

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche  
Scientifique



# Université A. Mira de Béjaïa

Faculté des Sciences Exactes

Département de Physique

## Mémoire de Master

en

## Physique

Option : Physique Théorique

Présenté par:

Metref Hassina

## Thème

---

Etude de systèmes  
d'électrons fortement corrélés  
par la méthode de Monte Carlo  
Quantique

---

Devant le jury composé de:

Président	M <sup>r</sup> A. Gharbi	M. C. A	U. A/Mira Béjaïa.
Examineur	M <sup>r</sup> A. Houari	M. C. B	U. A/Mira Béjaïa.
Encadreur	M <sup>r</sup> H. Zenia	M. A. B	U. A/Mira Béjaïa.

<b>1</b>	<b>Etude théorique</b>	<b>4</b>
1.1	Rappel sur la théorie des bandes d'énergie . . . . .	4
1.2	Limites de la théorie des bandes et notion d'isolants de Mott . . . . .	5
1.2.1	Limites de la théorie des bandes . . . . .	5
1.3	Electrons fortement corrélés . . . . .	6
1.4	Le modèle de Hubbard . . . . .	6
1.4.1	Cas particuliers . . . . .	8
1.5	Tentatives de résolution . . . . .	9
1.5.1	Solution exacte : les cas $d = 1$ et $d = \infty$ . . . . .	9
1.5.2	Dimension finie . . . . .	9
1.6	Difficulté de la diagonalisation exacte . . . . .	9
1.7	Méthodes de Monte Carlo . . . . .	10
1.7.1	Le Monte Carlo Classique (algorithme de Metropolis) . . . . .	10
1.7.2	Le Monte Carlo Quantique (QMC) . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Procédure de calcul</b>	<b>13</b>
2.1	Méthode du déterminant DQMC . . . . .	13
2.1.1	Décomposition de Trotter-Suzuki . . . . .	13
2.1.2	Transformation de Hubbard-Stratonovich . . . . .	14
2.1.3	Calcul de la trace . . . . .	15
2.2	Étapes du code du DQMC . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Résultats des calculs et Discussion</b>	<b>21</b>
<b>A</b>		<b>27</b>
A.1	Opérateur création et annihilation (seconde quantification) . . . . .	27
A.2	Théorie des fonctions de Green . . . . .	27
A.3	Instabilités numériques . . . . .	28
A.4	Calcul de la capacité calorifique . . . . .	30
A.5	Problème du signe . . . . .	31
A.6	Code DQMC . . . . .	31
	<b>Bibliographie</b>	<b>37</b>

---

## REMERCIEMENTS

J'adresse mes profonds remerciements à Monsieur H. ZENIA d'avoir accepté de m'encadrer pour ce mémoire de fin de cycle, de son aide et de sa disponibilité tout au long de cette période.

Je remercie les enseignants qui ont contribué à ma formation. Monsieur K. ADEL qui m'a guidée dans la partie programmation de ce mémoire.

Je tiens à remercier ma famille qui n'a jamais cessé de croire en moi et en mes aptitudes, mon frère LYES qui m'encourage chaque jour un peu plus, aussi mes amis et toutes les personnes qui m'ont aidé de près ou de loin à réaliser ce modeste travail.

---

---

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le présent travail rentre dans le cadre d'une étude théorique et une simulation numérique des systèmes fortement corrélés pour la recherche de grandeurs qui caractérisent ces systèmes de fermions (d'électrons en particulier).

On s'intéressera aux systèmes d'électrons fortement corrélés où les interactions coulombiennes entre électrons sont importantes, lesquelles sont déterminantes des propriétés électriques et magnétiques, comme la supraconductivité à haute température critique.

Un des modèles simplifiés représentant le mieux ces interactions entre fermions sur un réseau est le modèle de Hubbard. Ce modèle fait depuis des années l'objet d'études de plus en plus sophistiquées. La raison principale en est qu'il n'existe pas malgré sa simple formulation, de méthode générale pour le résoudre. Il n'existe que de rares cas où ce modèle présente une solution exacte qu'on peut obtenir de façon analytique, c'est pourquoi les simulations numériques sont devenues des outils indispensables pour sonder les propriétés de ce modèle. Les simulations sont également importantes dans bien d'autres disciplines de la physique du solide moderne.

Ainsi nous nous proposons, comme point de départ de cette étude quantitative, d'explorer le hamiltonien de Hubbard pour un système d'électrons évoluant sur un réseau à deux dimensions. A cet effet, nous nous intéresserons particulièrement à la méthode du déterminant de Monte Carlo. Dans un premier temps nous parlerons de quelques études antérieures effectuées sur les systèmes corrélés en présentant les résultats obtenus.

Dans un second temps, nous allons présenter une étude théorique basée sur le modèle de Hubbard applicable en ce qui nous concerne aux réseaux carrés. Ensuite la méthode de Monte Carlo Quantique précitée sera exploitée comme procédure de calcul pour déterminer des grandeurs physiques accessibles à l'expérience. Puis nous finaliserons ce travail par une conclusion générale sur les principaux résultats obtenus et les perspectives pouvant être envisagées dans ce domaine.

---

### 1.1 Rappel sur la théorie des bandes d'énergie

Pour des solides cristallins, la présence d'un environnement immédiat aux atomes du milieu (effet des proches voisins) à travers les nombreuses interactions (interactions électron-électron, noyau-noyau, électron-noyau) va générer une redistribution des états quantiques supérieurs (dégénérés à l'état atomique) de chacun des atomes du milieu sous l'effet d'une perte c'est à dire d'une levée de dégénérescence. Ainsi, la présence d'un grand nombre de voisins dans les solides est responsable de l'éclatement des niveaux d'énergie électroniques supérieurs jusqu'à la formation de bandes d'énergie constituant ainsi la structure de bandes. la théorie des bandes est donc une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons à l'intérieur du solide. De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles (bande de valence et bande de conduction), lesquels sont séparés par des bandes d'énergie interdites.

Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible d'expliquer au moins schématiquement

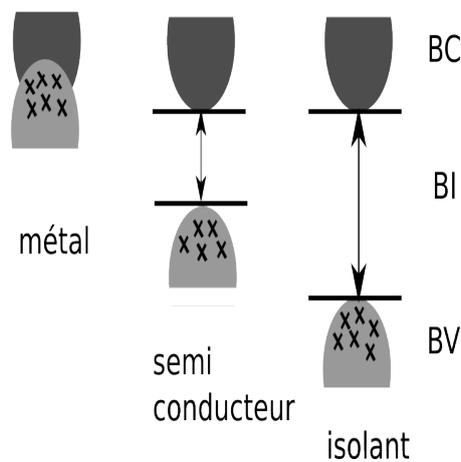


FIGURE 1.1 – Schématisation des bandes d'énergie.

les différences de comportement électrique entre un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.

Sachant qu'il y a  $2N$  états par bande pour un solide de  $N$  électrons, la théorie des bandes prédit pour un solide ayant un nombre de valence pair :

- Un caractère isolant, quand la bande de valence est entièrement remplie et la bande de conduction est vide avec un large gap entre les deux bandes.
- Un caractère semi-conducteur, lorsque la largeur de la bande interdite (gap) est faible ( $\sim 1\text{eV}$ ).
- Un caractère métallique, dans le cas où la bande de conduction est partiellement remplie.

Et pour un nombre de valence impair, elle prédit nécessairement un métal puisque au moins une bande ne serait pas remplie.

## 1.2 Limites de la théorie des bandes et notion d'isolants de Mott

### 1.2.1 Limites de la théorie des bandes

Pour certains composés la théorie des bandes, aussi sophistiquée soit-elle, s'est avérée incapable d'expliquer certaines propriétés. Dès les années 40, elle montre ses limites : elle prédit un comportement métallique pour certains oxydes de métaux de transition, alors que l'expérience nous montre que ce sont en fait des isolants, on les appelle *isolants de Mott*.

La question qui nous vient à l'esprit est de savoir quelle est l'origine de ce comportement contraire aux règles posées par la théorie des bandes.

Pour répondre à cette question, essayons de construire, pour simplifier, un cristal imaginaire dont on pourrait changer le paramètre  $a$  de la maille et où chaque maille comporte un atome qui peut avoir deux électrons au maximum.

Pour le cas d'un électron par site, la théorie des bandes prévoit un comportement métallique et les états propres sont des fonctions de Bloch délocalisées dans tout le cristal.

Le cas deux électrons par site donnerait naissance à une bande pleine, donc à un isolant quelque soit  $a$ .

L'augmentation excessive du paramètre du réseau  $a$ , aura pour effet la localisation des fonctions d'onde du système impliquant la diminution du recouvrement des orbitales (qu'on appelle  $t$ ), que se passera-t-il alors ? métal ou isolant ?

La réponse est qu'il faut bouger un électron d'un site à un autre, ce qui se traduit inévitablement pas un appariement d'électrons sur un même site. Or comme les orbitales de chaque site sont très localisées, cet appariement s'accompagne d'un coût en énergie important (qu'on appellera  $U$ ) qui provient des répulsions électrostatiques. Donc à moins de fournir cette énergie  $U$ , le système est gelé dans la configuration à un électron par site. On a donc bien une phase isolante, et le gap de cet isolant est de l'ordre de  $U$ .

#### Remarque :

Si jamais une énergie  $U$  est fournie aux électrons du cristal, les électrons peuvent se déplacer dans le cristal et la conductivité du cristal est dictée par le recouvrement  $t$  entre les orbitales plus proches voisines.

#### Exemple de systèmes physiques (*CuO* et les oxydes métalliques)

En pratique, il n'est évidemment pas possible de modifier à tel point le paramètre de maille d'un solide, même en faisant varier la pression. Très souvent, les systèmes physiques se trouvent dans l'une ou l'autre des phases isolante ou métallique et une quelconque transition de phase ne peut pas être mise en évidence.

Mais si on prend comme exemple un cristal d'oxyde de cuivre, les ions de cuivre ont des

orbitales  $d$  partiellement remplies et sont séparés par des ions d'oxygène : on observe une alternance  $Cu - O - Cu - O - Cu \dots$  dans toutes les directions du cristal. L'éloignement des atomes métalliques dont il était question plus haut est ici réalisés indirectement par les atomes d'oxygène. Cet éloignement est suffisant pour obtenir des orbitales  $d$  très localisées et donner naissance à la phase isolante de Mott. C'est d'ailleurs pour cette raison que de nombreux oxydes de métaux sont connus pour être isolants.

Donc dans ces matériaux, quand l'énergie cinétique des électrons n'est pas assez grande en comparaison avec l'énergie potentielle de Coulomb, pour deux électrons sur un même site, ces électrons ne peuvent plus se déplacer et ont tendance à se localiser. Que se passe-t-il quantitativement ? Peut-on tracer un diagramme de phase à partir de vrais paramètres physiques ? Pour cela il nous faut un modèle mathématique qui rende compte de cette compétition.

Plusieurs modèles représentatifs des systèmes de fermions fortement corrélés ont été élaborés, notamment le modèle de *Hubbard*,  $t$ - $j$  ou *Heisenberg*. Ces modèles, sensés capturer la physique de basse énergie d'un grand nombre de composés, présentent des diagrammes de phase extrêmement riches dès que l'on varie un de leurs paramètres (dimensionnalité, importance des interactions, etc). Ces modèles font depuis des années l'objet d'études de plus en plus sophistiquées. Dans notre cas on se limitera au modèle de Hubbard, qui est de loin le plus général. Mais avant on donne une brève définition des systèmes corrélés.

## 1.3 Electrons fortement corrélés

Les cours d'introduction à la physique de l'état solide couvrent quelques modèles conventionnels les mieux connus, tels que le gaz d'électrons libres et le modèle d'électrons presque libres où (décrit dans le cadre de la théorie des bandes) on néglige les interactions entre électrons. Or la forme et la taille des orbitales des atomes influent grandement sur l'importance des interactions.

Par exemple, contrairement aux orbitales  $s$  qui sont délocalisées, les orbitales de types  $d$  et  $f$  sont très localisées exhibant ainsi de très fortes corrélations, si deux électrons s'y trouve en même temps. Donc l'idée de négliger ces interactions ne peut plus être le point de départ d'une description correcte d'un solide formé d'atomes ayant ce genre d'orbitales. C'est ainsi qu'on parle de systèmes d'électrons fortement corrélés. Ces matériaux quantiques peuvent exhiber tous les états électriques de la matière : *métal*, *isolant*, *supraconducteurs etc*, l'étude de cette riche physique sous-jacente trébuche malheureusement sur la complexité de cette dernière. En effet, toutes les approches de type digrammes de Feynman ne sont plus valides car le calcul perturbatif diverge.

Parmi les systèmes corrélés les plus populaires nous citons :

- Les supraconducteurs à haute température critique (dont les mécanismes échappent encore à la compréhension des théoriciens) ou les manganites à magnétorésistance colossale qui sont des matériaux aux capacités technologiques extrêmement prometteuses.
- Les conducteurs organiques.
- Isolants de Mott.

## 1.4 Le modèle de Hubbard

En 1963, un modèle théorique est proposé par John Hubbard [21], qui cherche à expliquer les transitions de Mott (transitions métal-isolant émergeant de la compétition entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle des électrons). Si l'on choisit un hamiltonien cinétique qui

décrit bien la bande dans laquelle devrait se produire la physique qui nous intéresse<sup>1</sup> et qu'on lui adjoint une interaction de contact (partie potentielle), on arrive au modèle de Hubbard.

Le modèle de Hubbard est un modèle extrêmement simple pour décrire les interactions de fermions et les propriétés magnétiques (magnétisme itinérant). Les électrons interagissent entre eux seulement lorsqu'ils sont placés sur le même site. Dans ce cas, ils possèdent donc des spins opposés. Autrement, les électrons peuvent sauter d'un site à l'autre grâce au recouvrement des orbitales.

Par ailleurs, le modèle de Hubbard permet la description des transitions de phases entre métal et isolant. Effectivement, la compétition entre le mouvement des électrons et leur répulsion détermine le caractère électrique du matériaux en question.

En seconde quantification, l'hamiltonien de Hubbard d'un système d'électrons évoluant dans un réseau de sites, s'écrit de la forme suivante :

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V},$$

où

$\hat{K}$  et  $\hat{V}$  représente, respectivement, l'énergie cinétique et l'énergie d'interaction coulombienne intra-site, définis par :

$$\hat{K} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}),$$

et

$$\hat{V} = U \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow},$$

où :

- $i, j$  étant des indices reliés à l'espace c'est-à-dire les sites du réseau, la notation  $\langle i, j \rangle$  signifie une paire de sites proches-voisins dans le réseau, indiquant que les électrons sautent seulement vers les sites du voisinage immédiat.
- les opérateurs  $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$  et  $\hat{c}_{i\sigma}$  sont respectivement, les opérateurs de création et d'annihilation (voir annexe A.1) pour les électrons localisés sur leur  $i^{eme}$  site, avec la composante  $z$  du spin up ( $\sigma = \uparrow$ ) ou du spin down ( $\sigma = \downarrow$ ). Ces opérateurs obéissent aux relations d'anticommutation :

$$\{\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{i,j},$$

$$\{\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger\} = 0,$$

$$\{\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'}\} = 0.$$

Les états possibles d'occupation par site sont l'état vide  $|0\rangle$ , les états d'occupations simples  $|\uparrow\rangle$  et  $|\downarrow\rangle$ , ainsi que l'état de la double occupation  $|\uparrow\downarrow\rangle$  (spins opposés à cause du *principe d'exclusion de Pauli*).

- $t$  est le paramètre de saut (ou integrale de saut) pour l'énergie cinétique des électrons.<sup>2</sup>
- $U$  représente l'interaction coulombienne entre électrons occupant un même site.

---

1. Généralement on utilise une bande de conduction obtenue dans l'approximation des liaisons fortes, i.e où la conduction n'est assurée que par un léger recouvrement des orbitales atomiques en jeu.

2. Dans l'approximation des liaisons fortes [1, 2],  $t$  est déterminé par le chevauchement (recouvrement) des fonctions d'onde atomiques entre sites voisins

---

**Remarque :**

1. Une contribution de sauts aux seconds voisins  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  peut être incluse avec le terme additionnel suivant [3] :

$$\hat{K}' = -t' \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}), \quad (1.1)$$

2. Le terme  $U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$  représente l'énergie à fournir pour mettre deux électrons sur un site  $i$  et décrit la répulsion locale entre ces derniers. Ce terme est dit répulsif lorsque  $U > 0$  et attractif dans le cas contraire.

Lorsqu'on travaille avec un système en contact avec un réservoir de chaleur et de particules (ensemble grand-canonique), en plus des deux termes ( $\hat{K}$  et  $\hat{V}$ ), vient s'ajouter un terme supplémentaire  $\hat{H}_\mu$  qui fait intervenir le potentiel chimique  $\mu$  qui contrôle le remplissage du système (en d'autres termes qui contrôle la densité des électrons), avec :

$$\hat{H}_\mu = -\mu \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}), \quad (1.2)$$

et le hamiltonien total sera donc donné sous la forme :

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}), \quad (1.3)$$

3. Le hamiltonien de Hubbard s'écrit dans une manière équivalente (utile pour faire apparaître la symétrie particule-trou) :

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) - \mu \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i\sigma} + U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) \quad (1.4)$$

Le terme d'interaction de l'éq.1.3 diffère de l'éq.1.4 dans le fait que l'état demi-rempli (half-filling) du modèle (un électron par site,  $\langle n_i \rangle = 1$ ) correspond à  $\mu = 0$ , alors que pour la forme 1.4, ce même état correspond à  $\mu = \frac{U}{2}$ .

**1.4.1 Cas particuliers**

Le modèle de Hubbard est sujet à des simplifications importantes dans plusieurs limites intéressantes. La plus simple est la limite sans interactions. Si  $U = 0$ , le modèle décrit un liquide de Fermi, qui un métal dont l'énergie est  $\varepsilon_k = \sum_\alpha -2t \cos k_\alpha a$ . Si au contraire  $t = 0$ , on se trouve dans la limite atomique du modèle de Hubbard. Dans la limite atomique, les électrons ne peuvent pas se déplacer dans le cristal, et on a affaire à une collection d'atomes indépendants pouvant être vides, simplement occupés ou doublement occupés. Le système est isolant.

Si le système est au plus à moitié-rempli, et que  $U \gg t > 0$ , on peut approximer le modèle de Hubbard par le modèle- $\hat{T}$ , dans lequel toute double occupation est proscrite. En général, on raffine le modèle- $\hat{T}$  en autorisant une double occupation dans un état intermédiaire (processus virtuel). On obtient alors le modèle  $t - J$  [14], dans lequel intervient un couplage antiferromagnétique (interaction d'échange)  $J = \frac{4t^2}{U} > 0$  entre opérateurs de spin sur deux sites voisins. A demi-remplissage, le modèle  $t - J$  est équivalent au modèle de Heisenberg décrivant des spins couplés de manière antiferromagnétique dont le hamiltonien s'écrit :  $H = -J \sum_{i,j} \hat{S}_i \hat{S}_j$ , où  $\hat{S}$  est l'opérateur de spin.

## 1.5 Tentatives de résolution

### 1.5.1 Solution exacte : les cas $d = 1$ et $d = \infty$

Deux approches différentes ont permis de solutionner exactement le modèle de Hubbard, chacune dans un cas particulier. A une dimension, *Lieb et Wu* ont obtenu à partir de *l'ansatz de Bethe* différentes quantités physiques dans l'état fondamental, telles l'énergie, la fonction d'onde et le potentiel chimique [4].

Bien que cette solution soit donnée sous la forme d'équation auto-cohérente, elle peut nous fournir plusieurs résultats intéressants, tels l'absence de transition de phase métal-isolant à  $U$  fini pour une chaîne infinie.

Cependant, cette approche ne permet pas le calcul de fonctions de corrélation, ce qui limite beaucoup son intérêt. De plus, elle se limite strictement au cas unidimensionnel.

Dans l'autre cas limite, où la dimension de l'espace est infinie, la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) devient exacte. Cette approche établie une correspondance entre le réseau infini et un problème auto-cohérent d'une seule impureté couplée à un bain (modèle d'Anderson [23]) [5]. Bien que cette approche élimine les corrélations spatiales en raison de la restriction à un seul site, elle conserve les corrélations dynamiques locales.

Dans le cas où la dimension est infinie, cette méthode devient des plus pertinentes puisque les quantités physiques ne dépendent plus du vecteur d'onde. En effet, dans cette situation, le nombre de coordinations devient infini, chaque site ayant une infinité de voisins.

Cette méthode a permis entre autres de trouver la valeur critique de  $U$  où survient la transition métal-isolant.

### 1.5.2 Dimension finie

En dimension finie  $d \geq 2$ , on ne sait pas résoudre exactement le modèle de Hubbard. En revanche, de nombreuses méthodes approximatives ont été développées, entre autres les méthodes numériques.

Les méthodes numériques se rangent essentiellement en deux catégories :

- Dans les méthodes de diagonalisation exacte [6, 7, 8, 9], on utilise un ordinateur pour calculer exactement (au sens numérique) les valeurs et vecteurs propres du hamiltonien pour des systèmes finis.
- Les simulations *Monte Carlo* dans lesquelles on calcule les diverses quantités par échantillonnage aléatoire, permettant de traiter des systèmes un peu plus grands, au prix d'une erreur statistique sur les résultats.

## 1.6 Difficulté de la diagonalisation exacte

L'étude du modèle de Hubbard peut s'avérer une tâche très complexe lorsqu'on veut obtenir la moyenne thermodynamique de différentes observables.

La présence simultanée des termes cinétique et potentiel, qui ont des effets opposés sur le comportement des électrons (en mécanique quantique, on parle d'opérateurs qui ne commutent pas), rend impossible dans la plupart des cas la détermination de solutions exactes pour les diverses quantités physiques qui nous intéressent.

La structure de la matrice hamiltonienne serait simple si le hamiltonien ne contenait qu'un seul terme : celui de l'énergie cinétique, diagonalisable par transformée de Fourier (dans l'espace

réciroque), ou celui de l'énergie potentielle, diagonalisable dans l'espace des positions (perturbation autour des solutions exactes).

Lorsque les deux termes sont comparables, il n'est pas possible de faire un calcul perturbatif. Chaque site possède  $n$  états possibles, la dimension de  $H$  est de  $4^n$ , la matrice hamiltonienne est éparse, les diagonalisations exactes [4] doivent utiliser les symétries au maximum pour simplifier le problème, et il est difficile d'aller au delà de réseaux  $4 \times 4$  à cause de la croissance exponentielle du problème avec la taille du système.

Par contre, la méthode de *Monte Carlo* ne nécessite pas la mémorisation de tout l'espace des états et, de plus, le nombre d'opérations arithmétiques nécessaires à la solution n'augmente que de façon polynomiale avec la taille du réseau et l'inverse de la température.

## 1.7 Méthodes de Monte Carlo

Un nombre très grand de méthodes différentes entrent dans cette catégorie. L'amélioration et l'exactitude des résultats de Monte Carlo (MC) est non seulement possible en principe mais également dans la pratique.

Dans le sens plus large, la simulation de MC signifie n'importe quelle simulation qui utilise les nombres aléatoires dans l'algorithme de simulation. Les méthodes de MC se prêtent bien à la modélisation de processus tel la diffusion (par exemple) dans la mesure où elle possède un caractère purement stochastique.

### 1.7.1 Le Monte Carlo Classique (algorithme de Metropolis)

Considérons par exemple *le modèle d'ising* de  $N$  spins à une dimension et soit  $x$  une configuration quelconque :  $x = (\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots)$ . Le nombre de telles configurations est  $2^N$ . A partir d'une configuration initiale  $x_0$ , nous pouvons construire une trajectoire  $x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \dots$  dans l'espace de phase en renversant chaque fois un spin choisi au hasard. Après suffisamment d'étapes, toutes les configurations possibles auront été visitées et notre trajectoire aura donc parcouru la totalité de l'espace de phase. Nous pouvons donc en principe obtenir la moyenne des observables en calculant leur valeur dans chaque configuration et en la pondérant par *le facteur de Boltzman*  $e^{-\beta H(x)}$  approprié. Dans la pratique, il n'est pas possible de parcourir toutes les configurations lorsque  $N$  est grand, mais seulement un petit nombre d'entre elles. Comme presque toutes les configurations sont peu probables du point de vue thermodynamique, il est important de pouvoir sélectionner en priorité lors de notre promenade aléatoire les  $x_n$  les plus probables (avec les énergies les plus basses) qui donnent la contribution dominante à la moyenne. La démarche ci-dessus ne permet pas de le faire, puisque tous les  $x_n$  ont la même chance d'être sélectionnés. Il faut donc introduire une contrainte qui guide la trajectoire vers les "zones probables" (c'est ce qu'on appelle *the importance sampling*).

A l'équilibre thermodynamique, la probabilité que le système soit dans l'état  $x$  est  $p_{eq}(x) = e^{-\beta E(x)} / \sum_x e^{-\beta E(x)}$ . Soit  $W(x \rightarrow x')$  la probabilité de transition de l'état  $x$  à l'état  $x'$  et  $W(x' \rightarrow x)$  la probabilité de transition inverse. L'équilibre ne peut être réalisé que si le nombre de transitions de  $x$  à  $x'$ ,  $p_{eq}(x)W(x \rightarrow x')$ , est égale au nombre de transitions de  $x'$  à  $x$ ,  $p_{eq}(x')W(x' \rightarrow x)$ . En d'autres termes

$$\frac{W(x \rightarrow x')}{W(x' \rightarrow x)} = e^{-\beta[E(x')-E(x)]} = e^{-\beta\delta E} \quad (1.5)$$

Cette loi caractérise l'équilibre thermodynamique. Lors de la marche aléatoire dans l'espace de phase, nous voulons que la trajectoire parcourue ressemble à cette dynamique de l'équilibre et donc que les taux de transition  $w(x \rightarrow x')$  et  $w(x' \rightarrow x)$  résultant d'un choix aléatoire vérifient la loi (1.5). Cette condition est garantie si nous imposons la contrainte suivante : la configuration  $x_{n+1}$  construite à partir de  $x_n$  est retenue avec une probabilité

$$p = \begin{cases} \gamma e^{-\beta \delta E}, & \delta E \geq 0 \\ \gamma, & \delta E < 0 \end{cases} \quad (1.6)$$

avec  $\delta E = E(x_{n+1}) - E(x_n)$  et  $0 < \gamma \leq 1$ . C'est l'algorithme de Metropolis réf [22]. Explicitement si  $\delta E \geq 0$  (l'énergie de  $x_{n+1}$  est plus grande que celle de  $x_n$ ), on tire un nombre aléatoire  $a$  entre 0 et 1 ; si  $a < e^{-\beta \delta E}$ , la configuration  $x_{n+1}$  est retenue, autrement elle est abandonnée et un nouvel  $x_{n+1}$  est généré. Si  $\delta E < 0$ ,  $x_{n+1}$  est retenue si  $a < \gamma$  et rejetée si  $a > \gamma$ .

Comme  $\gamma > \gamma e^{-\beta \delta E}$ , nous voyons que les configurations de basses énergies seront plus facilement retenues. Pour se convaincre que l'algorithme de Metropolis vérifie la loi (1.6), il suffit de constater que les probabilités  $w(x \rightarrow x')$  et  $w(x' \rightarrow x)$  sont respectivement  $\gamma e^{-\beta \delta E}$  et  $\gamma$  si  $\delta E = [E(x_{n+1}) - E(x_n)] \geq 0$  et respectivement  $\gamma$  et  $\gamma e^{-\beta \delta E}$  si  $\delta E < 0$ .

Il est possible de démontrer que lorsque la règle (1.6) est satisfaite, la marche aléatoire permet d'obtenir la valeur moyenne des observables selon

$$\langle A \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N A(x_n) \quad (1.7)$$

avec  $A(x_n)$  la valeur de l'observable dans l'état  $x_n$ . Cette relation s'appuie sur le principe d'ergodicité, selon lequel la moyenne thermodynamique sur un ensemble statistique d'une observable est égale à sa moyenne temporelle :  $\langle A \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(x_t) dt$ .

Evidemment, la séquence des  $x_n$  retenus par l'algorithme ne correspond pas à l'évolution réelle  $x_t$  du système, seulement lorsque  $N$  et  $T$  sont très grand les moyennes temporelle et statistique sont équivalentes.

### 1.7.2 Le Monte Carlo Quantique (QMC)

L'approche non-perturbative la plus efficace pour résoudre le modèle de Hubbard est, sans doute, le QMC. Celui-ci à comme point de départ l'action formulée à partir d'une intégrale de chemin dans le temps imaginaire. Cette intégrale est ensuite décomposée en termes plus simples afin d'obtenir une formulation à partir d'électrons indépendants couplés à un champ auxiliaire de bosons.

Plusieurs algorithmes très différents permettent de traiter soit les modèles bosoniques, soit fermioniques sur réseaux. Ce sont des méthodes exactes ou quasi-exactes au sens où les erreurs sur les résultats sont dûes à la statistique et éventuellement à des erreurs systématiques. Il est également possible de calculer les observables, les fonctions de corrélations (voire la dynamique même en temps imaginaire), etc.

Dans une simulation de Monte Carlo, il y a généralement deux étapes : la première où en partant d'une configuration initiale, on réalise une dynamique afin d'amener le système près de l'équilibre ; la seconde étape, où le calcul des moyennes est réalisé. La durée de la première étape n'est pas facilement prévisible. Une première technique a constitué pendant longtemps à suivre l'énergie instantanée du système et à considérer que l'équilibre est atteint lorsque l'énergie se stabilise autour d'une valeur quasi-stationnaire. Une méthode plus précise consiste à estimer le temps de relaxation de fonction de corrélation et de choisir un temps assez nettement supérieur

à ce temps pour commencer la deuxième période.

Il existe plusieurs méthodes de *Monte Carlo Quantique*. Sans entrer dans les détails on cite entre autres :

- Le Monte Carlo avec les intégrales de chemins (PIMC).
- Le Monte Carlo Quantique du déterminant (DQMC).

## 2.1 Méthode du déterminant DQMC

L'algorithme du déterminant, dont le nom vient du fait qu'on utilise des déterminants comme poids statistique de Boltzmann pour générer une chaîne de Markov, est utilisé dans le but de calculer la moyenne thermodynamique de diverses quantités physiques d'intérêt. Pour une observable représentée par l'opérateur quantique  $\hat{O}$ , cette moyenne thermodynamique se calcule, dans l'ensemble statistique grand canonique, en utilisant la formule bien connue :

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\hat{O}e^{-\beta\hat{H}}) = \frac{\text{Tr}(\hat{O}e^{-\beta\hat{H}})}{\text{Tr}e^{-\beta\hat{H}}}, \quad (2.1)$$

où  $\hat{H}$  représente l'opérateur hamiltonien (celui de Hubbard dans notre cas). Cette trace n'est pas évaluée directement dans le cadre du QMC. En effet, nous montrons dans cette section comment, en pratique, elle est transformée de façon à ce qu'elle devienne une trace sur des variables classiques (commutatives) par l'introduction d'un champs auxiliaire, puis calculée efficacement et avec une certaine précision à l'aide de la méthode stochastique de Monte Carlo.

### 2.1.1 Décomposition de Trotter-Suzuki

La première approximation que nous effectuerons concerne l'opérateur  $\hat{H}$  qui peut être décomposé en une partie cinétique  $\hat{K}$  et une partie interaction  $\hat{V}$  pour lesquels nous avons  $[\hat{K}, \hat{V}] \neq 0$  et donc  $e^{\hat{K}+\hat{V}} \neq e^{\hat{K}}e^{\hat{V}}$ . Néanmoins, comme  $e^{\hat{K}}$  et  $e^{\hat{V}}$  sont facilement diagonalisables, il convient, de façon pratique, de les séparer à l'aide d'une *décomposition de Trotter-Suzuki* [10].

$$e^{-\beta(\hat{K}+\hat{V})} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(K_l+V_l)} \simeq \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} e^{-\Delta\tau V_l} + O(\Delta\tau^2)N_\tau, \quad (2.2)$$

où  $\Delta\tau = \frac{\beta}{N_\tau}$ . L'entier  $N_\tau$  est appelé le nombre de tranches de temps imaginaire, du fait de l'analogie qui existe entre l'opérateur statistique  $e^{-\beta\hat{H}}$  et l'opérateur d'évolution  $e^{i\hat{H}t}$  (rotation de Wick).

A noter que pour l'instant l'indice  $l$  assigné sur les opérateurs ne spécifie que l'ordre (arbitraire) du produit de ceux-ci.

L'approximation est dite de premier ordre parcequ'elle est exacte jusqu'à l'ordre  $\Delta\tau$ . En effet, le terme résiduel  $O(\Delta\tau^2)$  [11, 2] provient évidemment du commutateur  $[\hat{K}, \hat{V}]$  non-nul, et est la

---

seule erreur systématique de l'algorithme QMC. Le facteur  $N_\tau$  devant  $O(\Delta\tau^2)$  vient du nombre de fois que le commutateur  $[\hat{K}, \hat{V}]$  est négligé. Comme  $N_\tau = \frac{\beta}{\Delta\tau}$ , l'erreur totale est d'ordre  $\Delta\tau$ . En pratique, on contourne cette erreur en extrapolant les valeurs des observables pour  $\Delta\tau \rightarrow 0$ , étant donnée que la décomposition est exacte lorsque  $N_\tau \rightarrow \infty$ .

### 2.1.2 Transformation de Hubbard-Stratonovich

Une simplification supplémentaire de la trace peut être opérée en rendant la partie d'interaction  $\hat{V}$  quadratique en opérateurs de fermions par une transformation de *Hubbard-Stratonovich discrète* HS (pour des références originales voir [2]). Cette transformation, qui transpose le problème des électrons en interaction (terme quartique) en un problème sans interaction mais avec un champ auxiliaire, peut être vue comme une application de la formule :

$$e^{\frac{A^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 - Ax} dx, \quad (2.3)$$

permettant de calculer, à gauche, l'exponentielle d'un terme quadratique ( $e^{\frac{A^2}{2}}$ ) par une intégrale complète sur une variable intermédiaire  $x$  (le champ auxiliaire) de termes exponentiels  $e^{-Ax}$  linéaire en  $A$  [12]

**Transformation :** De façon plus spécifique, la transformation, dans le cas de l'algorithme du QMC, consiste à introduire un champ classique auxiliaire (le champ HS) de variables discrètes réelles  $x_{i,l} = \pm 1$  à chaque tranche de temps  $l = 1, \dots, N_\tau$  et pour chacun des sites du réseau spatial  $i = 1, \dots, N$ . On remplace ainsi le réseau spatial de  $N$  sites par un réseau espace-temps de  $NN_\tau$  sites qui reproduit la dynamique fermionique après avoir intégré tous les degrés de liberté du champ auxiliaire.

En définissant pour chaque tranche de temps  $l$  et chaque site  $i$

$$V_{i,l} = Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \quad (2.4)$$

nous pouvons écrire

$$e^{\Delta\tau V_i} = e^{-\Delta\tau \sum_{i=1}^N V_{i,l}} = \prod_{i=1}^N e^{-\Delta\tau V_{i,l}}, \quad (2.5)$$

puisque les opérateurs de nombre commutent. Nous obtenons alors, pour chaque site  $i, l$  du réseau espace-temps, un terme de la forme

$$e^{-\Delta\tau V_{i,l}} = e^{-\Delta\tau [U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - (\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{U}{4}]}, \quad (2.6)$$

sur lequel nous appliquons la transformation HS discrète [13]

$$e^{\Delta\tau U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})} = \begin{cases} e^{-\Delta\tau \frac{U}{4} \frac{1}{2} \sum_{x_{i,l}} e^{\lambda x_{i,l} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}, & U > 0 \\ e^{-\Delta\tau \frac{U}{4} \frac{1}{2} \sum_{x_{i,l}} e^{\lambda x_{i,l} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)}, & U < 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

avec ;

$x_{i,l} = \pm 1$ , le paramètre  $\lambda$  est fixé par  $\cosh(\lambda) = e^{\Delta\tau \frac{|U|}{2}}$ . Par cette transformation, on voit que l'interaction coulombienne à deux corps est remplacée par une interaction à un corps quadratique en opérateurs de fermions.

$$Un_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} \longrightarrow \begin{cases} \lambda x_{i,l} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), & U > 0 \\ \lambda x_{i,l} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1), & U < 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

qui a pour effet de coupler le champ HS avec la composante nette du spin ( $n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ ) ou la charge nette ( $n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$ ) selon le signe de l'interaction.

### 2.1.3 Calcul de la trace

En tenant compte des transformations précédentes, nous pouvons ainsi réécrire la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\Delta\tau [U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})]} \quad (2.9)$$

$$= \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\Delta\tau [U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - (\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{U}{4}]}, \quad (2.10)$$

qui devient, par la transformation de Hubbard Stratonovich pour  $U < 0$  (le cas  $U > 0$  est similaire)

$$Z = \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\Delta\tau \frac{U}{4}} \sum_{x_{i,l}} e^{\lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)} e^{\Delta\tau (\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} e^{\Delta\tau \frac{U}{4}} \quad (2.11)$$

Maintenant, en utilisant l'identité suivante :

$$\begin{aligned} \prod_l^{N_\tau} \prod_i^N \sum_{x_{i,l}=\pm 1} e^{x_{i,l}} &= \prod_l^{N_\tau} (e^{x_{1,l}^+} + e^{x_{1,l}^-}) (e^{x_{2,l}^+} + e^{x_{2,l}^-}) \dots (e^{x_{N,l}^+} + e^{x_{N,l}^-}) \\ &= \sum_{\{x_{i,l}\}} \prod_l^{N_\tau} \prod_i^N e^{x_{i,l}}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

nous pouvons réorganiser la somme sur la variable  $x_{i,l}$  en une somme sur toutes les configurations  $\{x_{i,l}\}$  du réseau espace temps :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{\lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)} e^{\Delta\tau (\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \\ &= \sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\lambda x_{i,l}} e^{(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})[\lambda x_{i,l} + \Delta\tau (\mu - \frac{U}{2})]}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

qui devient, en séparant les composantes du spin,

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\lambda x_{i,l}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} e^{n_{i,\sigma} V_{i,l}^\sigma}. \quad (2.14)$$

où

$$V_{i,l}^\sigma = \lambda x_{i,l} + \Delta\tau (\mu - \frac{U}{2}).$$

Comme la trace est faite sur les variables fermioniques, le terme contenant la variable HS peut être mis en évidence, ce qui nous laisse

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{n_{i,\sigma} V_{i,l}^\sigma}, \quad (2.15)$$

ayant défini

$$S = \prod_l^{N_\tau} \prod_i^N e^{-\lambda x_{i,l}} = \exp \left( -\lambda \sum_l^{N_\tau} \sum_i^N x_{i,l} \right). \quad (2.16)$$

Finalement, en développant les opérateurs  $K_l$  et  $n_{i,\sigma}$  en opérateurs de seconde quantification [2], nous obtenons :

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \text{Tr} \left[ \prod_l^{N_\tau} D_l^\sigma (\{x_{i,l}\}) \right], \quad (2.17)$$

où

$$D_l^\sigma (\{x_{i,l}\}) \equiv e^{-\Delta\tau c_{i,\sigma}^\dagger K_{ij} c_{j,\sigma}} e^{c_{i,\sigma}^\dagger (V_l^\sigma)_{ij} c_{j,\sigma}} \quad (2.18)$$

et  $K_{ij} = -t$  pour  $i, j$  premiers voisins. Dans le présent contexte, l'opérateur  $D_l^\sigma (\{x_{i,l}\})$  constitue un opérateur d'évolution de la tranche de temps imaginaire  $l-1$  à la tranche  $l$ , séparée de la première par un intervalle de temps  $\Delta\tau$ . L'opérateur d'évolution en temps imaginaire de la tranche  $l_2$  à  $l_1$  est défini par :

$$U^\sigma (l_1, l_2) = D_{l_1}^\sigma \cdots D_{l_2+1}^\sigma \quad (2.19)$$

avec cette définition, nous pouvons écrire,

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \text{Tr} [U^\sigma (N_\tau, 0)]. \quad (2.20)$$

Comme dernière simplification, on peut démontrer suivant [2, p139], que la trace sur les variables fermioniques se ramène à un déterminant, de sorte que la fonction de partition devienne

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det [1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma] \quad (2.21)$$

où

$$B_l^\sigma = e^{-\Delta\tau K} e^{V_l^\sigma}, \quad (2.22)$$

$K_{ij} = -t$ , si  $i, j$  sont premiers voisins, et

$$(V_l^\sigma)_{ij} = \begin{cases} \delta_{ij} [\sigma \lambda x_{i,l} + \Delta\tau (\mu - \frac{U}{2})], & U > 0 \\ \delta_{ij} [\lambda x_{i,l} + \Delta\tau (\mu - \frac{U}{2})], & U < 0 \end{cases} \quad (2.23)$$

A noter que la somme intervenant dans l'éq.(2.21) est effectuée sur toutes les configurations possibles du champ HS, et que  $I$  représente la matrice identité de dimension  $N \times N$ . Remarquons aussi à ce point que l'évolution de la trace sur les variables fermioniques a eu pour effet de remplacer l'opérateur  $\hat{K}$  par une matrice  $N \times N$  symétrique, que nous noterons par  $K$ , alors que  $V_l^\sigma$  représente la matrice d'interaction qui est diagonale.

### Interprétation :

On aboutit à un problème équivalent à celui d'électrons sans interaction se déplaçant dans un champ magnétique pointant dans la direction  $z$  et dont la valeur pour chaque site  $i, l$  du réseau espace-temps est déterminée par le  $x_{i,l}$  correspondant. En effectuant, ensuite, une moyenne sur toutes les valeurs de  $x_{i,l}$  possibles.

### Valeurs moyennes

Nous montrons ici que le *poids statistique*  $\pi (\{x_{i,l}\})$ , aussi appelée poids thermodynamique ou poids de Boltzmann, associé à une configuration  $x_{i,l}$  particulière est donnée pour  $U > 0$  par

$$\pi (\{x_{i,l}\}) = \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det [1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma] \quad (2.24)$$

En effet, à l'aide de la fonction de partition écrite sous la forme (2.21), la valeur moyenne, au sens thermodynamique, d'une observable  $\hat{O}$  se réduit à

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \hat{O} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} U^\sigma(N_\tau, 0)}{\sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} U^\sigma(N_\tau, 0)} = \frac{\sum_{\{x_{i,l}\}} \langle \hat{O} \rangle_{\{x\}}^0 \pi(\{x_{i,l}\})}{\sum_{\{x_{i,l}\}} \pi(\{x_{i,l}\})} \quad (2.25)$$

où  $\langle \hat{O} \rangle_{\{x\}}^0$  dénote la valeur moyenne, au sens quantique, de l'opérateur  $\hat{O}$  pour une configuration donnée du champ HS (champ sans interaction d'où l'indice 0) :

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \hat{O} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} U^\sigma(N_\tau, 0)}{\text{Tr} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} U^\sigma(N_\tau, 0)} \quad (2.26)$$

La démarche que nous avons à faire maintenant consiste à évaluer des valeurs moyennes de la forme (2.25) ou, tout simplement, une somme telle que

$$A = \sum_x a(x) \phi(x), \quad (2.27)$$

sur un ensemble de valeurs  $x$  correspondant aux configurations  $\{x_{i,l}\}$  ( $a(x)$  correspond à l'observable à calculer et  $\phi(x) = \pi(\{x_{i,l}\})$ ). La difficulté majeure que l'on rencontre en tentant d'évaluer cette somme est la taille gigantesque du domaine de définition de la variable  $x$ . Dans le cas qui nous occupe, chaque variable du réseau espace-temps peut prendre les valeurs  $\pm 1$ , ce qui fait qu'il existe au total  $2^{NN_\tau}$  configurations possibles du champ HS pour lesquelles  $a(x)$  et  $\phi(x)$  doivent être évaluées si l'on désire calculer  $A$  exactement. Évidemment, un tel problème, de complexité exponentielle en  $N$  et  $N_\tau$  dans le pire des cas, est hors de portée numériquement tout comme l'est d'ailleurs le problème original du calcul de la trace sur les états quantiques. Pour sortir de cette impasse, nous optons pour un calcul approximatif de  $A$  en nous restreignant à un sous-ensemble représentatif de l'ensemble complet des configurations du champ. En pratique, on utilise l'algorithme de Metropolis qui consiste à calculer la somme (2.27) en parcourant le domaine de  $X$  à la manière d'une marche aléatoire en générant récursivement des échantillons  $x$  pour décider au fur et à mesure du processus de génération, lesquels sont acceptés ou rejetés selon leur importance statistique. Les règles régissant la génération et la sélection ont été développées dans la section 8 du chapitre précédent.

### Remarque :

Avant de procéder à la description de notre algorithme, nous allons établir une notation qui sera utilisée pour les calculs numériques.

Il faut noter que la fonction de partition peut être mise sous la forme ( $U > 0$ )

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det [(G_\sigma)^{-1}] \quad (2.28)$$

où  $G_\sigma$  est une matrice  $N_\tau \times N_\tau$  composée de sous matrices  $B_l^\sigma$  de taille  $N \times N$  :

$$G_\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -B_{N_\tau}^\sigma \\ -B_1^\sigma & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -B_{N_\tau}^{-1} & 1 \end{pmatrix}^{-1}$$

Cette matrice constitue une *fonction de Green* (voir Annexe A.2), qui comme nous l'avons vu plus haut (opérateur  $U$ , éq (2.19)), joue le rôle de propagateur dans l'espace-temps. Cette fonction, à elle seule, sert au calcul de toute observable exprimée au moyen des opérateurs de fermions (théorème de Wick).  $G$  s'écrit pour la première tranche de temps  $l = 1$  [17] comme :

$$G_\sigma(l_1 = 1, l_2 = 1) = [1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \dots B_1^\sigma]^{-1} \quad (2.29)$$

$G_\sigma(l_1, l_2)$  étant une matrice  $N \times N$ , le fait que  $l_1 = l_2$  désigne que  $G$  est une fonction de Green à temps égal (pour connaître l'origine de son expression voir réf [2, 17]).

## 2.2 Etapes du code du DQMC

Notre problème actuel se résume à celui d'un problème de Monte Carlo classique (échantillonnage des variables de Hubbard Stratonovich  $x$ ), où nous devons considérer deux questions essentielles :

1. Comment allons nous passer d'une configuration  $x$  vers une nouvelle  $x'$  ?  
Une simple stratégie est d'inverser la valeur du champ au site  $(i, l)$

$$x_{i,l} = -x_{i,l}$$

et laisser le reste des composantes inchangées.

2. Comment s'assurer qu'une configuration acceptée suive la distribution voulu ?  
l'algorithme de Metropolis est la réponse à cette question.

Au niveau de l'algorithme (basé sur la réf [18]), on commence par l'hamiltonien de Hubbard :

$$\begin{aligned} H &= K + V, \\ K &= - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}, \\ V &= U \sum_i (n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}). \end{aligned} \quad (2.30)$$

- **Première étape** : On divise l'inverse de la température en  $N_\tau$  interval de temps imaginaire,  $\beta = N_\tau \Delta\tau$ . En pratique, chaque interval  $\Delta\tau$  doit satisfaire la condition :  $tU(\Delta\tau)^2 < 1/10$ .
- **Deuxième étape** : On passe au calcul de la matrice de l'énergie cinétique qui contient tout les termes du hamiltonien qui sont quadratiques en opérateurs de fermions. Cette matrice reste constante tout au long de la simulation.

$$\hat{K} = \sum_{\sigma} \begin{pmatrix} c_{1\sigma}^\dagger & c_{2\sigma}^\dagger & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_{11} & k_{12} & \dots \\ k_{21} & k_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{1\sigma} \\ c_{2\sigma} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$k$  est une matrice de dimension  $N \times N$  dont les éléments sont  $\Delta\tau k_{ij}$ .

- **Troisième étape** : Pour la matrice énergie d'interaction, on commence par la génération d'une configuration aléatoire du champ HS (à l'aide d'un générateur de nombre pseudo-aléatoire),  $x_{i,l}$  tel que le premier indice va de 1 à  $N$  et le second de 1 à  $N_\tau$ . on définit

ainsi de cette manière  $N_\tau$  matrices diagonales de dimension  $N \times N$ , où chacune d'elles s'écrit comme :

$$v_\uparrow(l) = \lambda \begin{pmatrix} s(1,l) & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & s(2,l) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & s(3,l) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & s(4,l) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

où le paramètre  $\lambda$  se calcule à partir de  $e^{U\Delta\tau/2} = \cosh \lambda$ .  $v_\uparrow$  et  $v_\downarrow$  diffèrent d'un signe ( $v_\uparrow = -v_\downarrow$ ).

- **Quatrième étape** : Elle concerne l'initialisation de la fonction de Green grâce à l'expression suivante :

$$G_\sigma = G_\sigma(l, l) = [I + e^k e^{v_\sigma(1)} e^k e^{v_\sigma(2)} e^k e^{v_\sigma(3)} \dots e^k e^{v_\sigma(N_\tau)}]^{-1} \quad (2.31)$$

où  $I$  est la matrice identité de dimension  $N \times N$ .

- **Cinquième étape** : A ce stade de l'algorithme on se propose de faire un basculement ( $x_{i,l} \rightarrow -x_{i,l}$ ) du champ de HS au site  $i$  de la tranche de temps  $l = N_\tau$  en calculant le rapport des poids de Boltzmann :

$$d = \frac{\pi\{x'_{i,l}\}}{\pi\{x_{i,l}\}} = \frac{\det[1 + B_{N_\tau}^\uparrow \dots B_1^\uparrow] \det[1 + B_{N_\tau}^\downarrow \dots B_1^\downarrow]}{\det[1 + B_{N_\tau}^\downarrow \dots B_1^\downarrow] \det[1 + B_{N_\tau}^\uparrow \dots B_1^\uparrow]}$$

via les quantités suivantes :

$$\begin{aligned} d_\uparrow &= 1 + (1 - [G_\uparrow]_{ii})(e^{-2\lambda x(i,l)} - 1) \\ d_\downarrow &= 1 + (1 - [G_\downarrow]_{ii})(e^{+2\lambda x(i,l)} - 1) \\ d &= d_\uparrow d_\downarrow \end{aligned} \quad (2.32)$$

on génère ensuite un nombre aléatoire uniforme  $r$  telque  $0 < r < 1$  :

1. si  $r < d$ , on applique la mise à jour du champ de HS au site  $i$  de la tranche  $l$  via  $x(i, l) = -x(i, l)$ .
2. dans le cas contraire, on passe au test basculement (flip) du site suivant de la même tranche de temps.

Si la mise à jour de  $x(i, l)$  a été effectuée, la fonction de Green qui dépend de  $x$ , doit être recalculée non pas avec l'éq.(2.31) qui prend un temps proportionnel à  $N^3$ , mais il a été démontré qu'on peut réduire le temps de calcul à  $N^2$  en calculant les quantités suivantes [20] :

$$\begin{aligned} c_{j\uparrow} &= -(e^{-2\lambda x(i,l)} - 1)[G_\uparrow]_{ij} + \delta_{ji}(e^{-2\lambda x(i,l)} - 1) \\ c_{j\downarrow} &= -(e^{+2\lambda x(i,l)} - 1)[G_\downarrow]_{ij} + \delta_{ji}(e^{+2\lambda x(i,l)} - 1) \\ b_{k\uparrow} &= [G_\uparrow]_{ki}/(1 + c_{i\uparrow}) \\ b_{k\downarrow} &= [G_\downarrow]_{ki}/(1 + c_{i\downarrow}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

où  $\delta_{ij}$  est le symbol de Kronecker,  $i$  le site concerné par la mise à jour et  $j, k$  indices libres allant de 1 à  $N$ , ainsi la nouvelle fonction de Green est donnée par :

$$[G_\sigma]_{jk} = [G_\sigma]_{jk} - b_{j\sigma} c_{k\sigma} \quad (2.34)$$

Après le calcul de la nouvelle  $G_\sigma$ , on passe au site suivant de la même tranche de temps  $l = N_\tau$  et on réeffectue à nouveau le basculement, on répète ainsi la même procédure de (2.32)  $\rightarrow$  (2.34) jusqu'à ce qu'on parcourt tout les sites du réseau pour la tranche de temps  $l = N_\tau$ .

Suite à la mise à jour de tout les sites  $i$  de la tranche  $N_\tau$ , on calcule  $G_\sigma$  par :

$$G_\sigma = [e^k e^{v_\sigma(l)}] G_\sigma [e^k e^{v_\sigma(l)}]^{-1} \quad (2.35)$$

Et on passe ensuite à la tranche de temps imaginaire  $l = N_\tau - 1$  pour répéter les mêmes étapes ((2.32)  $\rightarrow$  (2.35)) jusqu'à ce que toutes les tranches de temps seront mises à jour.

#### – Sixième étape : mesures physiques

Le but de cette étape est comment extraire la physique à partir de la simulation ? les observables physiques qui nous intéressent peuvent être obtenues de la fonction de Green à une particule telle que :

$$[G_\sigma]_{ij} = \langle c_{i\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \rangle \quad (2.36)$$

$$= ([I + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \dots B_1^\sigma]^{-1})_{ij} \quad (2.37)$$

La densité d'électrons de spin  $\sigma$  au site  $i$  est alors donnée par :

$$\rho_{i\sigma} = \langle n_{i\sigma} \rangle = 1 - \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = 1 - \langle c_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger \rangle = 1 - [G_\sigma]_{ii}, \quad (2.38)$$

où la troisième identité vient de l'utilisation de la relation d'anticommutation en interchangeant l'ordre des opérateurs de création et d'annihilation.

La double occupation au site  $i$  est donnée par :

$$\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle = (1 - [G_\uparrow]_{ii})(1 - [G_\downarrow]_{ii}) \quad (2.39)$$

Le moment local au site  $i$  :

$$\langle (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 \rangle = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle - 2\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \quad (2.40)$$

La corrélation entre les moments des sites  $i$  et  $j$ , pour  $i \neq j$  :

$$\begin{aligned} S_{+i} &= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \\ S_{-j} &= c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} \\ \langle S_{+i} S_{-j} \rangle &= -[G_\uparrow]_{ji} [G_\downarrow]_{ij} \end{aligned} \quad (2.41)$$

Une partie du code DQMC a été présenté dans l'annexe A.6.

---

## CHAPITRE 3

# RÉSULTATS DES CALCULS ET DISCUSSION

Dans ce chapitre, nous allons présenter et discuter quelques résultats obtenus de la simulation tels que le moment local, la corrélation et la chaleur spécifique et nous les comparerons avec ceux de la réf [16]. Précisons que notre simulation s'est basée sur les conditions suivantes : Réseau  $6 \times 6$  à demi-rempli,  $t = 1$ ,  $N_\tau = 100$ ,  $T = 0.5$  à  $100$ .

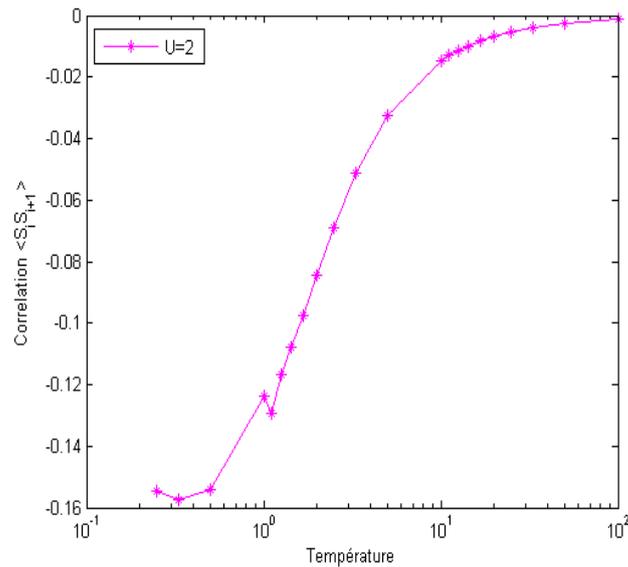


FIGURE 3.1 – La corrélation électronique entre proche voisins en fonction de la température pour une valeur de l'interaction  $U = 2$ .

---

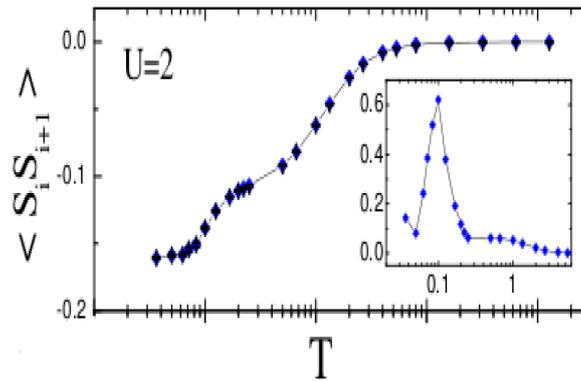


FIGURE 3.2 – La corrélation électronique entre proche voisins en fonction de la température pour une valeur de l’interaction  $U = 2$  obtenue par *Paiva et al* [16].

On remarque que la corrélation  $\langle S_i S_{i+1} \rangle$  spin-spin entre proches voisins décroît en valeur absolue avec la température. La courbe démarre d’une valeur  $\sim 0.154$  (valeur absolue) et diminue très rapidement pour s’annuler à hautes températures. La même allure est trouvée dans la figure 3.2 tirée des résultats de *Paiva et al* [16].

*Interprétation :*

A basse température l’énergie ( $\sim k_B T$ ) communiqué aux électrons est très faible devant leur interaction coulombienne  $U$  (les électrons auront tendance à se localiser sur leurs sites respectifs), ce qui rend compte de l’existence de corrélations électroniques. D’autre part, le signe négatif de cette corrélation nous renseigne sur la présence de fluctuations antiferromagnétiques entre proches voisins. Lorsqu’on s’éloigne de la région des faibles températures, l’effet de la répulsion coulombienne commence à s’affaiblir et de ce fait la diminution des corrélations jusqu’à atteindre les hautes températures ( $k_B T \geq U$ ) où les électrons ne ressentent plus l’effet de cette interaction et par conséquent l’absence de toutes corrélations.

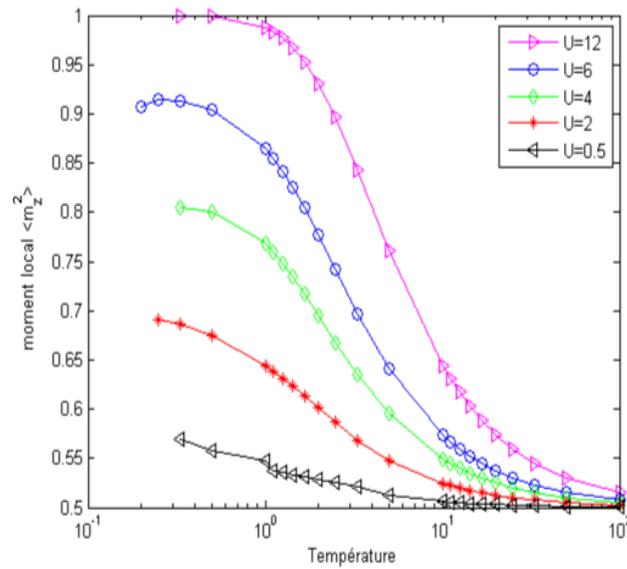


FIGURE 3.3 – Le moment local  $\langle m_z^2 \rangle$  en fonction de la température pour différentes valeurs de l'interaction  $U$ .

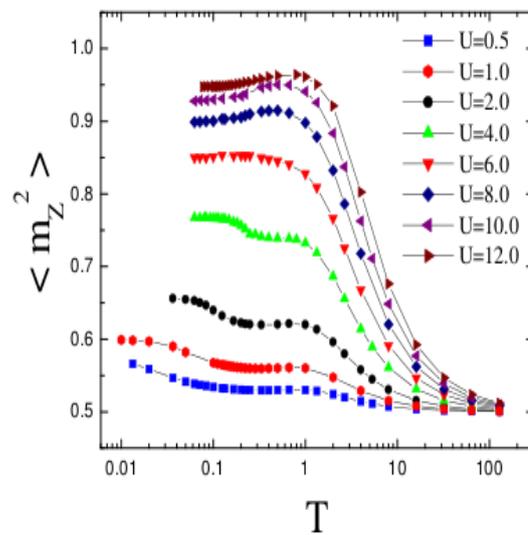


FIGURE 3.4 – Le moment local  $\langle m_z^2 \rangle$  en fonction de la température pour différentes valeurs de l'interaction  $U$  obtenue par *Paiva et al* [16].

On constate que le moment local  $\langle m_z \rangle^2$  décroît en fonction de la température, et cela pour toutes les valeurs de l'interaction  $U$ . Il commence à partir d'une valeur maximale, toujours inférieure à 1 (0.99 pour  $U = 12$ ), à basse température. Puis diminue au fur et à mesure jusqu'à atteindre une valeur seuil 0.5 à haute température ( $\sim 100$ ) commune à tous les  $U$ . Ces résultats concordent avec la figure 3.4 sauf dans la région des températures  $< 0.5$  où l'allure n'a pas pu être reproduite par notre algorithme de simulation à cause des instabilités numériques liées au calcul de la fonction de Green (voir annexe A.3) qui subsistent à basse température.

*interprétation :*

Pour de basses températures, la présence des fortes corrélations (absence de double occupation  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \rightarrow 0$ ), expliquées dans le paragraphe précédent, accentue le degré de localisation des spins et par conséquent l'existence d'un moment sur site ( $\langle m_z^2 \rangle \leq 1$ ). Au fur et à mesure que la température augmente, les corrélations diminuent (la température affaiblit l'effet des corrélations) et les spins sont de moins en moins localisés, ce qui explique bien la décroissance du moment local. Quand on atteint des températures  $T \sim U$  et au delà, les spins seront complètement découplés à cause de la suppression des corrélations c'est à dire que les doubles occupations deviennent alors permises par un processus de saut réel des électrons vers les sites voisins :  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle = \frac{1}{4}$ , à demi-rempli, et le moment local  $\langle m_z^2 \rangle = \langle (n_\uparrow - n_\downarrow)^2 \rangle = \langle n_\uparrow + n_\downarrow - 2n_\uparrow n_\downarrow \rangle = 0.5$ , qui est une valeur incorréllée.

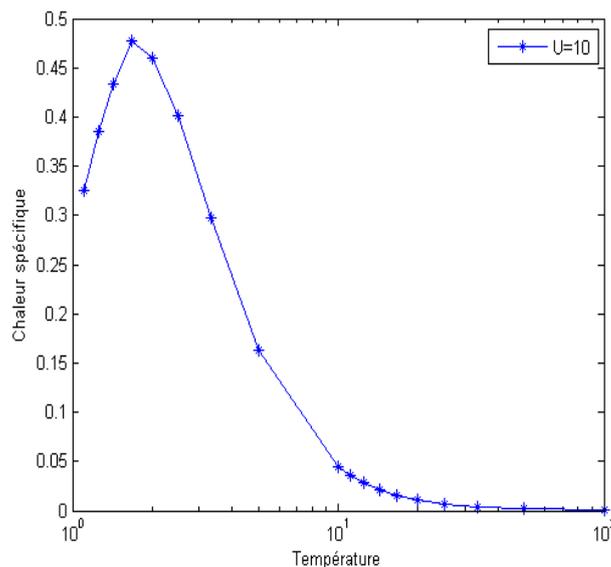


FIGURE 3.5 – La chaleur spécifique en fonction de la température pour une valeur de l'interaction  $U = 10$ .

On constate l'existence d'un pic dans l'allure de la courbe de la chaleur spécifique (figure 3.5). On effet celle-ci présente un maximum autour de 1.66 puis diminue jusqu'à ce qu'elle s'annule pour des températures supérieures à 12.5. Pour les mêmes raisons citées précédemment, la courbe de la chaleur spécifique n'a pas pu être reproduite à basse température.

*interprétation :* A très basse température, l'énergie du système est presque constante, ce qui fait que la chaleur spécifique est exponentiellement faible. Lorsqu'on s'approche de la température  $T \sim J$ , apparaissent alors des excitations de spins c'est à dire que le spin de l'électron fluctue et passe vers un état excité d'énergie de l'ordre de l'interaction d'échange  $J = 4t^2/U$ . Ce qui induit un pic dans la chaleur spécifique comme le montre la figure 3.6. Puis, en augmentant la

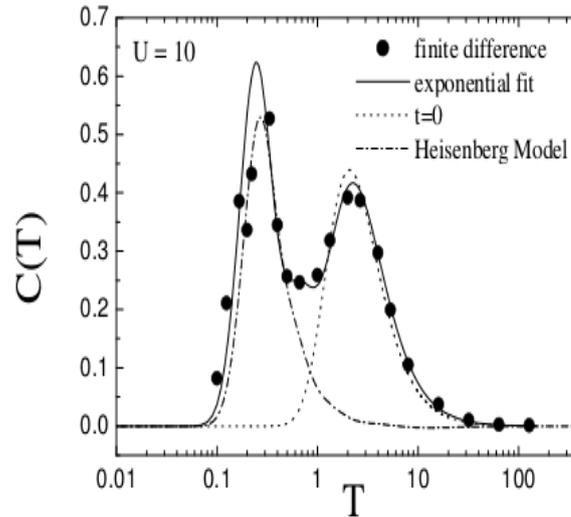


FIGURE 3.6 – La chaleur spécifique en fonction de la température pour une valeur de l’interaction  $U = 10$  obtenue par *Paiva et al* [16].

température  $T \sim U$ , apparaît un autre genre d’excitations qui sont les excitations de charge. Ces dernières font passer l’électron vers un autre état excité d’énergie égale à  $U$  induisant ainsi un second pic. Pour confirmer ces résultats, un calcul analytique est présenté dans l’annexe A.4.

---

## CONCLUSION

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des systèmes d'électrons fortement corrélés. Pour cela, nous nous sommes appuyés sur le modèle de Hubbard pour un réseau bidimensionnel et appliqué la méthode de Monte Carlo Quantique pour le résoudre et obtenir les grandeurs suivantes : la corrélation spin-spin, le moment local et la chaleur spécifique.

Nous avons constaté que le moment local décroît en fonction de la température à cause de la suppression des corrélations à haute température (double occupation qui augmente), et aussi la présence de deux pics dans la courbe de chaleur spécifique : un pic de spin à  $T \sim \frac{4t^2}{U}$  où le modèle de Hubbard se ramène à celui de Heisenberg (spin- $\frac{1}{2}$  antiferromagnétique), et un pic de charge pour des températures de l'ordre de  $U$  où le modèle de Hubbard se confond à la limite atomique. Ces résultats concordent avec des études effectuées antérieurement, hormis l'instabilité rencontrée à basse température où l'allure des courbes n'a pas pu être représentée. En effet, le calcul des fonctions de Green font intervenir un nombre important d'opérations matricielles qui sont fortement sensibles à la nature "finie" de la représentation des nombres réels sur ordinateur, cette sensibilité numérique a comme effet négatif d'amplifier les erreurs d'arrondissement et limiter la qualité des résultats des simulations.

Par ailleurs, la méthode de Monte Carlo Quantique a l'avantage d'être exacte, et de présenter un temps de calcul linéaire en nombre de sites et de tranche de temps comparativement à une croissance exponentielle d'une diagonalisation exacte. L'inconvénient réside dans la restriction de la taille des réseaux qu'on parvient à examiner, en plus du fait que cette étude s'est faite à demi remplissage pour  $U > 0$ . Car en dehors de ce cas survient des problèmes entre autre le problème du signe (voir annexe A.5), qui limite les simulations aux hautes températures.

Pour terminer, ce travail peut s'élargir à l'étude des propriétés dynamiques comme la densité d'états ou la supraconductivité pour mieux cerner les aspects du modèle de Hubbard.

---

---

## ANNEXE A

---

### A.1 Opérateur création et annihilation (seconde quantification)

Un système dans le nombre de particules  $N$  reste fixé, est décrit dans l'espace de Hilbert  $\xi_N$  par le produit tensoriel des  $N$  états  $\xi$  à une particule. Lorsque l'on veut décrire un système dont le nombre de particules est variable l'espace de Hilbert ne convient plus, il faut utiliser l'espace de Fock. L'espace de Fock est la somme des  $\xi_N$  pour toutes les valeurs de  $N$ .

Afin de travailler dans l'espace de Fock, il est nécessaire d'employer de nouveaux opérateurs tels que l'opérateur de création  $c_i^\dagger$  (resp. l'opérateur d'annihilation  $c_i$ ) qui ajoute (supprime) une particule sur l'état  $i$ .

Soit  $A$  l'opérateur d'antisymétrisation de l'espace de Fock, pour un système de fermions. On a dans ce cas :

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \sqrt{N!} A | \phi_1 \rangle \otimes | \phi_2 \rangle \dots$$

où  $n_i = 0, 1$  le nombre de fermions dans l'état  $| \phi_i \rangle$ .

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_i (c_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle$$

$$c_i^\dagger c_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \delta_{n_i, 1} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$$

L'opérateur  $c_i^\dagger c_i$  est donc l'opérateur nombre de particules occupant l'état  $i$ . Les opérateurs  $c$  obéissent aux relations d'anticommutation (pour les fermions) :

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{i,j}, \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \{c_i, c_j\} = 0$$

où  $\{A, B\} = AB + BA$ .

### A.2 Théorie des fonctions de Green

Formellement, une fonction de Green est une moyenne quantique d'opérateurs de seconde quantification de la forme  $\langle c(t)c^\dagger(t') \rangle$  ( $c(t)$  est dans la représentation de Heisenberg) où  $t'$  et  $t$  étant des instants arbitraires. En théorie quantique, ces temps sont réels et on interprète  $\langle c_i(t)c_j^\dagger(t') \rangle$  comme l'amplitude de probabilité qu'une particule créée par  $c^\dagger(t')$  à un instant  $t'$  sur le site  $j$  soit trouvée au site  $i$  à l'instant  $t$ ; la particule se propage de  $t'$  à  $t$  et on parle ainsi de propagateur. En physique statistique, comme seules des moyennes thermodynamiques stationnaires, et donc indépendantes du temps, sont considérées, la notion de temps perd un

---

peu de son sens. Cependant en vertu de l'analogie entre les opérateurs  $e^{-\beta H}$  et  $e^{iHt}$ , il est tout de même possible de définir un temps imaginaire fictif en considérant le point de vue de Heisenberg des opérateurs [2, 15].

Selon ce point de vue, nous pouvons définir les opérateurs

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}(m) &= e^{m\Delta\tau(H-\mu N)} c_{i,\sigma} e^{-m\Delta\tau(H-\mu N)} \\ c_{i,\sigma}^\dagger(m) &= e^{m\Delta\tau(H-\mu N)} c_{i,\sigma}^\dagger e^{-m\Delta\tau(H-\mu N)}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

à partir desquels est définie la fonction de Green en temps imaginaire

$$G_\sigma(m_1, m_2)_{ij} = \langle T_l c_{i,\sigma}(m_1) c_{j,\sigma}^\dagger(m_2) \rangle_{\{x\}}^0 = \begin{cases} \langle c_{i,\sigma}(m_1) c_{j,\sigma}^\dagger(m_2) \rangle_{\{x\}}^0, & m_1 > m_2 \\ -\langle c_{j,\sigma}^\dagger(m_2) c_{i,\sigma}(m_1) \rangle_{\{x\}}^0, & m_2 > m_1 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Dans cette équation,  $T_l$  est l'opérateur d'ordre chronologique

$$TA(t_1)B(t_2) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1), & t_1 < t_2 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

On définit aussi les fonctions de Green en temps imaginaire sous la forme suivante :

$$G_\sigma(\tau)_{ij} = \begin{cases} \langle c_{i,\sigma}(\tau) c_{j,\sigma}^\dagger \rangle_{\{x\}}^0, & \tau > 0 \\ -\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(\tau) \rangle_{\{x\}}^0, & \tau < 0 \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

avec  $\tau = m_1 - m_2 \in [-\beta, \beta]$ . Cette forme est justifiée par certaines propriétés des fonctions de Green.

**Remarque :**

Nous avons introduit dans la définition précédente l'indice de temps  $m$  qui est différent de  $l$  dans le fait que  $m = 0$  est une valeur permise pour rendre compte de cas  $c_{i,\sigma}(0) = c_{i,\sigma}$ , alors que  $l \in \{1, \dots, N_\tau\}$ .

Par analogie avec l'interprétation des fonctions de Green en temps réel, on interprète l'éq.(A.2) comme le propagateur d'un fermion se déplaçant sur les champs libre HS. Notons toutefois que cette interprétation ne doit pas être prise trop littéralement pour la simple raison que le champ HS n'est pas un champ physique; il ne constitue qu'un champs fictif ayant pour but de transformer l'interaction entre les fermions en une interaction avec un champ classique reproduisant la dynamique quantique du problème par l'entremise d'une trace sur les configurations  $\{x_{i,l}\}$  du champ.

### A.3 Instabilités numériques

Les matrices  $B$ , entrant dans l'expression des fonctions de Green, contiennent des valeurs numériques distribuées sur plusieurs ordres de grandeur. En effet, en considérant le problème sans interaction  $U = 0$ , on peut voir que les valeurs propres du produit des matrices

$$B_{N_\tau} \dots B_1 = e^{-\Delta\tau K} \dots e^{\Delta\tau K},$$

qui n'est rien d'autre que  $e^{-\beta K}$ , vont de  $e^{-4t\beta}$  à  $e^{4t\beta}$  sachant que les énergies des électrons couvrent l'intervalle  $[-4t, 4t]$ . Au niveau numérique, ces éléments sont impossibles à conserver totalement lors du calcul des fonctions de Green, certains éléments extrêmes des matrices sont nécessairement "écrasés" par les opérations d'arrondissement. En plus, l'opération d'inversion de ce produit amplifie fortement les erreurs présentes sur les valeurs et il en résulte une instabilité des calculs qui s'accroît à basse température ( $\beta$  élevé).

En présence d'interaction, la même conclusion est applicable, ce problème est lié au nombre de conditionnement de  $G$ . Ce nombre mesure l'accroissement de l'erreur numérique associée à une opération linéaire (produit, inversion ...) effectuée sur les matrices  $B$ . Mathuis [12] a trouvé que ce nombre de conditionnement est de l'ordre de  $10^3$ , valeur à partir de laquelle on considère une matrice *mal conditionnée*.

Pour contourner ce problème, on procède à une décomposition  $QR$  de  $B$  où  $Q$  est une matrice orthogonale et  $R$  une matrice triangulaire supérieure, la justification de ce choix est que la matrice  $Q$  possède un nombre de conditionnement égale à un, ce qui fait que des opérations faisant intervenir  $Q$  sont plus stables que celles faisant intervenir  $B$  directement.

On normalise ensuite les colonnes de  $U$  telle que  $Q = UD$ ,  $U$  étant aussi une matrice orthogonale et  $D$  diagonale. Dans un premier temps nous calculons un produit relativement stable de  $k$  matrices  $B$ .

$$1 + B_{N_\tau} \dots B_1 = 1 + B_{N_\tau} \dots \underbrace{[B_{l+k} \dots B_1]}_{U_1 D_1 R_1}$$

puis on réeffectue cette même opération pour un autre bloc de  $k$

$$= 1 + B_{N_\tau} \dots \underbrace{[B_{l+2k} \dots B_{l+k+1} U_1 D_1]}_{U_2 D_2 R_2} R_1$$

jusqu'à ce qu'on arrive à l'expression finale suivante :

$$= 1 + U_{N_{\tau/k}} D_{N_{\tau/k}} R$$

On calcul alors  $G$  grâce à (où les indices  $N_{\tau/k}$  sont omis)

$$1 + UDV = U(U^{-1}R^{-1} + D)R$$

$$\frac{1}{1 + B_{N_\tau} \dots B_1} = R^{-1} \underbrace{(U^{-1}R^{-1} + D)^{-1}}_{U' D' R'} U^{-1}$$

**Remarque :**

- Du fait que  $U$  et  $D$  sont orthogonales ( $U^{-1} = U^T$ ), elles s'inversent de façon plus stables.
- L'efficacité de la méthode réside dans le fait qu'on limite le plus possible les produits instables, en les remplaçant par des produits stables au coût d'une décomposition  $UDV$  pour chaque produit stable.

De plus, il est possible d'ordonner les normes des colonnes de  $Q$  de manière à isoler le plus possible les ordres de grandeur intervenant dans les produits  $\prod_l B_l$ .

Prenons comme exemple le produit  $UD$  pour des matrices  $3 \times 3$ .

$$\begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & & \\ & X & \\ & & x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & X & x \\ x & X & x \\ x & X & x \end{pmatrix}$$

On effectue un pivotage sur  $D$  de telle sorte à classer ses éléments selon un ordre particulier (qu'on gardera fixe tout au long du calcul), l'ordre décroissant par exemple

$$\begin{pmatrix} x & & \\ & X & \\ & & x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & x \end{pmatrix} P$$

$P$  est une matrice de permutation.

Cette opération permet de préserver l'intégrité du résultat et réduit l'effet des erreurs d'arrondissement.

## A.4 Calcul de la capacité calorifique

Pour bien comprendre la présence des deux pics dans l'allure de la capacité calorifique citée plus haut, on considère une particule dans l'état fondamental et qui peut avoir deux états excités  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  tel que  $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ .

L'énergie moyenne d'un tel système est donné par :

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \varepsilon_i e^{-\beta \varepsilon_i}$$

où  $Z = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}$  et  $\beta = 1/k_B T$ .

Dans le cas du modèle de Hubbard, le premier état excité est de  $\sim J$  et le second  $\sim U$ , l'énergie sera donc donnée par :



$$\langle E \rangle = \frac{J e^{-J/k_B T} + U e^{-U/k_B T}}{1 + e^{-J/k_B T} + e^{-U/k_B T}}$$

la capacité calorifique :

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{1}{(k_B T)^2} \frac{J^2 e^{-J/k_B T} + U^2 e^{-U/k_B T} + (J - U)^2 e^{-(U+J)/k_B T}}{1 + e^{-U/k_B T} + e^{-J/k_B T}}$$

On peut tracer l'évolution de la capacité calorifique en fonction de la température :

Comme on le constate sur la figure A.1 l'allure de la capacité calorifique reproduit l'allure générale de la capacité calorifique trouvée par les calculs QMC.

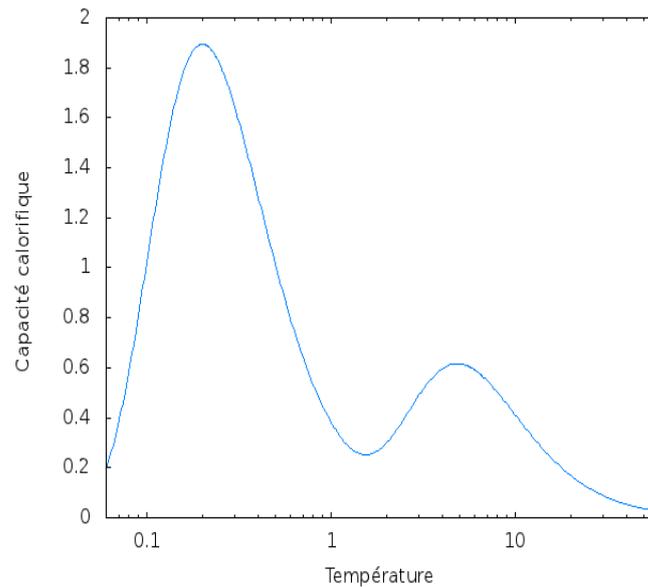


FIGURE A.1 – Capacité calorifique pour un spin avec deux niveaux excités

## A.5 Problème du signe

Pour que la quantité (2.24) puisse servir de poids de Boltzmann dans le processus Monte Carlo, il faut absolument qu'elle soit une fonction définie positive du champ  $\{x_{i,l}\}$ . Malheureusement, pour certains paramètres de simulation, cela n'est pas toujours le cas. En fait, on peut démontrer qu'à demi-rempli pour  $U > 0$ , le poids de Boltzmann est toujours positif [13] de même que pour le cas  $U < 0$  à tous les remplissages. En dehors de ces régions de paramètres, on s'attend cependant à ce que  $\pi(\{x_{i,l}\})$  puisse être négatif. Il faut inclure ce signe du poids probabiliste directement en prenant la valeur absolue du produit des déterminants comme poids d'échantillonnage et inclure le signe lors du calcul des observables. Le problème du signe dans ce contexte est lorsque le signe de  $\pi(\{x_{i,l}\})$  est trop souvent négatif. Sans entrer dans les détails de cette limitation de l'algorithme (liée à la l'antisymétrie de la fonction d'onde des fermions), mentionnons que ce comportement a été détaillé dans [2,3].

## A.6 Code DQMC

Une partie du programme en langage C est présentée dans cette section.

```

1 /******
2 #include"aleatoire.c"
3 #include"eee.c"
4
5
6 int
7 main (int argc, const char *argv [])
8 {
9 /****** parametres a fixer au programme *****/
10
11 FILE* fichier = NULL;
12 fichier = fopen("resultats.txt", "r+");
13
14
15
```

```

16  double const u = 4., mhu = 0., t = 0.;
17  const int n = 6, N = 6*6, L = 100;
18  int p, k, l, i, j, q, entier, site, tranche;
19  double r, d, b, d_up, d_down, lambda, delta_tho = 0.0009;
20
21
22  double      G_up_inverse[6*6*6*6], G_down_inverse[6*6*6*6],
23             produit_up[6*6*6*6], produit_down[6*6*6*6],
24             G_up[6*6*6*6], G_down[6*6*6*6],
25             A_up[6*6*6*6] = {0.}, A_down[6*6*6*6] = {0.},
26             B_up[6*6], B_down[6*6],
27             inverse_up[6*6*6*6], inverse_down[6*6*6*6],
28             up[6*6*6*6], down[6*6*6*6],
29             C_up[6*6], C_down[6*6],
30  int voisin[4] = { 0 };
31  double A[6*6*6*6] = {0.}, B[6*6*6*6] = {0.},
32         v_up[6*6*100], v_down[6*6*100] ,
33         reseau[6*6] = { 0 }, k_ij[6*6*6*6], expo_k_ij[6*6*6*6];
34  /*****/
35  srand (time (NULL));
36  srand48 (time (NULL));
37
38  for (i = 1; i <= n; i++)
39  {
40      for (j = 1; j <= n; j++)
41      {
42          mat (reseau, n, i, j) = i + (j - 1) + (n - 1) * (i - 1);
43      }
44  }
45
46
47
48  /*****/
49  /***** determination des voisins de chaque site *****/
50
51
52  lambda = acosh(exp(u* delta_tho/2.));
53  for (i = 1; i <= n; i++)
54  {
55      for (j = 1; j <= n; j++)
56      {
57          if (j == 1)
58          {
59              voisin[1] = (int) mat (reseau, n, i, n);
60          }
61          else
62          {
63              voisin[1] = (int) mat (reseau, n, i, (j - 1));
64          }
65          if (j == n)
66          {
67              voisin[2] = (int) mat (reseau, n, i, 1);
68          }
69          else
70          {
71              voisin[2] = (int) mat (reseau, n, i, (j + 1));
72          }
73      }
74  }
75

```

```

76         if (i == n)
77             {
78                 voisin[3] = (int) mat (reseau , n, 1, j);
79             }
80         else
81             {
82                 voisin[3] = (int) mat (reseau , n, (i + 1), j);
83             }
84         if (i == 1)
85             {
86                 voisin[4] = (int) mat (reseau , n, n, j);
87             }
88         else
89             {
90                 voisin[4] = (int) mat (reseau , n, (i - 1), j);
91             }
92         mat (k_ij , N, (int) mat (reseau , n, i, j), voisin[1]) = -1 * delta_tho * t;
93         mat (k_ij , N, (int) mat (reseau , n, i, j), voisin[2]) = -1 * delta_tho * t;
94         mat (k_ij , N, (int) mat (reseau , n, i, j), voisin[3]) = -1 * delta_tho * t;
95         mat (k_ij , N, (int) mat (reseau , n, i, j), voisin[4]) = -1 * delta_tho * t;
96     }
97 }
98 }
99
100
101 /*****
102 /***** remplissage des elements de k_ij *****/
103
104
105 for (i = 1; i <= N; i++)
106     {
107         for (j = 1; j <= N; j++)
108             {
109                 if (i == j)
110                     {
111                         mat (k_ij , N, i, j) = -1 * mhu * delta_tho;
112                     }
113                 else
114                     {
115                         mat (k_ij , N, i, j) = mat(k_ij , N, i, j);
116                     }
117             }
118         }
119     }
120 matrice_exponentiel(k_ij , expo_k_ij , N, 2000);
121
122 /***** seconde partie: la partie interaction *****/
123 /***** on passe a la matrice de l'energie potentielle v_up(l)*****/
124
125
126
127     for (q = 1; q <=100; q++)
128         {
129
130         for (i = 1; i <= L; i++)
131             {
132                 for (j = 1; j <= N; j++)
133                     {
134                         mat (v_up , N, i, j) = lambda * aleatoire_plus_moins_1 ();
135                         mat (v_down , N, i, j) = -1 * mat(v_up , N, i, j);

```

```

136
137     }
138 }
139
140          /****** calcul de la fonction de green "initiale" ******/
141
142     matrice_identite (G_up_inverse , N);
143     matrice_identite (G_down_inverse , N);
144     for (l = 1; l <= L; l++)
145     {
146         for (j = 1; j <= N; j++)
147         {
148             mat ( A_up, N, j, j ) = exp ( mat (v_up, N, l, j) );
149             mat ( A_down, N, j, j ) = exp ( mat (v_down, N, l, j) );
150         }
151     if (l==1) {
152         produit_matrice_matrice (expo_k_ij , A_up, G_up, N);
153         produit_matrice_matrice (expo_k_ij , A_down, G_down, N);
154     }
155     else {
156         produit_matrice_matrice (G_up, expo_k_ij , A, N);
157         produit_matrice_matrice (A, A_up, G_up, N);
158         produit_matrice_matrice (G_down, expo_k_ij , B, N);
159         produit_matrice_matrice (B, A_down, G_down, N);
160     }
161     }
162     somme_matrice_matrice (G_up, G_up_inverse , G_up_inverse , N);
163     somme_matrice_matrice (G_down, G_down_inverse , G_down_inverse , N);
164     inverse_matrice_simple (G_up_inverse , G_up, N);
165     inverse_matrice_simple (G_down_inverse , G_down, N);
166
167 /****** basculement du champs HS et test******/
168     for (tranche = 1; tranche <=L ; tranche++)
169     {
170         for (site = 1; site <= N; site++)
171         {
172
173             retour :
174             d_up = 1 + ((1-mat (G_up, N, site , site)) * ((exp ((-2) * mat(v_up, N, tranche , site))) - 1)
175             d_down = 1 + ((1-mat (G_down, N, site , site)) * ((exp ((-2)* mat(v_down, N, tranche , site)
176             d = d_up * d_down;
177
178             r = aleatoire_2 (); /*a l'aide d'un g[U+FFFD]herateur de nombre aleatoire*/
179
180             if (d > r) { mat(v_up, N, tranche , site) = -1 * mat(v_up, N, tranche , site);
181                         mat(v_down, N, tranche , site) = -1 * mat(v_down, N, tranche , site);
182                     }
183             else if (site!=N && d <= r) {site = site + 1; goto retour;}
184             else {break; }
185
186
187
188     matrice_identite (G_up_inverse , N);
189     for (j = 1; j <= N; j++)
190     {
191         vec (C_up, j) =
192         -1 * ((exp (-2 * mat(v_up, N, tranche , site))) - 1) *
193         mat(G_up, N, site , j) + mat(G_up_inverse , N, j, site) *
194         ((exp (-2 * mat(v_up, N, tranche , site))) - 1);
195         vec (C_down, j) =

```

```

196         -1 * ((exp ((-2) * mat(v_down, N, tranche, site))) - 1) *
197         mat(G_down, N, site, j) + mat(G_up_inverse, N, j, site) *
198         ((exp ((-2)* mat(v_down, N, tranche, site))) - 1);
199
200
201 /***** mise a jour de la fonction de green pour les N sites de chaque tranche de temps ***
202
203
204
205     if (j==site){
206         for (k = 1; k <= N; k++)
207             {
208                 vec(B_up, k) = mat(G_up, N, k, site) / (1 + vec(C_up, site));
209                 vec(B_down, k) = mat(G_down, N, k, site) / (1 + vec(C_down, site));
210             }
211     }
212
213
214
215
216     for (j = 1; j <= N; j++)
217     {
218         for (k = 1; k <= N; k++)
219             {
220                 mat(G_up, N, j, k) = mat(G_up, N, j, k) - vec(B_up, j) * vec(C_u
221                 mat(G_down, N, j, k) = mat(G_down, N, j, k) - vec(B_down, j) * v
222             }
223     }
224
225
226 }
227
228 /**** mise a jour de la fonction de green au Nieme site de chaque tranche de temps *****/
229
230     for (j = 1; j <= N; j++)
231     {
232         {
233             mat(A_up, N, j, j) = exp(mat (v_up, N, tranche, j) );
234             mat(A_down, N, j, j) = exp(mat (v_down, N, tranche, j) );
235         }
236         produit_matrice_matrice(expo_k_ij, A_up, produit_up, N);
237         produit_matrice_matrice(expo_k_ij, A_down, produit_down, N);
238
239         inverse_matrice_simple(produit_up, inverse_up, N);
240         inverse_matrice_simple(produit_down, inverse_down, N);
241
242         produit_matrice_matrice(produit_up, G_up, up, N);
243         produit_matrice_matrice(produit_down, G_down, down, N);
244
245         produit_matrice_matrice(up, inverse_up, G_up, N);
246         produit_matrice_matrice(down, inverse_down, G_down, N);
247
248     }
249 }
250 }
251
252 fclose(fichier);

```

**Remarque :**

En langage C, les générateurs de nombres pseudo-aléatoires sont des fonctions déclarées dans

*stdlib.h*.

`rand()` est une fonction qui retourne un entier aléatoire à chaque appel, ce nombre est compris dans l'intervalle  $[0, \text{RAND\_MAX}]$ , et la fonction `srand()` quant à elle, permet d'initialiser le générateur avec une graine différente.

---

---

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] F. Jackson, *Propriétés magnétiques du modèle de Hubbard et applications au composé supraconducteur  $La_2-xSr_xNCuO_4$* , M.Sc., Département de physique, Université de Sherbrooke, (1996).
  - [2] A.-M. Tremblay, Méthode Monte Carlo quantique pour les électrons sur réseau, in L. Lewis, J. Lopez, G. Slater, A.-M. Tremblay (éditeurs), *Simulations numériques en physique*, vol.2, 529-582, (1993).
  - [3] A. Veilleux, *Monte Carlo quantique pour le modèle de Hubbard avec sauts vers seconds voisins*, M.Sc., Département de physique, Université de Sherbrooke, (1994).
  - [4] E. H. Lieb et F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445, (1968).
  - [5] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, et M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13, (1996).
  - [6] C. Kim et al. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4054, (1996).
  - [7] K. Kobayashi et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3121, (1998).
  - [8] P. W. Leung et al., *Phys. Rev. B* **46**, 11779, (1992).
  - [9] P. W. Leung, B. O. Wells, R. J. Gooding, *Phys. Rev. B* **56**, 6320, (1997).
  - [10] H. Trotter, *Proc. Amer. Math. Soc.* **10**, 545, (1959).
  - [11] R.M. Fye, J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **38**, 433, (1988).
  - [12] H.-G. Matuttis, Ph.D. Thesis, Département of Physics, University of Regensburg, (1995).
  - [13] J. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403-4419, (1985).
  - [14] V. J. Emery, S. A. Kivelson, et H. Q. Lin *Phys. Rev. Lett.* **64**, 475, (1990).
  - [15] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, (McGraw Hill. 1971).
  - [16] T. Paiva, R.T. Scalettar, C. Huscroft, et A.K. McMahan. *Phys. Rev. B* **63**, 125116, (2001).
  - [17] C. Brillon, *Le crossover dimensionnel dans la chaleur spécifique du modèle de Hubbard demi-rempli*, Faculté des sciences, Université de Sherbrooke, (2007).
  - [18] R.T. Scalettar, *Numerical Studies of Disordered Tight-Binding Hamiltonians*, Département de physique, Université de Californie, (2007).
  - [19] H. Touchette, D. Poulin, *Aspects numériques des simulations du modèle de Hubbard- Monte Carlo quantique et méthode d'entropie maximum*, Département de physique, Université de Sherbrooke, 2000.
  - [20] R. R. dos Santos, *Brazilian Journal of Physics*, vol. 33, no. 1, (2003).
  - [21] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. (London) A* **276**, 238, (1963).
-

- [22] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. W. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087, (1953).
- [23] M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **51**, 7429, (1995).
-