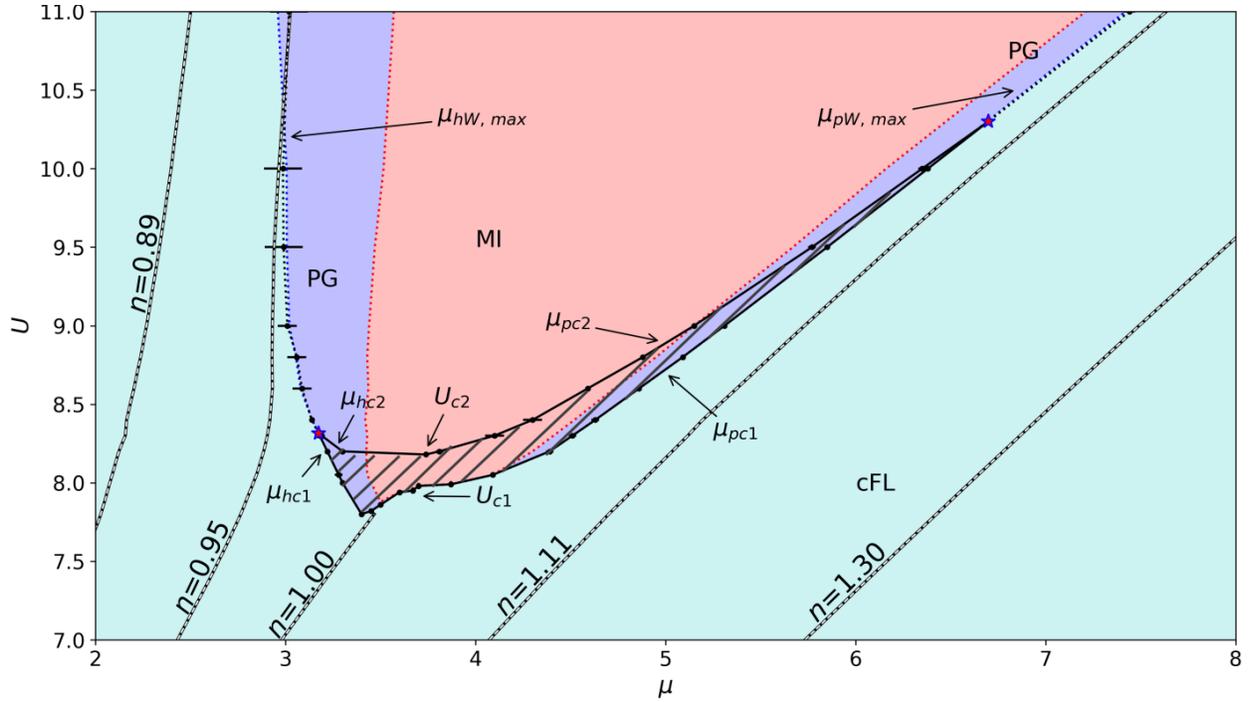


FIGURE 5.10 – Diagramme de phase $U - \mu$ avec $t' = -1$ et $T = 1/15$. Cette figure représente la physique de Mott proche du **MI** décrivant ainsi 3 phases, soit, le **cFL** en cyan, le **PG** en bleu et le **MI** en rouge. Les délimitations pour les phases ne sont qu'un guide pour l'oeil, mais nous utilisons le critère de point d'inflexion dans la partie imaginaire de la fonction de Green pour délimiter le **PG** du **cFL**. Toutes les valeurs critiques utilisées précédemment sont indiquées dans les images, mais expliquées à la section 4.4. La ligne pleine noire représente les transitions de premier ordre **MI/PG** \leftrightarrow **cFL**. Les zones de coexistence entre les phases **MI/PG** et **cFL** sont hachurées. À noter que **MI** et **PG** ne sont jamais en coexistence, étant toujours séparés de façon continue. Chaque ligne en pointillé est un point extremum local de compressibilité $\partial n / \partial \mu$. Les pointillés noirs en sont un maximum. Plusieurs lignes noires avec des pointillés blancs apparaissent, ce sont les lignes d'équiplissage. Les étoiles rouges et bleues dénotent des points de transition de deuxième ordre.

techniques pour détecter le **PG**, mais force est de constater que nos techniques habituelles de détection du **PG** sont mises à mal par un dopage de plus de 4%, tant du côté dopé aux trous que du côté dopé aux électrons.

Rappelons nos trois techniques de détection d'un comportement isolant,

1. La technique en fréquence de Matsubara, soit quand $\text{Im}G(i\omega_0, \mathbf{K}_0) > \text{Im}G(i\omega_1, \mathbf{K}_0)$
2. La perte de poids spectral à $\omega = 0$, l'absence d'un pic de quasi-particule et un minimum local de poids spectral près de l'énergie de Fermi.
3. La technique du ratio entre les zones d'intégration

Pour la première technique, le côté dopé aux trous gagne beaucoup de surface de Fermi, le signal d'entrée dans le **PG** est donc repoussé à des dopages plus petits. Du côté dopé aux électrons, la surface de Fermi quittant la zone 0, il est possible de toujours avoir le signal, particulièrement pour un dopage au delà de 4%, ce qui rends évidemment cette technique pour trouver un **PG** totalement inutile.

Pour la deuxième technique, nous avons le choix entre une technique rapide avec peu de précision (Padé), ou une technique lente avec une précision moyenne (technique d'entropie maximale). Cela nous limite beaucoup, particulièrement si l'objectif est d'en faire des diagrammes de phases exhaustifs. Il est toutefois bien avisé d'utiliser cette technique, justement pour vérifier la validité d'une autre.

Il reste alors la technique de ratio des zones. Cette technique est éprouvée pour les transitions de premier ordre, étant une preuve hors de tous doutes de la présence d'un **PG**. Elle peut toutefois s'avérer assez floue sur la limite d'une transition continue entre le **cFL** et le **PG** puisque la transition n'est pas nécessairement marquée par un point d'inflexion. Il est de plus difficile de prédire comment les points chauds se distribuent sur la surface de Fermi en dopant et d'en prédire précisément l'impact.

Considérant tout cela, nous avons choisi d'utiliser la technique du prolongement analytique pour vérifier la présence d'un **PG**.

Nous remarquons d'abord que lorsque nous augmentons U , le gap de Mott grandit et le dopage auquel se rend le **PG** augmente. C'est vrai tant pour le côté dopé aux trous qu'aux électrons. C'est normal que le gap de Mott augmente, car plus les interactions sont élevées, plus les électrons ont tendance à rester en place, et donc, sauter ce gap devient de plus en plus difficile. Pour ce qui est de l'évolution du **PG** avec la pression (l'inverse de U), ces résultats concordent avec les résultats obtenus en **CDMFT** par Sordi ^[77], et même avec les résultats expérimentaux effectués sur les cuprates du côté dopé aux trous ^[18,68]. Si nous nous fions seulement à la figure 5.10, nous pourrions nous méprendre et croire que le **PG** dopé aux trous se rend à un dopage beaucoup plus grand que pour les électrons. La réalité, c'est que, bien que celui du côté aux trous se rende plus loin en potentiel chimique, la compressibilité $\partial n/\partial\mu$ est beaucoup plus grande du côté dopé aux électrons, ce qui a pour résultat de la faire paraître beaucoup plus petite sur un diagramme de phase $U - \mu$.

Discutons maintenant des transitions de phases. Nous y constatons en fait que notre résultat à la figure 5.6 est loin d'être singulier. En effet, la transition de premier ordre du côté dopé aux trous et aux électrons persiste à plusieurs valeurs de U , quoiqu'il semble clair que pour les électrons, cette persistance est bien plus forte. Cette asymétrie découle bien sûr de l'utilisation d'un réseau triangulaire, comme discuté à la section 5.2.1. Nous pouvons remarquer un autre point intéressant, la bosse de Giamarchi ^[24]. Dans son travail, Giamarchi avait trouvé la solution exacte du modèle d'Hubbard en une dimension, trouvant une petite bosse de stabilité de la phase isolante à un U faible, une particularité qui semble donc subsister pour les dimensions plus élevées.

Tout comme avec les résultats de Sordi et al. ^[77] dans le réseau carré, le **PG** est confiné par la transition de Mott et par les lignes de compressibilité maximum. Aussi, près des points critiques des côtés dopé aux trous et aux électrons, nous voyons la transition de Sordi apparaître, cette transition de premier ordre entre deux métaux thermodynamiquement stables.

Toute cette discussion nous amène donc à deux conclusions. Nous avons déterminé précédemment que le réseau utilisé était un réseau convergé, par conséquent, la transition de Sordi ne peut plus être considérée comme un artefact des petits réseaux. De plus, voyant comment cette transition est directement connectée à la transition de Mott, nous en concluons qu'elle n'est qu'une conséquence de la physique de Mott, tout comme nous en concluons que le **PG**

est lié à cette physique.

Diagramme de phase $T - \mu$

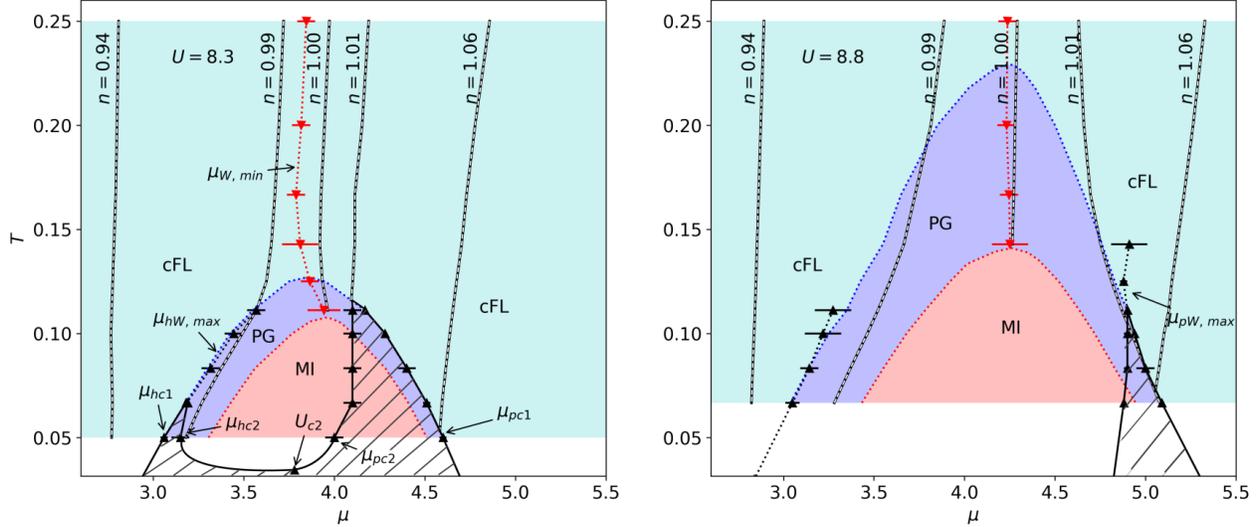


FIGURE 5.11 – Diagramme de phase $T - \mu$ pour deux différentes valeurs de U avec $t' = -1$. Cette figure représente la physique de Mott proche du **MI** décrivant ainsi trois phases, le **cFL** en cyan, le **PG** en bleu et le **MI** en rouge. Les délimitations pour les phases ne sont qu'un guide pour l'œil, mais sont tout de même basées sur les trois critères du **PG** utilisés à la section 5.1. Toutes les valeurs critiques utilisées précédemment sont indiquées dans les images, mais expliquées à la section 4.4. La ligne pleine noire représente les transitions de premier ordre $\text{MI/PG} \leftrightarrow \text{cFL}$. Les zones de coexistence entre les phases **MI/PG** et **cFL** sont hachurées. À noter que les phases **MI** et **PG** ne sont jamais en coexistence, étant toujours connectées de façon continue. Chaque ligne en pointillé est un point extremum local de compressibilité $\partial n / \partial \mu$. La ligne rouge pointillée est un minimum de compressibilité, alors que les pointillés noirs en sont un maximum. Plusieurs lignes noires avec des traits blancs apparaissent, ce sont les lignes d'équi-remplissage.

Analysons maintenant la figure 5.11. Pour bien comprendre, il faut imaginer que nous observons une coupe verticale en dopage de la figure 5.2. Nous y constatons encore la présence de nos trois phases habituelles.

Nos premiers commentaires se tournent d'abord vers la transition de phase de premier ordre. Au premier abord, il est plutôt surprenant de voir qu'à $U = 8.3$ et $\beta > 29.0$, le métal est stable ou métastable pour toutes les valeurs de μ , une constatation que nous pouvons également faire à la figure 5.10 à $U = 8.05$. Ce résultat nous vient en fait de la transition de Mott au demi-remplissage de la figure 5.2, où U_{c2} augmente rapidement lorsque la température descend. En augmentant U , les zones de coexistence des transitions de premier ordre deviennent plus petites, comme nous l'avions déjà constaté dans le diagramme $U - \mu$. Nous voyons aussi que la transition de Sordi persiste à différentes températures.

Si cette fois nous regardons l'évolution des phases dans le diagramme $T - \mu$, nous constatons que descendre la température a deux effets : le gap du **MI** grandit en potentiel chimique et le **PG** grandit en dopage. Le premier effet se comprend du fait que le niveau fondamental

dans cette région est un isolant. Le second est cohérent avec les résultats expérimentaux pour les cuprates, tant du côté dopé aux trous qu'aux électrons [53].

À basse température, nous voyons comment le **PG** suit bien la transition de Mott, un argument supplémentaire de son lien avec la physique de Mott. Au delà de la transition de premier ordre, nous pouvons même voir que le **PG** suit généralement très bien la ligne de Widom. À plus haute température toutefois, les lignes de Widom disparaissent avant le **PG**. Ceci pourrait être différent de ce qui est observé dans la référence [80] pour le réseau carré où, cependant, le **PG** est défini à partir d'autres observables que celle considérée ici.

La ligne de compressibilité minimale $\mu_{W, min}$ a aussi des subtilités intéressantes. Quand le **MI** disparaît à haute température, elle agit comme un précurseur du **MI**. Il est assez particulier qu'une ligne comme celle là ne soit pas centrée au demi-remplissage, d'autant plus que la température la plus élevée à laquelle se rend le **PG** est centré sur celle-ci. Nous le voyons particulièrement bien à $U = 8.3$, une constatation que nous pouvons également voir dans le papier de Macridin *et al.* [55].

Considérant de plus que le **PG** à demi-remplissage et à dopage fini pourraient partager un même mécanisme de formation, considérant également qu'ils sont connectés de façon continue et considérant finalement que le précurseur du **MI** $\mu_{W, min}$ est centré avec le **PG** à haute température, nous concluons que les **PG** dopés aux trous et aux électrons ont une origine commune et que leur formation est étroitement liée à la physique de Mott.

5.2.4 Singularité de Van Hove et Pseudogap

Nous avons rapidement parlé de la **VHS** à la section 2.1.2 dans le cas où $U = 0$. À U non nul, nous pourrions raisonnablement s'attendre à ce qu'elle se déplace, mais il est bien plus difficile de la suivre dans un tel cas, puisque nous devons réaliser un balayage méticuleux du potentiel chimique, à la recherche d'un maximum clair du poids spectral à $\omega = 0$ ($A(\omega = 0)$). La raison pour laquelle nous portons attention à la **VHS** est que Wu *et al.* [95] l'avaient proposé comme un possible mécanisme de formation du **PG** dans le réseau triangulaire. Ayant une quantité importante de données, nous pouvons maintenant vérifier la validité de cette proposition.

Pour vérifier, nous effectuons une interpolation Lagrangienne sur les 3 premières fréquences de Matsubara de $\text{Im}(\bar{G}(i\omega_n))$ pour obtenir une bonne approximation de $\text{Im}(\bar{G}(\omega = 0))$. En utilisant le fait que $A(\omega) = -2\text{Im}(\bar{G}(\omega = 0))$, nous créons la figure 5.12.

D'après ce que nous pouvons voir sur cette dernière figure, le maximum de $A(\omega = 0)$ est très loin du demi-remplissage, s'étant seulement légèrement déplacé par rapport au cas $U = 0$. Cela signifie pour nous que la **VHS** n'est probablement pas en jeu dans la formation du **PG**, une conclusion cohérente avec le travail de Reymbault *et al.* [68] et Horio *et al.* [37].

5.2.5 Prouver que le pseudogap existe dans le réseau triangulaire

Dans cette dernière sous-section sur la transition de phase induite par le dopage, nous allons explorer comment nous pourrions prouver expérimentalement que le **PG** dopé existe dans un réseau triangulaire et qu'il est bien lié à la physique de Mott. Pour ce faire, nous allons retourner au diagramme de phase $U - \mu$ de la figure 5.10 et en étudier la compressibilité.

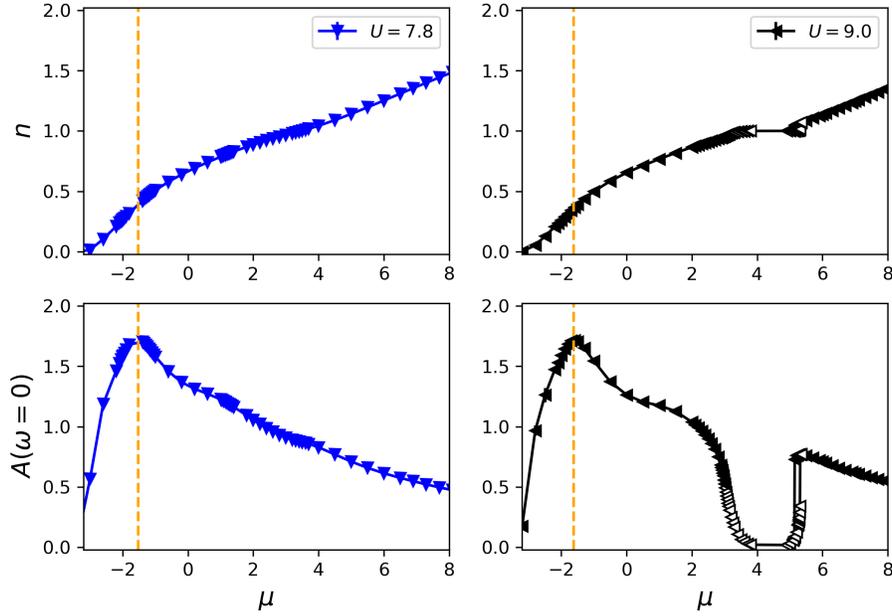


FIGURE 5.12 – Les courbes de remplissage pour deux valeurs différentes de U et leur poids spectral respectif à $\omega = 0$. Les lignes orange indiquent le potentiel chimique auquel la **VHS** apparaît, soit $\mu = -1,53$ pour $U = 7,8$ et $\mu = -1,62$ pour $U = 9,0$.

Pour accomplir cela, il faut prendre conscience des nombreuses limitations des matériaux expérimentaux. Le réseau triangulaire n'existe pas dans les cuprates et il n'y a essentiellement que les supraconducteurs organiques où nous pouvons étudier expérimentalement une transition de Mott sur un réseau triangulaire. De plus, un problème majeur des organiques est que leur dopage est extrêmement difficile. Si quelqu'un souhaite le faire, il se butte à plusieurs défis :

1. Il existe de très rares valeurs de dopage possibles ^[99], soit 5-6% ou 11% ;
2. Le dopage peut être fait artificiellement par Transistor par Effet de Champs / *Field-Effect Transistor* (**FET**) ^[96], une technique encore très difficile ;
3. Il peut être réalisé par des simulateurs de modèle d'Hubbard, tel qu'un réseau triangulaire sur silicium ^[59] ou simulateur de fermions froids dans un réseau optique ^[84], tous deux limités par la température.

En attendant l'amélioration des simulateurs et une plus large utilisation de la technique par **FET**, nous cherchons donc une façon d'utiliser les matériaux triangulaires dopés pour prouver l'existence du **PG**.

Jetons un oeil à la figure 5.13 qui montre par un code de couleur la compressibilité dans le diagramme de phase précédent. Sous cet angle de vue, nous voyons bien apparaître les lignes de Widom, tant du côté dopé aux trous que du côté dopé aux électrons. Nous y voyons également très bien l'isolant en gris, et l'ouverture du **PG** quand les couleurs commencent à changer autour de l'isolant. Toutes ces caractéristiques étaient déjà bien connues pour un réseau carré et, comme dans les articles précédents ^[78], nos lignes de Widom ne se déplacent pas beaucoup en remplissage, les rendant presque impossible à trouver expérimentalement.

C'est de là que la figure 5.13 devient vraiment utile,. Nous y voyons de nouvelles tendances de la compressibilité, soit, les lignes de compressibilité extrémales $\mu_{sh, min}$, $\mu_{sp, min}$, $\mu_{int, min}$ et $\mu_{sp, max}$. Tentons donc de comprendre ce qu'elles signifient.

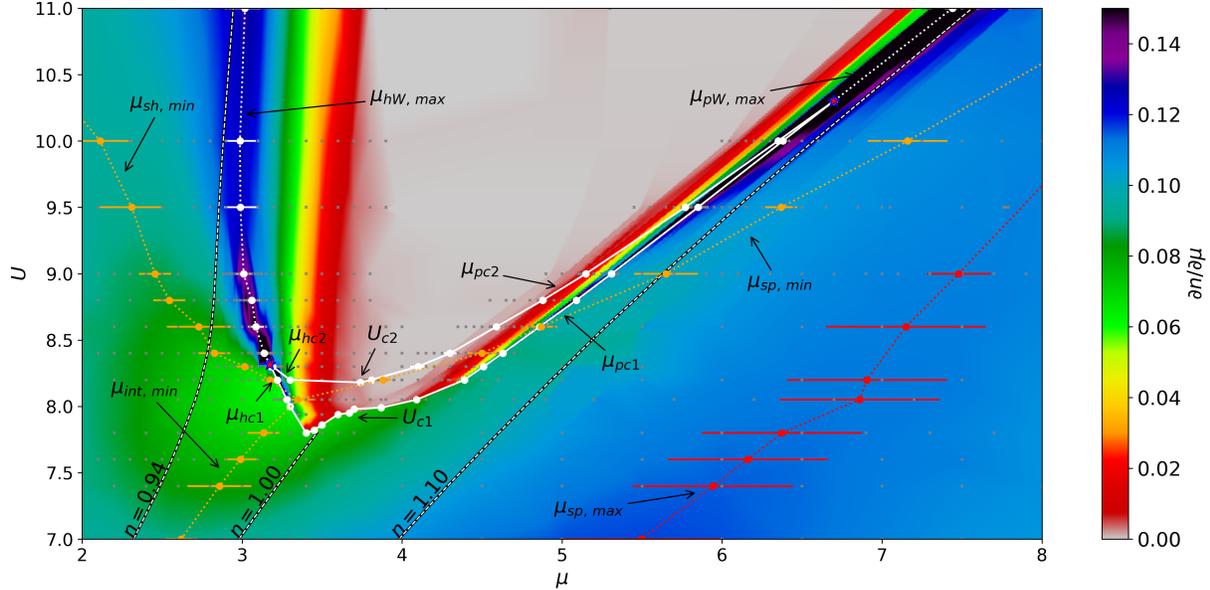


FIGURE 5.13 – Image rapprochée de la compressibilité (en couleur) $dn/d\mu$ dépendante de $U - \mu$ à $T = 1/15$. Cette figure se veut être la version en compressibilité du diagramme de phase de la figure 5.10. De par cette figure, plusieurs tendances sont mises en évidence, tel que des lignes de compressibilité minimale en orange, et une ligne de compressibilité maximale en rouge. Les incertitudes de ces lignes sont normalement la distance entre les deux calculs les plus proches (petits points gris). Les couleurs sont calculées à partir des données de remplissage, mais plusieurs points ont dû être retirés vu l'instabilité qu'ils apportaient à leur dérivée, ou parfois, la technique d'interpolation entre des points a dû être changée. Nous devons donc prendre les couleurs comme un guide pour l'oeil. Une explication plus détaillée des lignes de compressibilité est donnée à la section 4.4. Cette figure a été réalisée en grande partie avec l'aide d'Olivier Gingras.

Sur la figure 5.15, regardons d'abord le cas sans interactions. En 1, nous y voyons un maximum, c'est celui de la singularité de Van Hove $\mu_{VHS, max}$, un maximum qui ne bouge pas vraiment avec U . Alors que les interactions augmentent à $U = 5$, nous voyons près du demi-remplissage l'apparition d'un plateau, se transformant en deux nouveaux extremums à $U = 7.8$, les extremums 2 et 3 sur la figure. Nous en comprenons que ces nouveaux extremums, $\mu_{int, min}$ et $\mu_{sp, max}$, sont purement le produit des interactions, le premier y étant directement lié, le second étant la conséquence du premier. C'est à $U = 9.0$ que ça devient vraiment intéressant. $\mu_{int, min}$ s'est transformé en **MI** et $\mu_{sp, max}$ subsiste. C'est là que le **PG** entre en jeu, les maximums 4 et 5 étant respectivement $\mu_{hw, max}$ et $\mu_{pc2, max}$ sont créés par l'existence même du **PG**. Ajouter deux maximums crée forcément deux minimums, les minimums 6 et 7, référés par $\mu_{sh, min}$ et $\mu_{sp, min}$.

Nous en comprenons ceci : Des minimums de compressibilité sont causés par l'existence même de la physique de Mott et du **PG** dans le réseau triangulaire. Sachant qu'une mesure de compressibilité n'est pas facile expérimentalement, il faudrait une importante différence

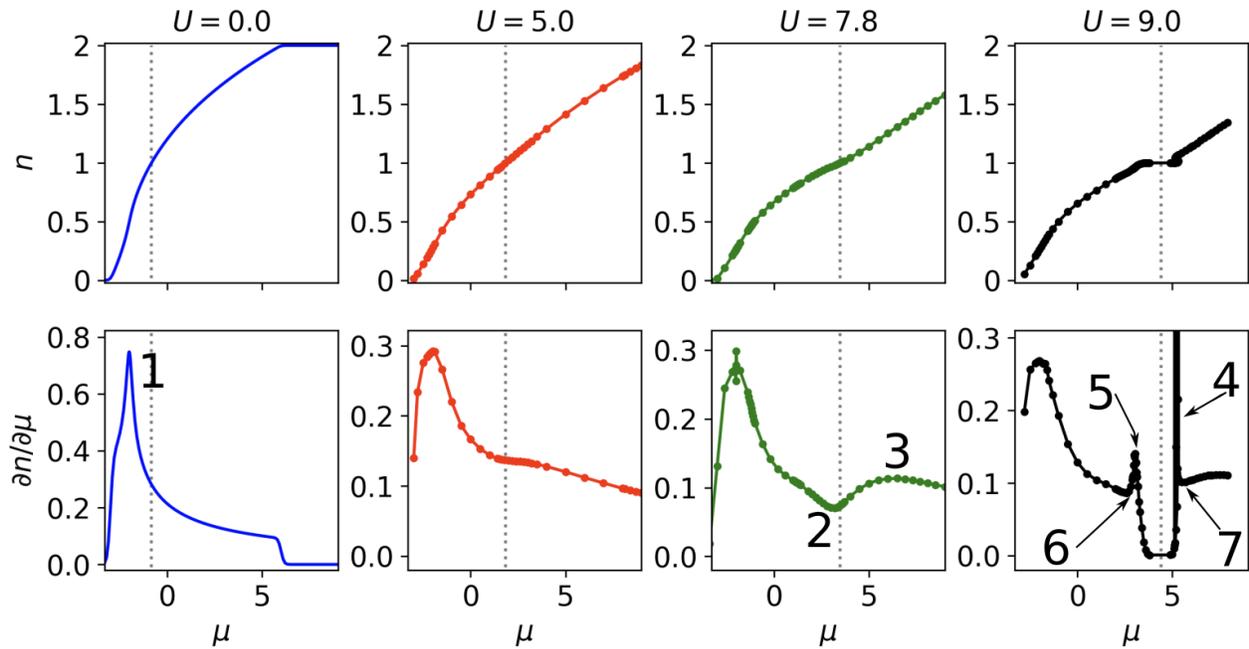


FIGURE 5.14 – En haut, remplissage de la bande selon le potentiel chimique, en bas, compressibilité en fonction du potentiel chimique. Les colonnes sont pour plusieurs valeurs de U . Les lignes pointillées indiquent où est le demi-remplissage. Les nombres dans les figures du bas indiquent un extremum auquel nous ferons référence dans le texte.

de compressibilité pour vraiment constater l'existence de cette ligne.

Sur la figure 5.15, nous montrons une image globale de la compressibilité en fonction de $U - \mu$. C'est intéressant de constater que, suivant une ligne d'équi-remplissage en changeant la pression, ce minimum de la compressibilité pourrait être jusqu'à 50% plus petit que ce qui est observé à des U différents, une différence significative. Il semble donc possible de montrer expérimentalement que le PG existe dans le réseau triangulaire et qu'il est lié à la physique de Mott.

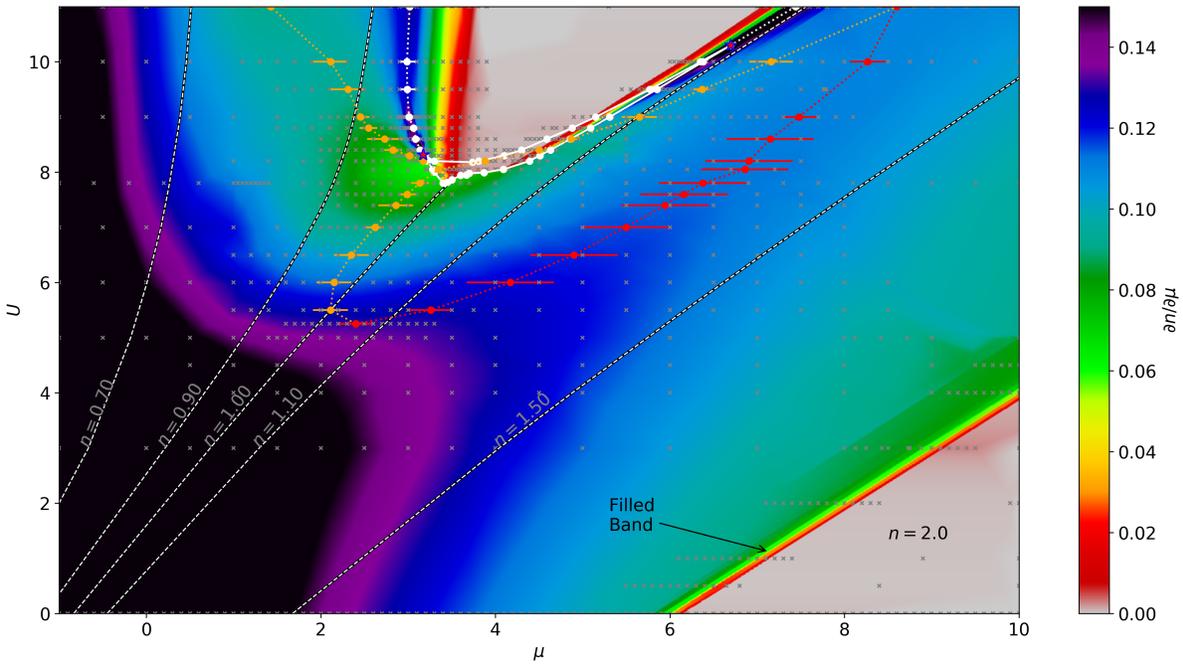


FIGURE 5.15 – Image globale de la compressibilité $dn/d\mu$ dépendante de $U - \mu$. La figure 5.13 offre les détails liés à cette figure. Cette figure a été réalisée en grande partie avec l'aide d'Olivier Gingras.

Chapitre 6

Conclusion

Deux propositions ont d'abord motivé l'écriture de ce mémoire. D'abord, nous voulions vérifier si l'**AFM** à courte portée était liée à la formation du **PG**, puis nous voulions vérifier si la physique de Mott était liée à sa formation. Pour cette raison, nous avons pris la décision d'utiliser un réseau triangulaire, où la frustration empêcherait les fluctuations de l'**AFM** à longue portée, pour faire une étude détaillée de la transition de Mott et voir comment le **PG** y est lié. Nous avons pu accomplir ces objectifs principaux en utilisant la **DMFT** et la **DCA**. Dans le réseau triangulaire, nous avons étudié la transition de Mott induite par la pression au demi-remplissage, puis la transition induite par le dopage et nous y avons prouvé l'existence du **PG**.

En commençant par la transition par pression, utilisant un grand réseau de 16 sites, nous avons d'abord établi que la ligne de Widom au demi-remplissage observée dans la littérature n'était pas un artefact de la taille des amas utilisés par le passé. Les résultats sur la convergence des amas nous ayant montré que peu de sites sont nécessaires pour bien décrire le modèle de Hubbard du réseau triangulaire à température finie, nous avons pu montrer que le **PG** à interactions fortes existe au demi-remplissage. Nous avons découvert que les fluctuations de l'**AFM** à longue ou à courte portée ne sont pas liées à la formation ce **PG**. Nous avons alors proposé que l'ordre spiral à courte portée pourrait en être la cause.

En poursuivant notre étude du réseau triangulaire par l'analyse de son comportement hors du demi-remplissage, nous avons appris avec la **DMFT** que les interactions purement locales ne sont pas suffisantes pour l'ouverture d'un **PG**. Notre amas $N_c = 6$ en **DCA**, où les corrélations à courte portée sont permises, a permis de retrouver ce **PG**, tant du côté dopé aux trous qu'aux électrons. Encore une fois, nous avons observé que les fluctuations de l'**AFM** à longue ou à courte portée ne semblent pas liées à la formation des **PG**. Nous avons proposé que ceux-ci seraient liés à l'ordre spiral à courte portée, mais nous avons émis des réserves quant à cette idée puisqu'une très faible modification du dopage avait pour effet de changer radicalement la distribution de la surface de Fermi entre les zones, même si les points chauds de l'ordre spiral ne se déplacent pas autant.

Nous avons continué à chercher les causes du **PG** en calculant avec précision les diagrammes de phase près de la transition de Mott. Nous avons pu établir plusieurs conclusions à partir de là. Étant donné qu'une transition de premier ordre connectée de façon continue au **MI** limite la portée en dopage du **PG**, il semble que cette phase soit liée à la physique de Mott. Parallèlement, nous avons conclu que la transition de Sordi est un phénomène essen-

tiel lié à la transition de Mott par dopage. Étant donné que les **PG** dopés aux trous et aux électrons sont liés de façon continue au **PG** du demi-remplissage, nous avons proposé que les deux ont une origine commune. Cette étude détaillée nous a aussi permis de vérifier que la **VHS** n'est pas liée à la formation du **PG**.

Puisqu'il n'est pas possible de vérifier directement la dépendance en vecteur d'onde de la **DOS** dans les matériaux décrits par des réseaux triangulaires, nous avons proposé une méthode expérimentale utilisant la compressibilité pour vérifier l'existence du **PG**.

En somme, le **PG** existe dans le réseau triangulaire, mais n'est pas lié aux fluctuations de l'**AFM**. La physique de Mott joue un rôle important dans leur formation et les **PG** dans les régimes dopés et au demi-remplissage ont, selon nos calculs, une origine commune.

Notre étude a permis de prouver plusieurs éléments importants de la physique des réseaux triangulaires. Elle ne fait toutefois pas que lever le voile sur le **PG** du réseau triangulaire. Elle permet de montrer l'importance de la physique de Mott dans la formation du **PG** des cuprates dopés aux trous, ouvrant même la voie à une remise en question de la nécessité des fluctuations de l'**AFM** à courte portée pour sa formation. L'hypothèse de l'importance des singulets reste à prouver définitivement.

Bibliographie

- [1] P. W. Anderson. Localized Magnetic States in Metals. *Phys. Rev.*, 124(1) :41–53, 1961.
- [2] P. W. Anderson. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, 235 :1196 – 8, 1987.
- [3] K. Aryanpour, Th. A. Maier, and M. Jarrell. Comment on “cluster methods for strongly correlated electron systems”. *Phys. Rev. B*, 71 :037101, 2005.
- [4] Neven Barišić, Mun K. Chan, Yuan Li, Guichuan Yu, Xudong Zhao, Martin Dressel, Ana Smontara, and Martin Greven. Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(30) :12235–12240, July 2013. PMID : 23836669.
- [5] J.G. Bednorz and K.A. Müller. Possible high T_c superconductivity in the BaLaCuO system. *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter*, 64(2) :189–193, 1986.
- [6] Dominic Bergeron and A.-M. S. Tremblay. Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation. *Phys. Rev. E*, 94 :023303, Aug 2016.
- [7] D. D. Betts, H. Q. Lin, and J. S. Flynn. Improved finite-lattice estimates of the properties of two quantum spin models on the infinite square lattice. *Canadian Journal of Physics*, 77 :353–369, 1999.
- [8] D. D. Betts, S. Masui, N. Vats, and G. E. Stewart. Improved finite-lattice method for estimating the zero-temperature properties of two-dimensional lattice models. *Canadian Journal of Physics*, 74 :54–64, 1996.
- [9] G. Biroli and G. Kotliar. Reply to “comment on ‘cluster methods for strongly correlated electron systems’ ”. *Phys. Rev. B*, 71 :037102, 2005.
- [10] Giulio Biroli and Gabriel Kotliar. Cluster methods for strongly correlated electron systems. *Phys. Rev. B*, 65 :155112, Apr 2002.
- [11] J. Bouvier and J. Bok. Van hove singularity and “pseudo-gap” in HTSC. *Journal of Superconductivity*, 10(6) :673–675, 1997.
- [12] C. Cockrell, V.V. Brazhkin, and K. Trachenko. Transition in the supercritical state of matter : Review of experimental evidence. *Physics Report*, 941 :1–27, 2021.
- [13] C. Collignon, S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, F. Laliberté, O. Cyr-Choinière, J.-S. Zhou, S. Licciardello, S. Wiedmann, N. Doiron-Leyraud, and Louis Taillefer. Fermi-surface transformation across the pseudogap critical point of the cuprate superconductor $\text{La}_{1.6-x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. 95(22) :224517, 2017.
- [14] E. Dagotto. The Race to Beat the Cuprates. *Sciences*, 293 :2410–2411, 2001.

- [15] Hung T. Dang, Xiao Yan Xu, Kuang-Shing Chen, Zi Yang Meng, and Stefan Wessel. Mott transition in the triangular lattice hubbard model : A dynamical cluster approximation study. *Physical Review B*, 91(15) :155101, 2015.
- [16] J H de Boer and E J W Verwey. Semi-conductors with partially and with completely filled 3 d -lattice bands. *Proceedings of the Physical Society*, 49(4S) :59, 1937.
- [17] Xiaoyu Deng, Jernej Mravlje, Rok Žitko, Michel Ferrero, Gabriel Kotliar, and Antoine Georges. How Bad Metals Turn Good : Spectroscopic Signatures of Resilient Quasiparticles. *Physical Review Letters*, 110(8) :086401, 2013.
- [18] N. Doiron-Leyraud, O. Cyr-Choinière, S. Badoux, A. Ataei, C. Collignon, A. Gourgout, S. Dufour-Beauséjour, F. F. Tafti, F. Laliberté, M.-E. Boulanger, M. Matusiak, D. Graf, M. Kim, J.-S. Zhou, N. Momono, T. Kurosawa, H. Takagi, and Louis Taillefer. Pseudogap phase of cuprate superconductors confined by Fermi surface topology. 8(1) :2044, 2017.
- [19] Yawen Fang, Gaël Grissonnanche, Anaëlle Legros, Simon Verret, Francis Laliberté, Clément Collignon, Amirreza Ataei, Maxime Dion, Jianshi Zhou, David Graf, Michael J. Lawler, Paul A. Goddard, Louis Taillefer, and B. J. Ramshaw. Fermi surface transformation at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor. *Nature Physics*, 8 :558–564, 2022.
- [20] Øystein Fischer, Martin Kugler, Ivan Maggio-Aprile, Christophe Berthod, and Christoph Renner. Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 79 :353–419, Mar 2007.
- [21] L. Fratino, S. Bag, A. Camjayi, M. Civelli, and M. Rozenberg. Doping-driven resistive collapse of the mott insulator in a minimal model for VO₂. *Physical Review B*, 105(12) :125140, Mar 2022.
- [22] C. Gauvin-Ndiaye, M. Setrakian, and A.-M. S. Tremblay. Resilient Fermi liquid and strength of correlations near an antiferromagnetic quantum critical point. *Physical Review Letter*, 128 :087001, 2022.
- [23] A. Georges and G. Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*, 45 :6479, 1992.
- [24] T. Giamarchi. Mott transition in one dimension. *Physica B : Condensed Matter*, 230-232 :975–980, 1997.
- [25] F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie. Small phonon contribution to the photoemission kink in the copper oxide superconductors. 452(7190) :975–978, 2008.
- [26] J. González, M. A. Martín-Delgado, G. Sierra, and A. H. Vozmediano. From the Cuprate Compounds to the Hubbard Model. *Springer*, pages 127–149, 1995.
- [27] A. Gourgout, A. Ataei, M.-E. Boulanger, S. Badoux, S. Thériault, D. Graf, J.-S. Zhou, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, Nicolas Doiron-Leyraud, and Louis Taillefer. Effect of pressure on the pseudogap and charge density wave phases of the cuprate Nd-LSCO probed by thermopower measurements. 3(2) :023066, 2021.
- [28] E. Gull, M. Ferrero, O. Parcollet, A. Georges, and A. J. Millis. Momentum-space anisotropy and pseudogaps : A comparative cluster dynamical mean-field analysis of the doping-driven metal-insulator transition in the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B*, 82 :155101, Oct 2010.

- [29] E. Gull, P. Werner, O. Parcollet, and M. Troyer. Continuous-time auxiliary-field Monte Carlo for quantum impurity models. *82(5)* :57003, 2008.
- [30] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer, and Philipp Werner. Continuous-time monte carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.*, 83 :349–404, May 2011.
- [31] O. Haan, J.-U. Klaetke, and K.-H. Mütter. Ground-state staggered magnetization of the antiferromagnetic Heisenberg model. *Physical Review B*, 46(9) :5723–5726, 1992.
- [32] V. Hankevych, B. Kyung, A.-M. Daré, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay. Strong- and weak-coupling mechanisms for pseudogap in electron-doped cuprates. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 67 :189 – 192, 2006.
- [33] D. A. Harville. *Matrix Algebra From a Statistician’s Perspective*. Springer New York, 1997.
- [34] M. H. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, and H. R. Krishnamurthy. Dynamical cluster approximation : Nonlocal dynamics of correlated electron systems. *Phys. Rev. B*, 61 :12739 – 56, 2000.
- [35] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, and H. R. Krishnamurthy. Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems. *Phys. Rev. B*, 58 :R7475, 1998.
- [36] J. E. Hirsch. BCS theory of superconductivity : It is time to question its validity. *Physica Scripta*, 80(3) :035702, 2009.
- [37] M. Horio, T. Adachi, Y. Mori, A. Takahashi, T. Yoshida, H. Suzuki, L. C. C. Ambolode, K. Okazaki, K. Ono, H. Kumigashira, H. Anzai, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, D. Ootsuki, K. Sawada, M. Takahashi, T. Mizokawa, Y. Koike, and A. Fujimori. Suppression of the antiferromagnetic pseudogap in the electron-doped high-temperature superconductor by protect annealing. *7* :10567.
- [38] M. Horio, S. Sakai, K. Koshiishi, Y. Nonaka, H. Suzuki, J. Xu, M. Hashimoto, D. Lu, Z.-X. Shen, T. Ohgi, T. Konno, T. Adachi, Y. Koike, M. Imada, and A. Fujimori. Common origin of the pseudogap in electron-doped and hole-doped cuprates governed by Mott physics. *arXiv*, 1801 :04247, 2018.
- [39] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. London A*, 276 :238, 1963.
- [40] C. Huscroft, M. Jarrell, Th. Maier, S. Moukouri, and A. N. Tahvildarzadeh. Pseudogaps in the 2d hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :139 – 42, 2001.
- [41] C.-D. Hébert, P. Sémon, and A.-M. S. Tremblay. Superconducting dome in doped quasi-two-dimensional organic Mott insulators : A paradigm for strongly correlated superconductivity. *Physical Review B*, 92(19) :195112, November 2015.
- [42] M. Jarrell. Hubbard model in infinite dimensions : A quantum monte carlo study. *Phys. Rev. Lett.*, 69 :168, 1992.
- [43] D. Jerome, A. Mazaud, M. Ribault, and K. Bechgaard. *J. Phys. Lett.*, 41 :L95, 1980.
- [44] F Kagawa, K Miyagawa, and K Kanoda. Unconventional critical behaviour in a quasi-two-dimensional organic conductor. *Nature*, 436(7050) :534, JUL 28 2005.

- [45] A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria, U. Chatterjee, S. Souma, A. Kaminski, H. M. Fretwell, S. Rosenkranz, M. Shi, T. Sato, T. Takahashi, Z. Z. Li, H. Raffy, K. Kadowaki, D. Hinks, L. Ozyuzer, and J. C. Campuzano. Evolution of the pseudogap from Fermi arcs to the nodal liquid. *Nature Physics*, 2(7) :447–451, 2006.
- [46] G. Kotliar, Sahana Murthy, and M. J. Rozenberg. Compressibility divergence and the finite temperature mott transition. *Phys. Rev. Lett.*, 89(4) :046401, Jul 2002.
- [47] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Reviews of Modern Physics*, 78(3) :865, 2006.
- [48] B. Kyung and A.-M. S. Tremblay. Mott transition, antiferromagnetism, and d-wave superconductivity in two-dimensional organic conductors. *Physical Review Letters*, 97(4) :046402, 2006.
- [49] Manuel Laubach, Ronny Thomale, Christian Platt, Werner Hanke, and Gang Li. Phase diagram of the Hubbard model on the anisotropic triangular lattice. *Physical Review B*, 91(24) :245125, 2015.
- [50] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa, and Xiao-Gang Wen. Doping a mott insulator : Physics of high-temperature superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, 78 :17–85, Jan 2006.
- [51] S. Lefebvre, P. Wzietek, S. Brown, C. Bourbonnais, D. Jérôme, C. Mézière, M. Fourmigué, and P. Batail. Mott transition, antiferromagnetism, and unconventional superconductivity in layered organic superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 85(25) :5420–5423, Dec 2000.
- [52] Zi-Xiang Li and Hong Yao. Sign-Problem-Free Fermionic Quantum Monte Carlo : Developments and Applications. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 10(1) :337–356, 2019.
- [53] C. Lin, T. Adachi, M. Horio, T. Ohgi, M. A. Baqiya, T. Kawamata, H. Sato, T. Sumura, K. Koshiishi, S. Nakata, G. Shibata, K. Hagiwara, M. Suzuki, K. Ono, K. Horiba, H. Kumigashira, S. Ideta, K. Tanaka, Y. Koike, and A. Fujimori. Extended superconducting dome revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy of electron-doped cuprates prepared by the protect annealing method. *Physical Review Research*, 3(1) :013180, 2021.
- [54] A. Macridin, M. Jarrell, and Th. Maier. Phase separation in the Hubbard model using the dynamical cluster approximation. *Physical Review B*, 74(8) :085104, 2006.
- [55] A. Macridin, Th. A. Maier, M. S. Jarrell, and G. A. Sawatzky. Physics of cuprates with the two-band hubbard model - the validity of the one-band hubbard model. *Phys. Rev. B*, 71 :134527, 2005.
- [56] T. A. Maier, M. Jarrell, T. C. Schulthess, P. R. C. Kent, and J. B. White. Systematic study of d-wave superconductivity in the 2d repulsive hubbard model. *Physical Review Letters*, 95(23) :237001, 2005.
- [57] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke, and Matthias H. Hettler. Quantum cluster theories. *Rev. Mod. Phys.*, 77 :1027–1080, Oct 2005.
- [58] J. Merino and O. Gunnarsson. Pseudogap and singlet formation in organic and cuprate superconductors. *Physical Review B*, 89(24) :245130, 2014.

- [59] Fangfei Ming, Steve Johnston, Daniel Mulugeta, Tyler S. Smith, Paolo Vilmercati, Geunseop Lee, Thomas A. Maier, Paul C. Snijders, and Hanno H. Weitering. Realization of a Hole-Doped Mott Insulator on a Triangular Silicon Lattice. *Physical Review Letters*, 119(26) :266802, 2017.
- [60] N. F. Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proc. Phys. Soc. A*, 62 :416, 1949.
- [61] N. F. Mott and R Peierls. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. *Proceedings of the Physical Society*, 49 :72–73, 1937.
- [62] Yusuke Nomura, Shiro Sakai, and Ryotaro Arita. Multi-orbital cluster dynamical mean-field theory with an improved continuous-time quantum Monte Carlo algorithm. *Physical Review B*, 89(19) :195146, 2014.
- [63] Philippe Nozieres. *Theory Of Interacting Fermi Systems*. CRC Press, 1998.
- [64] H. Park, K. Haule, and G. Kotliar. Cluster dynamical mean field theory of the mott transition. *Physical Review Letters*, 101(18) :186403, 2008.
- [65] Warren E. Pickett. Electronic structure of the high-temperature oxide superconductors. *Reviews of Modern Physics*, 61(2) :433–512, 1989.
- [66] B. J. Powell and Ross H. McKenzie. Strong electronic correlations in superconducting organic charge transfer salts. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 18(45) :R827, November 2006.
- [67] Cyril Proust and Louis Taillefer. The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 10(1) :409–429, 2019.
- [68] A. Reymbaut, S. Bergeron, R. Garioud, M. Thénault, M. Charlebois, P. Sémon, and A.-M. S. Tremblay. Pseudogap, van Hove singularity, maximum in entropy, and specific heat for hole-doped Mott insulators. *Physical Review Research*, 1(2) :023015, 2019.
- [69] A. Reymbaut, M. Boulay, L. Fratino, P. Sémon, Wei Wu, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay. Mott transition and high-temperature crossovers at half-filling. *arXiv*, 2004 :02302, 2020.
- [70] D. Rost, E. V. Gorelik, F. Assaad, and N. Blümer. Momentum-dependent pseudogaps in the half-filled two-dimensional Hubbard model. *Physical Review B*, 86(15) :155109, 2012.
- [71] A. N. Rubtsov and A. I. Lichtenstein. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions : Beyond auxiliary field framework. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 80(1) :61–65, 2004.
- [72] Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held, and Masatoshi Imada. Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*, 85 :035102, Jan 2012.
- [73] T. Sato, K. Kitai, K. Miyagawa, M. Tamura, A. Ueda, H. Mori, and K. Kanoda. Strange metal from a frustration-driven charge order instability. *Nature Materials*, 18(3) :229–233, 2019.
- [74] Edan Scriven and B. J. Powell. Effective Coulomb interactions within BEDT-TTF dimers. *Physical Review B*, 80(20) :205107, 2009.

- [75] David Sénéchal and A.-M. S. Tremblay. Hot spots and pseudogaps for hole- and electron-doped high-temperature superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :126401, 2004.
- [76] G. Sordi, K. Haule, and A. M. S. Tremblay. Finite doping signatures of the mott transition in the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 104(22) :226402, Jun 2010.
- [77] G. Sordi, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay. Mott physics and first-order transition between two metals in the normal-state phase diagram of the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B*, 84(7) :075161, Aug 2011.
- [78] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay. Pseudogap temperature as a widom line in doped mott insulators. *Scientific Reports*, 2 :547, July 2012.
- [79] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay. Strong coupling superconductivity, pseudogap, and mott transition. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :216401, May 2012.
- [80] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule, and A.-M. S. Tremblay. c -axis resistivity, pseudogap, superconductivity, and widom line in doped mott insulators. *Phys. Rev. B*, 87 :041101, Jan 2013.
- [81] Aaron Szasz and Johannes Motruk. Phase diagram of the anisotropic triangular lattice Hubbard model. *Physical Review B*, 103(23) :235132, 2021.
- [82] P. Sémon, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay. Ergodicity of the hybridization-expansion Monte Carlo algorithm for broken-symmetry states. *Physical Review B*, 89(16) :165113, 2014.
- [83] Louis Taillefer. Scattering and Pairing in Cuprate Superconductors. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 1(1) :51–70, 2010.
- [84] Leticia Tarruell and Laurent Sanchez-Palencia. Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices. *Comptes Rendus Physique*, 19(6) :365–393, September 2018.
- [85] A. M. S. Tremblay. *PHY-892 Quantum Material’s Theory, from Perturbation Theory to Dynamical-Mean Field Theory (Lecture Notes)*. unpublished, 2021.
- [86] A. M. S. Tremblay, B. Kyung, and D. Sénéchal. Pseudogap and high-temperature superconductivity from weak to strong coupling. Towards a quantitative theory. *Low Temp. Phys.*, 32(4-5) :424–451, 2006.
- [87] Matthias Troyer and Uwe-Jens Wiese. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations. *Physical Review Letters*, 94(17) :170201, 2005.
- [88] Y. M. Vilk. Shadow features and shadow bands in the paramagnetic state of cuprate superconductors. *Phys. Rev. B*, 55(6) :3870–3875, Feb 1997.
- [89] J. Vučičević, H. Terletska, D. Tanasković, and V. Dobrosavljević. Finite-temperature crossover and the quantum Widom line near the Mott transition. *Physical Review B*, 88(7) :075143, 2013.
- [90] C. Walsh, P. Sémon, D. Poulin, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay. Local entanglement entropy and mutual information across the mott transition in the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 122 :067203, Feb 2019.

- [91] C. Walsh, P. Sémon, D. Poulin, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay. Thermodynamic and information-theoretic description of the Mott transition in the two-dimensional Hubbard model. *Physical Review B*, 99(7) :075122, 2019.
- [92] Philipp Werner, Emanuel Gull, Olivier Parcollet, and Andrew J. Millis. Momentum-selective metal-insulator transition in the two-dimensional hubbard model : An 8-site dynamical cluster approximation study. *Phys. Rev. B*, 80 :045120, Jul 2009.
- [93] Philipp Werner and Andrew J. Millis. Hybridization expansion impurity solver : General formulation and application to kondo lattice and two-orbital models. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 74(15) :155107, 2006.
- [94] Philipp Werner and Andrew J. Millis. Doping-driven Mott transition in the one-band Hubbard model. *Physical Review B*, 75(8) :085108, 2007.
- [95] Wei Wu, Mathias S. Scheurer, Michel Ferrero, and Antoine Georges. Effect of Van Hove singularities in the onset of pseudogap states in Mott insulators. *Physical Review Research*, 2(3) :033067, 2020.
- [96] Hiroshi M. Yamamoto, Masaki Nakano, Masayuki Suda, Yoshihiro Iwasa, Masashi Kawasaki, and Reizo Kato. A strained organic field-effect transistor with a gate-tunable superconducting channel. *Nature Communications*, 4(1) :2379, 2013.
- [97] Yoichi Yanase, Takanobu Jujo, Takuji Nomura, Hiroaki Ikeda, Takashi Hotta, and Kosaku Yamada. Theory of superconductivity in strongly correlated electron systems. *Physics Reports*, 387(1) :1–149, 2003.
- [98] Wei-Wei Yang, Yin-Xia Li, Yin Zhong, and Hong-Gang Luo. Doping a Mott insulator in an Ising-Kondo lattice : Strange metal and Mott criticality. *Physical Review B*, 104(16) :165146, 2021.
- [99] Ryo Yoshimoto, Akihito Naito, Satoshi Yamashita, and Yasuhiro Nakazawa. Antiferromagnetic fluctuations and proton Schottky heat capacity in doped organic conductor κ -(BEDT-TTF)₄Hg_{2.78}Cl₈. *Physica B : Condensed Matter*, 427 :1–4, 2013.

Chapitre S

Appendices

S.1 Modèle d'Hubbard sans interactions

Résolvons le modèle d'Hubbard dans le cas où il n'y a pas d'interactions ($U = 0$) pour le réseau triangulaire à base carrée, triangulaire à base triangulaire et carré de la figure.

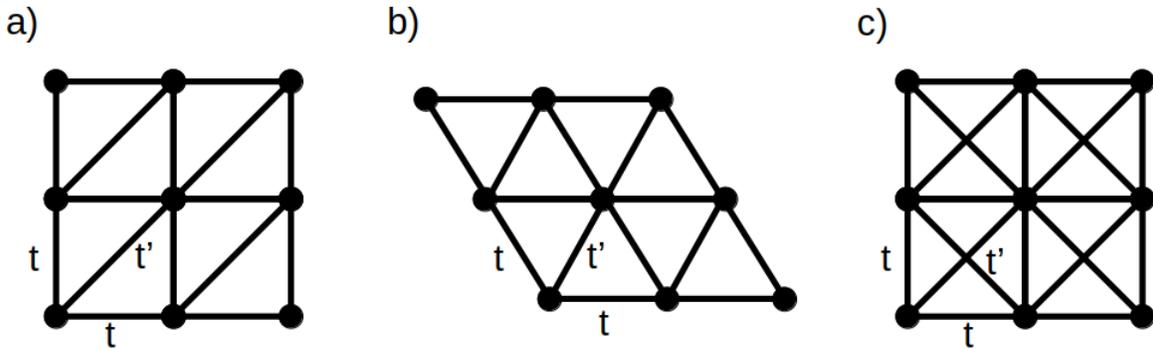


FIGURE S.1 – a) Réseau triangulaire à base carrée b) Réseau triangulaire à base triangulaire, c) Réseau carré frustré

Nous démarrons donc à partir de la forme suivante :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t' c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \quad (\text{S.1})$$

où t'_{ij} est le terme de saut au deuxième voisin. Le spin σ n'aura pas d'influence sur le résultat final si ce n'est qu'il y aura 2 états différents possible, un avec le spin up et l'autre avec le spin down.

Triangle Anisotrope Le réseau à la figure S.1 a) montre l'exemple du réseau triangulaire anisotrope que nous allons résoudre. L'Hamiltonien de l'équation (S.1) n'est pas diagonal

tant que nous ne ferons pas une transformée de Fourier. Ainsi :

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}'}$$

qu'on peut alors insérer dans l'équation (S.1) :

$$\begin{aligned} H &= - \left(\sum_{\langle i,j \rangle} t \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}'} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} t' \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}'} \right. \\ &\quad \left. - \mu \sum_i \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'} \right) \\ &= -\frac{1}{N} \left(\sum_{\langle i,j \rangle, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}'} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t' e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}'} - \mu \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'} \right) \end{aligned}$$

Pour continuer le calcul, il est nécessaire de considérer que $\mathbf{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}$. Aussi, nous donnons la valeur que doit prendre \mathbf{r}_j par la forme que prend le réseau triangulaire anisotrope. Pour un saut au premier voisin, \mathbf{r}_j peut être

$$\mathbf{r}_i + \hat{x} \qquad \mathbf{r}_i + \hat{y} \qquad \mathbf{r}_i - \hat{x} \qquad \mathbf{r}_i - \hat{y}$$

Pour un saut au second voisin, c'est plutôt :

$$\mathbf{r}_i + \hat{x} + \hat{y} \qquad \mathbf{r}_i - \hat{x} - \hat{y}$$

On peut alors insérer le tout dans les exponentielles :

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{N} \left(\sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_i + \hat{x})} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_i + \hat{y})} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_i - \hat{x})} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_i - \hat{y})} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t' \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_i + \hat{x} + \hat{y})} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_i - \hat{x} - \hat{y})} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} - \mu \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'} \right) \\ &= -\frac{1}{N} \left(\sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_i} \left(e^{-ik_x} + e^{-ik_y} + e^{ik_x} + e^{ik_y} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t' e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_i} \left(e^{-i(k_x + k_y)} + e^{i(k_x + k_y)} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} - \mu \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \right) \\ &= -\frac{1}{N} \left(\sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(e^{-ik_x} + e^{-ik_y} + e^{ik_x} + e^{ik_y} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} + \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t' \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(e^{-i(k_x + k_y)} + e^{i(k_x + k_y)} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} - \dots \right) \\ &= -\sum_{\mathbf{k}} \left(t \left(e^{-ik_x} + e^{-ik_y} + e^{ik_x} + e^{ik_y} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + t' \left(e^{-i(k_x + k_y)} + e^{i(k_x + k_y)} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} - \dots \right) \\ &= -2 \sum_{\mathbf{k}} \left(t \left(\cos(k_x) + \cos(k_y) \right) + t' \cos(k_x + k_y) - \mu/2 \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

Nous avons donc un Hamiltonien diagonale et on peut facilement en ressortir l'énergie selon le vecteur d'onde.

Triangle Le réseau à la figure S.1 b) montre l'exemple du réseau triangulaire. Par rapport à section précédente, ce qui change sont les vecteurs de translation du réseau. Ainsi, r_j est donné par :

$$\mathbf{r}_i + \hat{x} \quad \mathbf{r}_i + \left(-\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \quad \mathbf{r}_i - \hat{x} \quad \mathbf{r}_i + \left(\frac{1}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right)$$

Pour un saut au second voisin, c'est plutôt :

$$\mathbf{r}_i + \left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) \quad \mathbf{r}_i - \left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right)$$

Nous pouvons alors insérer le tout dans les exponentielles :

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{N} \left(\sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i+\hat{x})} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i-\frac{1}{2}\hat{x}+\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y})} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i-\hat{x})} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i+\frac{1}{2}\hat{x}-\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y})} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} t' \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i+\frac{1}{2}\hat{x}+\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y})} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i-\frac{1}{2}\hat{x}-\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y})} \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} + \mu \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} \left(-t \left(e^{-ik_x} + e^{-i\left(-\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)} + e^{ik_x} + e^{-i\left(\frac{1}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)} \right) \right. \\ &\quad \left. - t' \left(e^{-i\left(\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)} + e^{i\left(\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)} \right) - \mu \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} \\ &= \left(-2t \left(\cos k_x + \cos \left(\frac{1}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y \right) \right) - 2t' \cos \left(\frac{1}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y \right) - \mu \right) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

Nous avons donc un Hamiltonien diagonale et on peut facilement en ressortir l'énergie selon le vecteur d'onde.

De la même façon que précédemment, nous pouvons trouver le Hamiltonien pour le réseau de la figure S.1 c). Le résultat est le suivant :

$$E(\mathbf{k}) = -2 \left(t \left(\cos(k_x) + \cos(k_y) \right) + t' \left(\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y) \right) \right)$$

S.2 Transformation particule-trou

Transformation particule-trou

Pour tous réseaux bipartites, il est possible de déduire une relation de transformation particule-trou. Pour avoir un réseau bipartite, il est nécessaire de pouvoir diviser le réseau en deux sous-réseaux comme sur la Fig. S.2, lesquels s'échangent des particules.

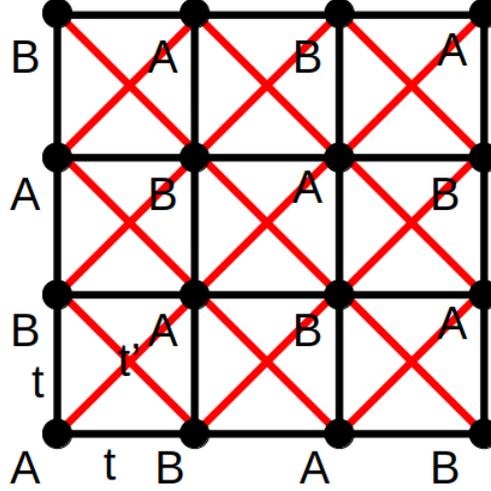


FIGURE S.2 – Division d'un réseau principal de dimension infini en deux sous-réseaux, A et B. La même chose pourrait être faite pour un réseau triangulaire anisotrope. Les lignes noires sont les échanges de particules dans des sous-réseaux différents et les lignes rouges sont les échanges à l'intérieur de mêmes sous-réseaux.

Transformation du Hamiltonien Le Hamiltonien sur lequel nous ferons la transformation particule-trou est celui de l'équation (4.1), sauf que nous allons considérer un terme de saut au premier et au deuxième voisin. Ainsi,

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t' c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \quad (\text{S.2})$$

Pour y faire la transformation particule-trou, nous ferons :

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^\dagger &\rightarrow d_{i,-\sigma} (-1)^l \\ c_{i,\sigma} &\rightarrow d_{i,-\sigma}^\dagger (-1)^l \end{aligned}$$

où l est l'indice du sous-réseau correspondant ; un saut sur un sous-réseau différent amène un signe négatif. On a alors :

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t d_{i,-\sigma} d_{j,-\sigma}^\dagger - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t' d_{i,-\sigma} d_{j,-\sigma}^\dagger + U \sum_i d_{i,\downarrow} d_{i,\downarrow}^\dagger d_{i,\uparrow} d_{i,\uparrow}^\dagger - \mu \sum_{i\sigma} d_{i,-\sigma} d_{i,-\sigma}^\dagger$$

Puisque la sommation du terme de saut est en partie sur le spin, on peut alors y enlever le signe négatif du spin. À partir d'ici, nous avons de la relation d'anti-commutation pour résoudre le reste du problème :

$$\{d_{i,\sigma}, d_{j,\sigma}^\dagger\} = d_{i,\sigma}d_{j,\sigma}^\dagger + d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} = \delta_{ij}$$

Ainsi, nous pouvons utiliser cette relation pour pouvoir obtenir une équation de la forme de l'équation (2.23) :

$$\begin{aligned} H &= - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t' d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U \sum_i (1 - d_{i,\downarrow}^\dagger d_{i,\downarrow})(1 - d_{i,\uparrow}^\dagger d_{i,\uparrow}) - \mu \sum_{i\sigma} (1 - d_{i,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma}) \\ &= - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t' d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + UN - U \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} + U \sum_i D_{i,\downarrow} D_{i,\uparrow} - 2\mu N + \mu \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} \\ &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} - (-t') \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U \sum_i D_{i,\downarrow} D_{i,\uparrow} - (U - \mu) \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} \end{aligned} \quad (\text{S.3})$$

$$= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} - t'' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U \sum_i D_{i,\downarrow} D_{i,\uparrow} - \mu' \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} \quad (\text{S.4})$$

où N est le nombre de sites, $D_{i,\sigma}$ est le nombre de trous de spin σ au site i et où la constante en trop a été enlevé puisque l'énergie est définie à une constante près. Il sera intéressant pour de futures comparaisons de vérifier comment n_i est changé par la transformation particule trou :

$$\begin{aligned} n_i &= n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} \\ &= (1 - D_{i,\downarrow}) + (1 - D_{i,\uparrow}) \\ &= 2 - D_i \end{aligned}$$

Il sera aussi intéressant de regarder comment on trouve la double occupation des trous à partir de celle des électrons :

$$\begin{aligned} D_h &= \underbrace{1 - D_e}_{\text{nombre de sites avec 1 ou 0 électron}} - \underbrace{(n_e - 2D_e)}_{\text{nombre d'électrons sans compagnons}} \\ D_h &= 1 - n_e + D_e \end{aligned} \quad (\text{S.5})$$

avec n_e le nombre d'électrons par site, D_e la proportion du nombre de site ayant deux électrons et D_h la proportion du nombre de sites ayant deux trous.

L'énergie étant définie à une constante près, on peut trouver les correspondances entre les équations (S.2) et (S.4) :

$$\begin{aligned} t'' &= -t' \\ \mu' &= U - \mu \\ D &= 2 - n. \end{aligned} \quad (\text{S.6})$$

En représentant notre Hamiltonien dans l'espace réciproque, on peut facilement trouver que le signe de t et t' impliquent aussi $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K} + (\pi, \pi)$.

Transformation particule-trou de la fonction de Green

La définition même de la fonction de Green dans le réseau réciproque est la suivante :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\tau, \tau') = -\langle \hat{T}_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(\tau') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}$$

Avec $c_{\mathbf{k}}^{(\dagger)}(\tau) = e^{\hat{\mathcal{H}}\tau} c_{\mathbf{k}}^{(\dagger)} e^{-\hat{\mathcal{H}}\tau}$ En y appliquant une transformée de Fourier, on peut avoir notre fonction de Green en fonction des fréquences :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) = -\int_0^\beta e^{i\omega_n\tau} \langle \hat{T}_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(\tau') \rangle d\tau$$

On y applique la transformation particule-trou $c_{\mathbf{k}}(\tau) \rightarrow d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau)$ et $c_{\mathbf{k}'}^\dagger(\tau) \rightarrow d_{\mathbf{k}'}(\tau)$:

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) = -\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{i\omega_n(\tau-\tau')} \langle \hat{T}_\tau d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) d_{\mathbf{k}'}(\tau') \rangle d\tau$$

À partir de là, on peut utiliser la technique du double complexe conjugué pour trouver le résultat :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) &= \left(\left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{i\omega_n(\tau-\tau')} \langle \hat{T}_\tau d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) d_{\mathbf{k}'}(\tau') \rangle d\tau \right)^\dagger \right)^\dagger \\ &= \left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \left(\langle \hat{T}_\tau d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) d_{\mathbf{k}'}(\tau') \rangle \right)^\dagger d\tau \right)^\dagger \\ &= \left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \left(\langle \Theta(\tau-\tau') d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) d_{\mathbf{k}'}(\tau') - \Theta(\tau'-\tau) d_{\mathbf{k}'}(\tau') d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \rangle \right)^\dagger d\tau \right)^\dagger \\ &= \left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \langle \Theta(\tau-\tau') (d_{\mathbf{k}'}(\tau'))^\dagger (d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau))^\dagger - \Theta(\tau'-\tau) (d_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau))^\dagger (d_{\mathbf{k}'}(\tau'))^\dagger \rangle d\tau \right)^\dagger \end{aligned}$$

dû à la définition de $c_{\mathbf{k}}^{(\dagger)}(\tau)$ donnée plus haut, $(c_{\mathbf{k}}(\tau))^\dagger = c_{\mathbf{k}}^\dagger(-\tau)$ et $(c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau))^\dagger = c_{\mathbf{k}}(-\tau)$. On a alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) &= \left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \langle \Theta(\tau-\tau') d_{\mathbf{k}'}^\dagger(-\tau') d_{\mathbf{k}}(-\tau) - \Theta(\tau'-\tau) d_{\mathbf{k}}(-\tau) d_{\mathbf{k}'}^\dagger(-\tau') \rangle d\tau \right)^\dagger \\ &= \left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}'}^\dagger(-\tau') d_{\mathbf{k}}(-\tau) \rangle d\tau \right)^\dagger \\ &= -\left(-\int_{\tau'}^{\beta+\tau'} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}}(-\tau) d_{\mathbf{k}'}^\dagger(-\tau') \rangle d\tau \right)^\dagger \end{aligned}$$

Nous faisons le changement de variable $\tau \rightarrow -\tau$ et nous utilisons l'invariance sous translation en temps imaginaire pour poser $\tau' = 0$:

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) &= \left(- \int_0^{-\beta} e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}}(\tau) d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle d\tau \right)^\dagger \\ &= - \left(- \int_{-\beta}^0 e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}}(\tau) d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle d\tau \right)^\dagger\end{aligned}$$

puis $\tau \rightarrow \tau - \beta$

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) &= - \left(- \int_0^\beta e^{i\omega_n(\tau-\beta)} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}}(\tau - \beta) d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle d\tau \right)^\dagger \\ &= - \left(- \int_0^\beta e^{i\omega_n\tau} e^{-i\omega_n\beta} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}}(\tau - \beta) d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle d\tau \right)^\dagger \\ &= - \left(- \int_0^\beta e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau d_{\mathbf{k}}(\tau) d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle d\tau \right)^\dagger\end{aligned}$$

où la dernière opération a été possible parce que la fonction de Green est antipériodique sur β et que $\omega_n\beta = (2n+1)\pi$. Il est alors très intéressant de noter qu'on peut identifier la fonction de Green pour la transformation particule-trou $\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\text{p-t}}$ et finalement écrire :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(i\omega_n) = -(\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\text{p-t}}(i\omega_n))^\dagger$$

Transformation particule-trou de la fonction spectrale À partir du résultat précédent, on peut facilement trouver l'impact de la transformation particule-trou sur la fonction spectrale $A_{\mathbf{k}}(\omega)$. La fonction de Green en fréquence de Matsubara est reliée à la fonction spectrale $A_{\mathbf{k}}(\omega)$ (un nombre réel lorsque $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$) ainsi :

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\mathbf{k}}(\omega) d\omega}{i\omega_n - \omega 2\pi}$$

et la transformation particule-trou amène alors à :

$$\begin{aligned}-(G_{\mathbf{k}}(i\omega_n))^* &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\mathbf{k}}(\omega) d\omega}{+i\omega_n + \omega 2\pi} \\ &= - \int_{\infty}^{-\infty} \frac{A_{\mathbf{k}}(-\omega) d\omega}{i\omega_n - \omega 2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_{\mathbf{k}}(-\omega) d\omega}{i\omega_n - \omega 2\pi}\end{aligned}$$

La fonction spectrale, sous la transformation particule-trou, devient donc $A_{\mathbf{k}}(\omega) \rightarrow A_{\mathbf{k}}(-\omega)$.

Symétrie particule-trou pour $t' = 0$ De la transformation [S.6](#), il est possible de déduire la valeur de μ pour laquelle nous obtenons le demi-remplissage si $t' = 0$. Les Hamiltoniens des équations [\(2.23\)](#) et [\(S.4\)](#) devraient être égaux dans ce cas particulier, donc :

$$\begin{aligned}
0 = H - H &= \left(-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma} + U \sum_i D_{i,\downarrow} D_{i,\uparrow} - (U - \mu) \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} \right) \\
&\quad - \left(- \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \right) \\
&= -(U - \mu) \sum_{i\sigma} D_{i,\sigma} + \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \\
&= 2\mu - U
\end{aligned}$$

On a alors que le demi remplissage, où le nombre de trous est égal au nombre d'électrons, se trouve toujours à $\mu = U/2$ pour les réseaux carrés. Cette particularité nous amène à regarder les transformations à l'équation [\(S.6\)](#) et constater l'apparition d'une symétrie particule-trou puisque t' est nul.

S.3 Bipartité

Tout réseaux infini carré est bipartite, ce qui conduit à certaines symétries fondamentales tel que la symétrie au demi remplissage et la symétrie particule-trou. La première dit que lorsque $U/2 = \mu$, alors $n = 1$. La seconde montre que la transformation $n \rightarrow 2 - n$ et $\mu \rightarrow U - \mu$ pour le réseau dopé aux particules est exactement égale à celle du réseau dopé aux trous.

Lorsque le réseau est frustré, cette symétrie ne tient plus, mais une transformation particule-trou est tout de même possible. Le réseau triangulaire infini peut être divisé en deux sous-réseaux, tout comme le réseau carré, t étant le terme de saut reliant les deux sous-réseaux et t' étant le terme de saut intra-sous-réseau. De tels réseaux conduisent aux énoncés suivants :

1. si nous changeons $t' \rightarrow -t'$, il s'ensuit que $n \rightarrow 2 - n$, $\mu \rightarrow U - \mu$ et $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K} + (\pi, \pi)$.
2. si nous changeons $t \rightarrow -t$, il s'ensuit que $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K} + (\pi, \pi)$.

Pour chacune de nos divisions de la zone de Brillouin à la figure 4.1 et en utilisant $t' = 0$, nous avons vérifié si la symétrie au demi-remplissage était respectée, mais l'amas $N_c = 6^*$ ne présentait pas une telle symétrie. En effet, dans la phase métallique avec $t' = 0$, $\beta = 20$, $U = 5.25$ et $\mu = 2.625$, le remplissage était de 0.995, il est alors intéressant de savoir dans quelle mesure le réseau non-bipartite diffère de la réalité.

Regardons alors comment ils se comparent les uns aux autres, ce qui est fait sur la figure S.3. Nous constatons tout d'abord qu'à travers la transformation de la particule en trou, le réseau non bipartite ne présente aucune symétrie. Les deux courbes sont relativement proches l'une de l'autre, mais la pente à faible dopage est très différente. Ainsi, on en comprend que le réseau non-bipartite peut révéler des effets intéressants, mais il ne devrait pas être le réseau sur lequel on se fit pour des résultats.

En poussant plus loin l'analyse, nous avons trouvé certaines symétries également présentes dans le réseau non bipartite. Nous pouvons réaliser une transformation en trou de particule en changeant le signe de t et t' , quelle que soit la valeur. Nous avons observé que, si $t \cdot t' > 0$, alors le problème de signe est bien meilleur, un aspect pour lequel nous n'avons trouvé aucune explication. En effet, si $t \cdot t' < 0$, le signe est approximativement divisé par 2, ce qui rend tout calcul très difficile. Dans cet article, nous avons donc choisi la première convention pour les signes de t et t' .

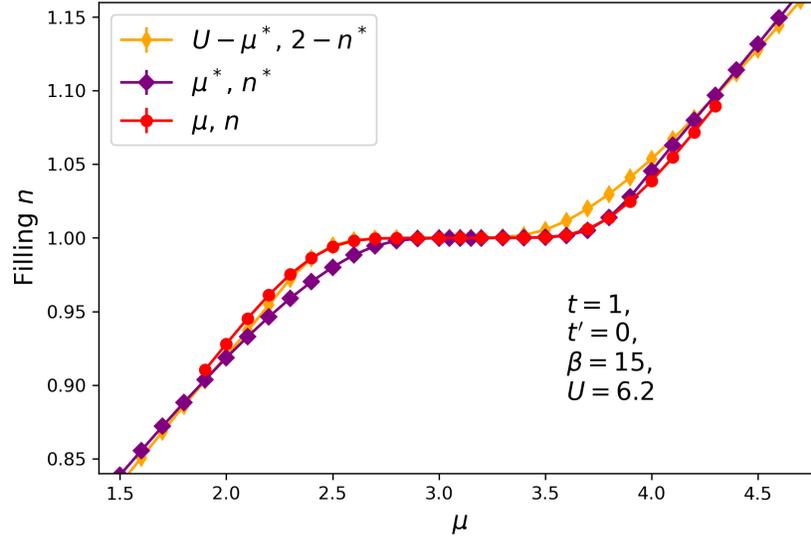


FIGURE S.3 – Effet de la non-bipartiticité sur un réseau avec $t' = 0$. On y voit 3 courbes, en cercles rouges, c'est l'amas bipartite $N_c = 6$, pour le gros losange mauve, c'est l'amas non-bipartite $N_c = 6^*$, et la courbe avec de petits losanges orangés, c'est l'amas $N_c = 6^*$, auquel on applique la transformation particule-trou.

S.4 Bistabilité

Alors que nous calculions dans la zone de coexistence du **MI** avec le **cFL**, nous avons rencontré une zone où deux solutions étaient en alternance, ce qui est un comportement typique d'une suite logistique avec des valeurs extrêmes. Cela semblait rendre la solution de l'isolant dans la plage $U_{c1} < U < U_{c3}$ extrêmement instable.

Pour comprendre U_{c3} , nous pouvons examiner de plus près ce qui se passe dans la région $U_{c1} < U < U_{c3}$ avec la figure S.4. En a), nous pouvons voir que la phase bistable est vraiment une caractéristique au fil des itérations et qu'elle affecte fortement la double occupation. Dans les calculs, on peut donner un poids aux parties imaginaires et réelles de la fonction d'hybridation aux dernières itérations, changer le poids n'a rien changé à l'écart de bistabilité. Sur la figure S.4 b), sachant que la suite analytique de la fonction de Green est généralement entachée d'erreurs, le DOS nous indique qu'il devrait y avoir peu ou pas de différences entre les parités, ce qui n'a donc pas d'importance et ne remet pas en question nos résultats en dehors de cette région.

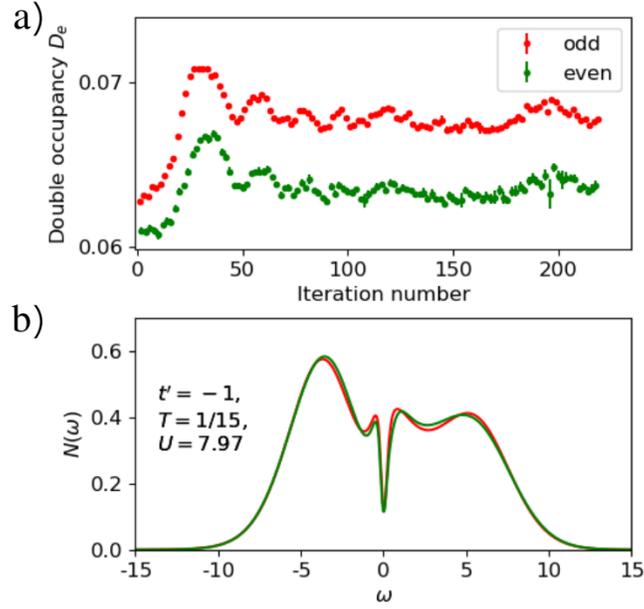


FIGURE S.4 – a) double occupation en fonction du nombre d’itérations à $U = 7.97$. Les différentes couleurs donnent la parité de chaque itération. Les barres d’erreur représentent l’erreur Monte-Carlo. b) Densité d’état des deux solutions alternées du panneau de gauche. Ce calcul a été effectué en utilisant l’algorithme de continuation analytique de la référence [6]. Les mêmes couleurs sont utilisées pour les deux figures.

S.5 Diagrammes de phase décortiqués

Ici, nous décortiquons en plusieurs graphiques $n(\mu)$ les diagrammes de la section 5.2.3 afin d’en faciliter leur compréhension. C’est fait sur les figures S.5 et S.6

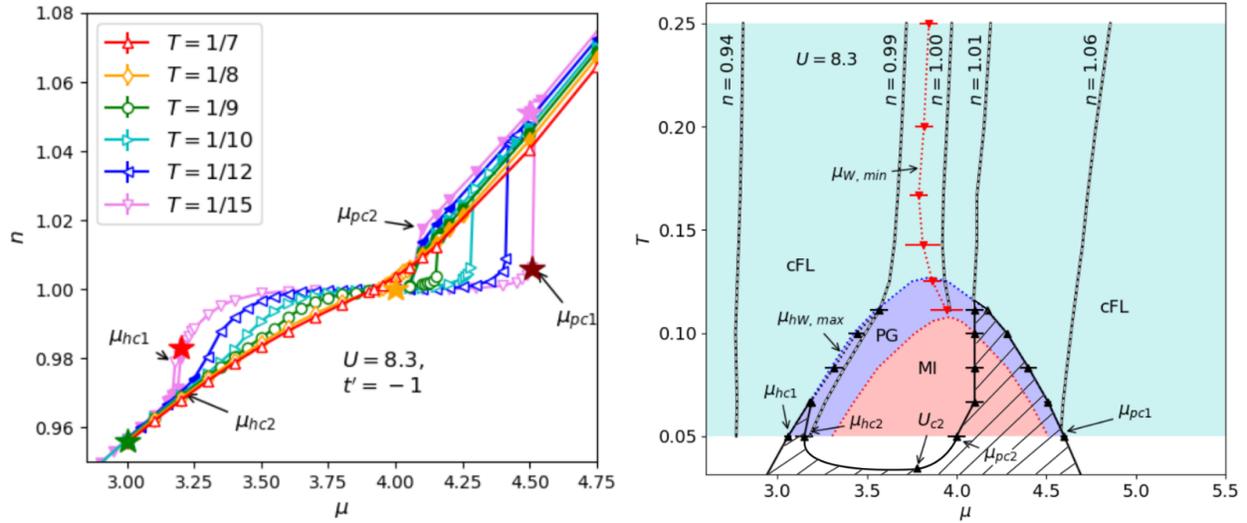


FIGURE S.5 – Comprendre le diagramme de phase $T - \mu$. à gauche, nous avons les graphiques $n(\mu)$ à différentes températures avec des transitions et phénomènes qu'on peut résumer sur la figure de droite.

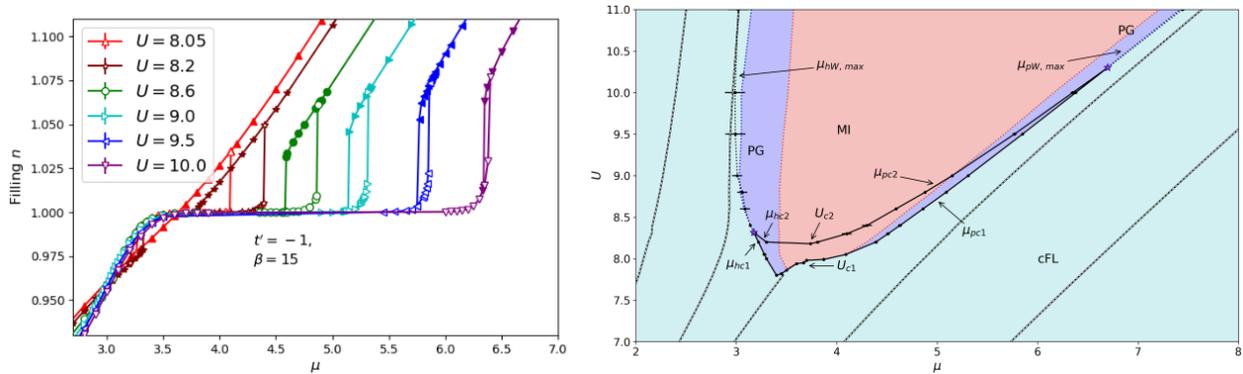


FIGURE S.6 – Comprendre le diagramme de phase $U - \mu$. à gauche, nous avons les graphiques $n(\mu)$ à différentes valeur d'interaction avec des transitions et phénomènes qu'on peut résumer sur la figure de droite.

S.6 Code de démarrage des calculs avec CTMO

Pour démarrer le calcul d'un point sur un ordinateur de Calcul Canada à l'aide du programme **CTMO** de Charles-David Hébert, on a besoin de plusieurs fichiers. D'abord, il faut forcément les fichiers `params1.json`, `hybUp1.dat` et `ctmo_dca`. Si le programme `SCCM` est utilisé, il faut aussi avoir le fichier d'options `option.json`. Pour démarrer n'importe quel calcul, il faut aussi un fichier de démarrage, pour lequel le nom n'a pas d'importance. Le programme `bash` est le suivant :

```
#!/bin/bash
#SBATCH --time=7-00:00:00
#SBATCH --mem-per-cpu=4000M
```

```

#SBATCH --ntasks=64
#SBATCH --account=def-tremblay
#SBATCH --job-name="n0.75,U7,b50"

module purge
module load StdEnv/2020
module load gcc boost armadillo boost-mpi cmake

if [ -a logfile ]
  then rm logfile
fi
rm tktilde*.arma tloc*.arma hybFM*.arma config*.dat

### prepare simple script to be executed with srun
cat > simple.sh <<EOF
ITER=10
ITERMAX=100
myExe=./ctmo_dca

while [ \${ITER} -le \${ITERMAX} ]
do
  if [ 0 -eq "\${SLURM_PROCID}" ];
  then
    echo begin iteration \${ITER} at: \`date\` >> logfile

    declare -a NOW
    NOW=\$(date)
    jq '.information.last_update = "'"\${NOW}"'"' option.json > tmp.\${ITER}.json
  fi
  wait

  \${myExe} params\${ITER}.json

  sleep 30
  if [ 0 -eq "\${SLURM_PROCID}" ];
  then
    echo end iteration \${ITER} at: \`date\` >> logfile
  fi

  ITER=\$[\${ITER}+1]
  wait
done

```

EOF

```
chmod u+x simple.sh
```

```
srunc bash ./simple.sh > combined.txt
```

S.7 Fichier de paramètre pour CTMO

Pour effectuer les calculs de CTMO, il est important d'avoir le fichier `params1.json` en main. Voici un exemple de celui-ci

```
{
  "logging": {
    "file": "ctmo_log.log",
    "level": "debug",
    "logToFile": false
  },
  "model": {
    "J_H": 0.0,
    "U": 7.4,
    "UPrime": 0.0,
    "beta": 15.0,
    "cluster": {
      "Nx": 3,
      "Ny": 2,
      "Nz": 1
    },
    "delta": 0.01,
    "gPhonon": 0.0,
    "hybUpFile": "hybUp1.dat",
    "modelFile": "DCA_T_3x2_bipartite.model",
    "mu": 5.5,
    "nOrb": 1,
    "nkpts": 349,
    "w0Phonon": 0.0,
    "tParameters": {
      "00": {
        "t2x": 0.0,
        "t2y": 0.0,
        "t2z": 0.0,
        "t3": 0.0,
        "tIntra": 0.0,
        "tx": -1.0,
        "tx=-y": 0.0,

```

```

        "tx=-z ": 0.0,
        "tx=y ": 1.0,
        "tx=z ": 0.0,
        "ty ": -1.0,
        "ty=-z ": 0.0,
        "ty=z ": 0.0,
        "tz ": 0.0
    }
},
"RSites ": {
    "0": [
        0,
        0,
        0
    ],
    "1": [
        1,
        0,
        0
    ],
    "2": [
        2,
        0,
        0
    ],
    "3": [
        0,
        1,
        0
    ],
    "4": [
        1,
        1,
        0
    ],
    "5": [
        2,
        1,
        0
    ]
},
"KWaveVectors ": {
    "0": [
        0,
        0,

```

```

        0
      ],
      "1": [
        0.3333333,
        0,
        0
      ],
      "2": [
        0.6666667,
        0,
        0
      ],
      "3": [
        0.1666667,
        0.5,
        0
      ],
      "4": [
        0.5,
        0.5,
        0
      ],
      "5": [
        0.8333333,
        0.5,
        0
      ]
    ]
  },
  "monteCarlo": {
    "measurementTime": 35,
    "seed": 774462477,
    "thermFromConfig": false,
    "thermalizationTime": 3
  },
  "selfCon": {
    "eCutSelfCon": 200,
    "weightsI": 0.2,
    "weightsR": 0.2
  },
  "solver": {
    "S": 5.0,
    "averageOrbitals": true,
    "cleanUpdate": 10000,
    "eCutGreen": 100,

```

```

    "isOrbitalDiagonal": true ,
    "n_tau_sampling": 5,
    "ntau": 5000,
    "updatesMeas": 200,
    "isOneOrbitalOptimized": true
  }
}

```

Il n'est toutefois pas nécessaire en général de spécifier `RSites` ou `KWaveVectors` si nous avons que les vecteurs de translation du réseau réel sont en direction \hat{x} et \hat{y} .

S.8 Fenêtre de calcul et d'analyse des résultats

Pour effectuer ce mémoire, il a été important de créer une application pour démarrer les calculs, organiser les résultats et analyser les résultats, le tout, automatiquement. Le nom de l'application est SC-CTMO-CM pour Super-Computer **CTMO** Calculation Management. Cette application a deux parts principales. Une dans l'ordinateur de l'utilisateur pour afficher les graphiques, les sauvegarder, démarrer des calculs et demander des résultats au super ordinateur. Celle-ci est souvent référée par SC Access Program.

La seconde partie est séparée en deux occupations dans le super ordinateur utilisé. la première classe tous les calculs et s'occupe de communiquer avec l'utilisateur des informations importantes sur le statut de ses demandes. L'autre portion, s'occupe d'effectuer les calculs au bon endroit et à partie de la bonne itération.

Il y a plusieurs fenêtres pour l'application utilisateur. Nous les voyons aux figures S.7, S.8, S.9 et S.10.

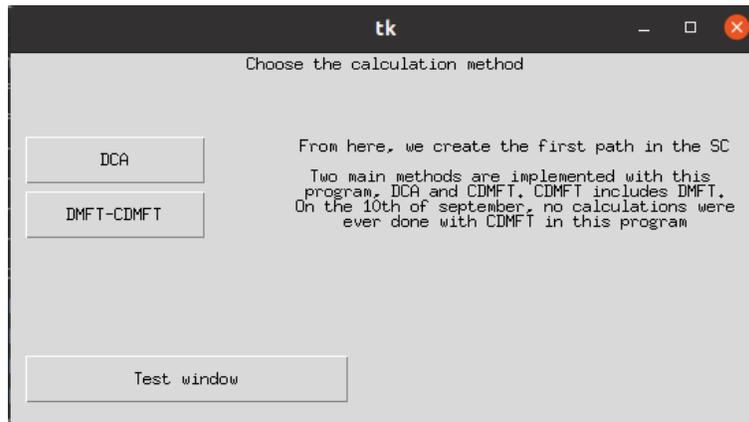


FIGURE S.7 – Fenêtre d'accueil de l'application SC Access Program.

Il y a un nombre incalculable de possibilité de graphique avec cette application. Il est possible, en choisissant l'axe des x , de choisir l'axe des y pour les observables n , D , S_z , sign, plus toutes les fonctions de Green up, Self énergie up, et Hybridation up en fréquence de Matsubara, ou à $\omega = 0$. Bref, énumérer toutes les possibilités serait assez long.

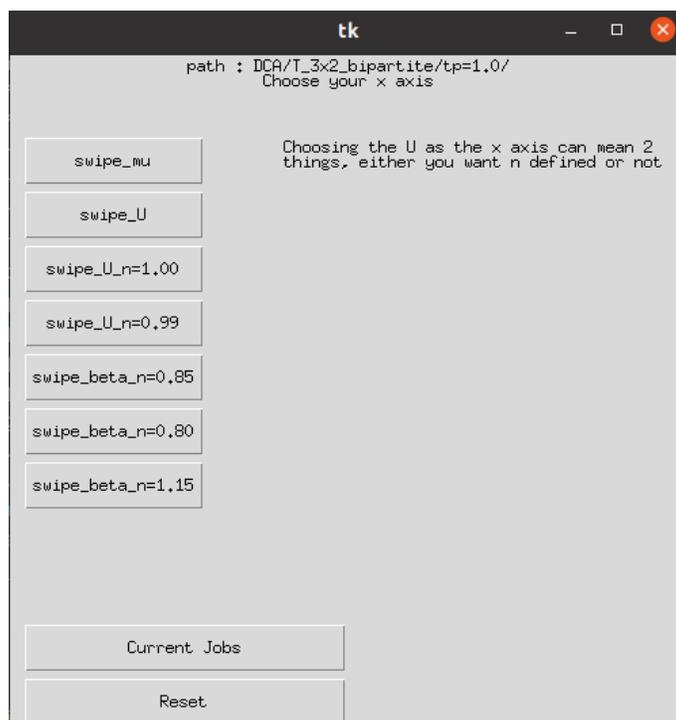


FIGURE S.8 – Exemple de fenêtre de choix de l'application SC Access Program.

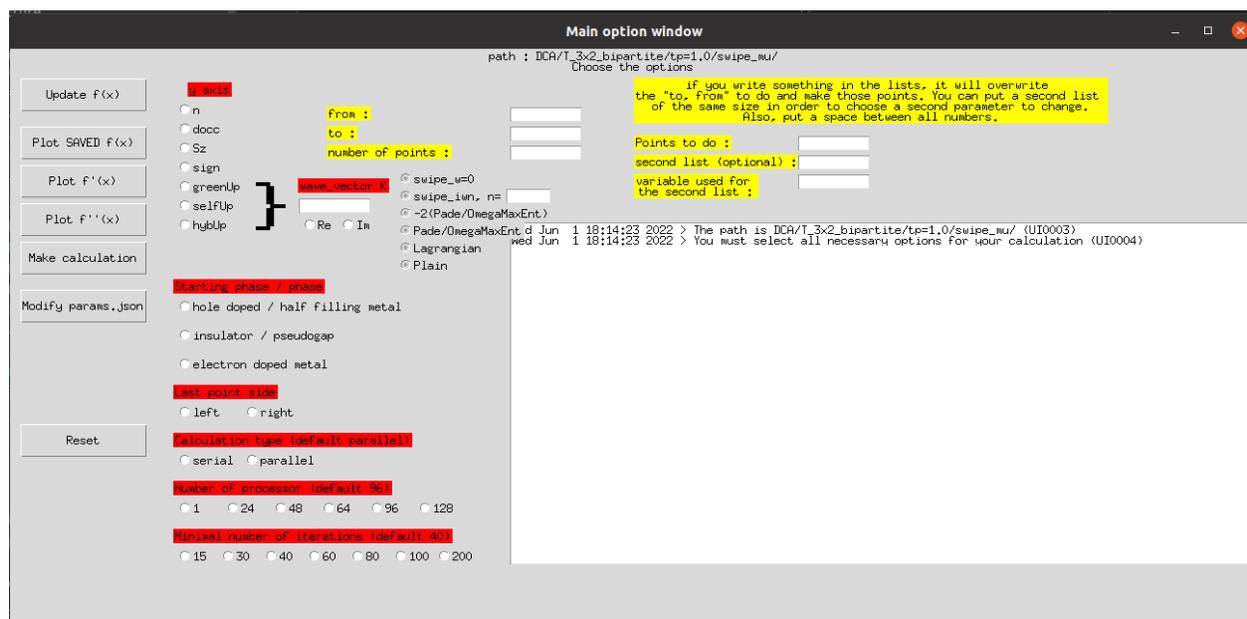


FIGURE S.9 – Fenêtre de calcul et de graphique de l'application SC Access Program.

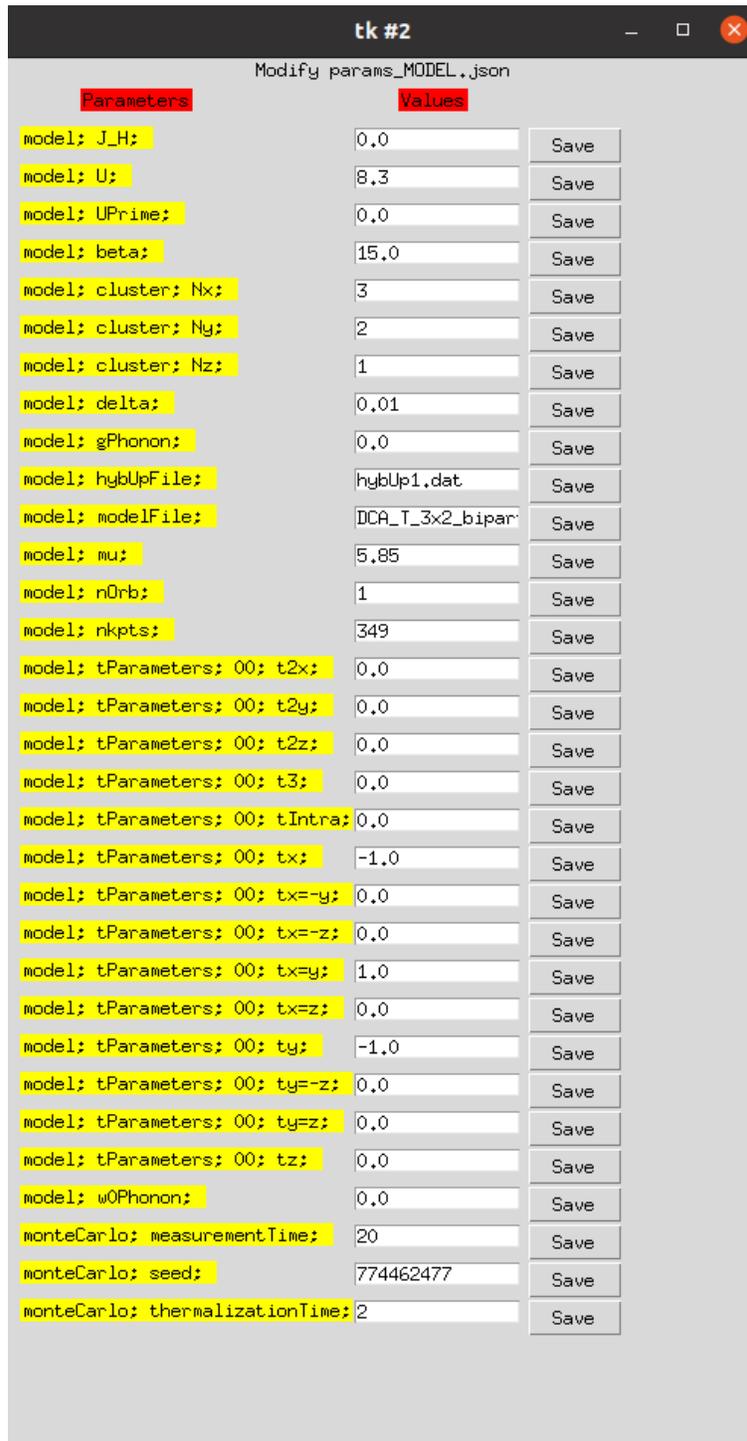


FIGURE S.10 – Fenêtre de paramètre de l'application SC Access Program.