

Ordres non conventionnels et entrelacés du modèle de Hubbard à basse dimensionnalité

A. Leprévost

▶ **To cite this version:**

A. Leprévost. Ordres non conventionnels et entrelacés du modèle de Hubbard à basse dimensionnalité. Matière Condensée [cond-mat]. Université de Caen, 2015. Français. NNT : . tel-01238742

HAL Id: tel-01238742
https://hal.in2p3.fr/tel-01238742

Submitted on 7 Dec 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE DE CAEN / BASSE-NORMANDIE

U.F.R. DE SCIENCES

ECOLE DOCTORALE : SIMEM

(Structure, Information, Matière Et Matériaux)

THESE

présentée par

Mr Alexandre LEPRÉVOST

soutenue
le 20 novembre 2015
en vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE CAEN
Spécialité : Constituants élémentaires et physique théorique
(Arrêté du 7 août 2006)

Ordres non conventionnels et entrelacés du modèle de Hubbard à basse dimensionnalité

Directeur de thèse : **Mr Olivier JUILLET**
Co-directeur de thèse : **Mr Raymond FRÉSARD**

JURY :

Monsieur M. GABAY, Professeur, Université Paris-Sud 11, France
Monsieur D. LEDUE, Professeur, Université de Rouen, France
Monsieur A.M. OLES, Professeur, Université Jagellonne, Cracovie, Pologne
Monsieur A.M. TREMBLAY, Professeur, Université de Sherbrooke, Canada

UNIVERSITÉ CAEN NORMANDIE

Normandie Université

UNIVERSITE DE CAEN NORMANDIE

U.F.R. DE SCIENCES

Ecole doctorale : SIMEM

Thèse de doctorat

Présentée et soutenue le 20 Novembre 2015

par

M[r] Alexandre LEPRÉVOST

En vue de l'obtention du

Doctorat de l'Université de Caen

Spécialité : Constituants élémentaire et physique théorique

Ordres non conventionnels et entrelacés du modèle de Hubbard à basse dimensionnalité

JURY :

M[r] Andrzej M. OLES, Professeur, Université Jagellonne, Cracovie, Pologne (*Rapporteur*)

M[r] André-Marie TREMBLAY, Professeur, Université de Sherbrooke, Canada (*Rapporteur*)

M[r] Marc GABAY, Professeur, Université Paris-Sud 11, France (*Examinateur*)

M[r] Denis LEDUE, Professeur, Université de Rouen, France (*Examinateur*)

M[r] Olivier JUILLET, Professeur, Université de Caen, France (*Directeur de thèse*)

M[r] Raymond FRÉSARD, Professeur, ENSICAEN, France (*Co-directeur de thèse*)

Remerciements

Cette thèse s'est déroulée d'octobre 2012 à Septembre 2015 au Laboratoire de Physique Corpusculaire à Caen. Je remercie son directeur, Dominique Durand, pour m'avoir accueilli dans les meilleures conditions au sein du laboratoire.

Je remercie les membres de mon jury, Messieurs Marc Gabay, Denis Ledue, Andrzej M. Oles et André-Marie Tremblay pour leur investissement dans l'analyse de mon travail de thèse. J'y ajoute une une mention spéciale à mes rapporteurs, Monsieur Tremblay qui a bien voulu se plier aux exigences que représente une soutenance par vidéoconférence, et Monsieur Oles qui a accepté de lire une thèse majoritairement écrite en Français.

Je souhaite exprimer ma sincère gratitude envers Olivier Juillet pour son encadrement de thèse exceptionnel. De ma première année de Licence jusqu'à aujourd'hui, ta pédagogie, ton sens de la rigueur, ton honnêteté intellectuelle et le souci constant de faire correctement les choses m'auront grandement marqué. Pour l'ensemble des connaissances que tu m'as transmises et pour la confiance que tu m'as accordée en me permettant d'enseigner à l'Université, je te remercie vivement.

J'aimerais également remercier mon co-directeur Raymond Frésard pour l'apport de ses vastes connaissances en physique des matériaux, pour les discussions que nous avons eues (autour de la physique ou sur d'autres sujets), pour son enthousiasme et pour sa façon de faire retomber la pression par l'humour.

Je tiens à associer à ces remerciements l'ensemble des membres du LPC, des chercheurs aux personnels administratifs en passant par les thésards et autres post-doctorants, pour avoir fait du laboratoire un environnement agréable et stimulant durant ces trois années.

Enfin, je suis très profondément reconnaissant envers ma famille et mes amis pour m'avoir encouragé à poursuivre les études de mon choix jusqu'au bout. Merci à mes parents que j'embrasse chaleureusement, ainsi qu'Anne et Michel. Merci à mes frères, Arthur, Loïc et Frédéric, qui a bien voulu se donner la peine avec Anne-Sophie de relire ma thèse pour mieux comprendre ce que je fais et pour y déceler les coquilles. Merci à Maxime pour son amitié inconditionnelle partagée depuis vingt ans, que nos personnalités continuent de se compléter de manière aussi remarquable pendant encore longtemps ! Merci à Manu, Marine, Hugo, Edouard, Tiphanie, Alex, Carole, Laurie, Pierre, Clément, Louis, Ludo, Camille, Bimoot, Alexis, Clara, Fabian, Julie, à tous mes potes du judo et à tous ceux que j'oublie en écrivant ces lignes… Merci pour votre amitié, votre joie de vivre et votre soutien.

Table des matières

Introduction **1**

Chapitre 1 : Du champ moyen aux approches à symétries restaurées **11**

I. Les approximations de champ moyen Hartree-Fock 11

II. Les approximations de champ moyen « renormalisé » : premiers pas vers la supraconductivité non conventionnelle 15

III. Le champ moyen étendu par projection sur les nombres quantiques avant variation 18

III.a) Modèle à deux sites 19

III.b) Modèle à quatre sites 20

Références 22

Article : « Exact ground state of strongly correlated electron systems from symmetry-entangled wave-functions », A. Leprévost, O. Juillet and R. Frésard, *Ann. Phys. (Berlin)* **526**, 430 (2014) 24

Chapitre 2 : **Stratégies variationnelles de champ moyen enchevêtré par les symétries pour le modèle de Fermi-Hubbard** **31**

I. Etats factorisés d'un système de fermions 31

I.a) Les déterminants de Slater 31

I.b) Les vides de Bogoliubov 34

II. Les symétries du modèle de Hubbard et leur restauration 39

III. Approximations multi-configurationnelles à symétries adaptées par projection avant variation 46

III.a) Principe 46

III.b) Le théorème de Wick généralisé 50

III.c) Les équations auto-cohérentes SEMF 61

III.d) Implémentation numérique....65

III.e) Remarque : l'approximation SEMF à un seul vide HF ou BdG....66

Références....70

Chapitre 3 : Application aux échelles de Hubbard à quatre montants dopées en trous 73

Références....74

Article : « Intertwined orders from symmetry projected wavefunctions of repulsively interacting Fermi gases in optical lattices », A. Leprévost, O. Juillet and R. Frésard, accepté pour publication dans *New Journal of Physics* le 17 août 2015....75

Conclusion 99

Introduction

Dans la plupart des solides, la cohésion du cristal est assurée par des électrons délocalisés sur tout le système et ses propriétés sont globalement capturées par des modèles historiques mettant en jeu des fermions sans interaction. Celui de Drude-Sommerfeld en est un exemple représentatif par son aptitude à expliquer plusieurs caractéristiques communes à de nombreux métaux telles que la capacité calorifique ou encore les conductivités électrique et thermique. Le succès de ces approches trouve en réalité son origine dans la théorie des liquides de Fermi où les interactions sont effectivement absorbées en termes de quasi-particules indépendantes qui correspondent à des électrons « habillés ». La découverte au début du XX^{ème} siècle de la supraconductivité, suivie dans les années 1950 des théories de Ginzburg-Landau puis de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), a initié la mise en exergue de phases où les interactions jouent en revanche un rôle crucial. Pour les supraconducteurs qualifiés maintenant de conventionnels, des couplages électron-phonon génèrent en effet une interaction effective attractive entre les électrons qui conduit à la condensation de paires de Cooper avec des températures critiques T_c de transition très basses $\left(T_c < 30K\right)$ à pression atmosphérique. Récemment, une phase supraconductrice a priori conventionnelle a également pu être obtenue pour des températures beaucoup plus élevées $T_c \sim 200\ K$ [Dro15] avec du sulfure d'hydrogène H_2S métallisé au travers d'une très forte pression $\left(P \approx 90\ GPa\right)$. Notons que le mécanisme microscopique sous-jacent à ce résultat spectaculaire reste toutefois débattu [Hir15]. A la fin des années 1970, un nouvel horizon est apparu en physique de la matière condensée avec la mise en évidence de la supraconductivité dans certains composés à fermions lourds [Ste79] ainsi que dans des conducteurs organiques [Jer80]. La remise en cause du scénario BCS s'est surtout imposée dès lors que G. Bednorz et K. Müller ont rapporté en 1986 l'existence d'un autre type de supraconducteurs non conventionnels dont la compréhension théorique reste aujourd'hui encore largement énigmatique. Leur température critique, qui peut atteindre environ $140K$ à pression ambiante, est anormalement élevée au regard de l'intensité des interactions électron-phonon. En outre, l'instabilité supraconductrice se développe à partir d'une phase normale qui ne s'apparente pas à un liquide de Fermi comme le requiert la théorie BCS. A ce jour, deux grandes familles de tels matériaux ont été essentiellement identifiées. La première rassemble des composés à base de fer appelés pnictures [Oza08]. Ils trouvent actuellement peu de réalisations pratiques en raison de leur découverte récente, mais aussi de leur faible température critique $\left(T_c \sim 55K\right)$ et de leur toxicité. La seconde classe de matériaux regroupe certains oxydes de cuivre désignés sous le terme générique de cuprates supraconducteurs et qui sont à l'origine de la découverte de Bednorz et Müller. Au cours des années, leur champ d'application s'est largement diversifié et touche à des domaines variés [Hot03] tels que l'imagerie médicale, la téléphonie ou encore le transport d'énergie comme l'illustre l'intégration de câbles géants supraconducteurs au sein de réseaux électriques [Mal07]. Du point de vue cristallographique, les cuprates supraconducteurs sont caractérisés par une structure lamellaire schématiquement représentée sur la Figure 1. Elle est constituée de plans CuO_2 au sein desquels les atomes de cuivre forment un réseau carré et les atomes d'oxygène se situent aux centres des paires d'atomes Cu les plus rapprochés. Ces plans sont alternés par d'autres couches comportant les éléments restants, dont l'oxygène excédentaire, qui agissent comme des réservoirs de charges en fournissant des porteurs (trous ou électrons) dans les couches CuO_2. En l'absence d'un tel

dopage, les cuprates exhibent un comportement isolant et antiferromagnétique au lieu de l'état métallique non magnétique prédit par la théorie des bandes. Ces matériaux entrent ainsi dans la catégorie des systèmes électroniques fortement corrélés. Au fur et à mesure que des trous sont introduits, les propriétés évoluent d'une région antiferromagnétique à un liquide de Fermi en passant par la supraconductivité non conventionnelle où les paires de Cooper sont de plus caractérisées par une fonction d'onde anisotrope de symétrie $d_{x^2-y^2}$ [Bra94, Sch94]. En fonction du dopage δ en trous, la température critique T_c présente de plus une forme caractéristique en dôme dans l'intervalle $0.05 \le \delta \le 0.3$ et autour d'un dopage optimal δ_{opt} de l'ordre de 1/6. A très basse température, la phase sous-dopée $\delta \le \delta_{opt}$ se singularise parfois en brisant la symétrie du réseau [Voj09], par exemple via des inhomogénéités sous forme de rubans de charge unidimensionnels séparés par des régions antiferromagnétiques (« stripes »). Dans une large gamme de températures $T > T_c$, les cuprates révèlent par ailleurs des propriétés métalliques étranges autour du dopage optimal : la résistivité dans les plans CuO_2 varie linéairement avec T et non T^2 comme dans le cadre des liquides de Fermi, la résistance de Hall R_H manifeste un comportement $R_H \sim 1/T$ à haute température et $R_H \sim T$ à basse température alors qu'elle est indépendante de T dans un métal classique, les quasiparticules ont un temps de vie très court, etc. Enfin, toujours dans la phase normale mais dans la région sous-dopée, on note l'émergence d'une ligne dite de pseudo-gap qui définit une échelle de température $T^* > T_c$ en dessous de laquelle une suppression partielle des excitations de basse énergie en spin et en charge est mise en évidence [Tim98]. Ces principaux résultats sont synthétisés sur le diagramme de phase schématique des cuprates supraconducteurs de la Figure 2.

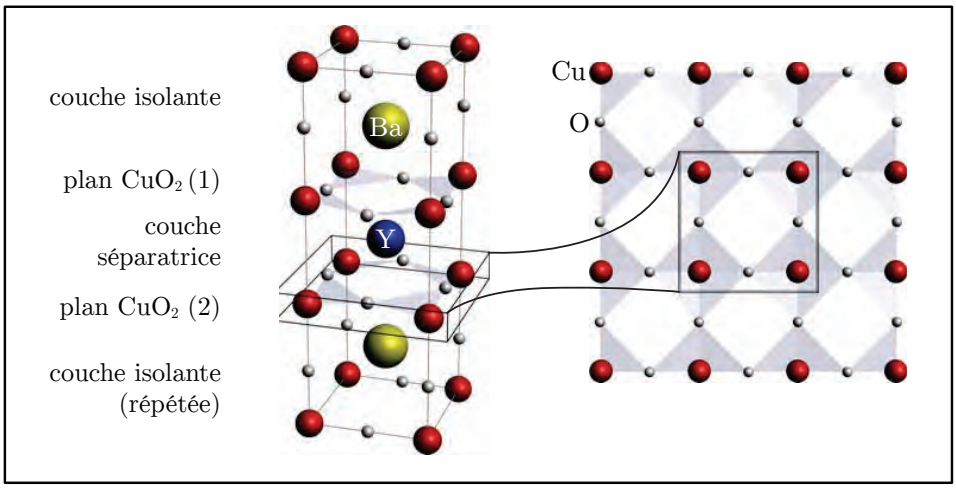


Figure 1 : Structure cristallographique typique des cuprates supraconducteurs. Le matériau considéré est précisément $YBa_2Cu_3O_7$ dont la maille élémentaire contient deux plans CuO_2 séparés par une couche d'Yttrium. Les paires de plans sont séparées par du Barium, de l'oxygène et des chaînes CuO.

Il n'est pas actuellement envisageable de pouvoir appréhender les propriétés des matériaux à fortes corrélations électroniques au travers de la diagonalisation exacte d'un Hamiltonien réaliste défini en termes de toutes les orbitales mises en jeu. Le recours à des modèles effectifs réduits aux degrés de liberté les plus essentiels, afin de pouvoir tout de même conduire à un contenu physique pertinent, est donc incontournable. Dans un article fondateur [And87], P. W. Anderson suggéra d'utiliser le modèle de Hubbard en géométrie

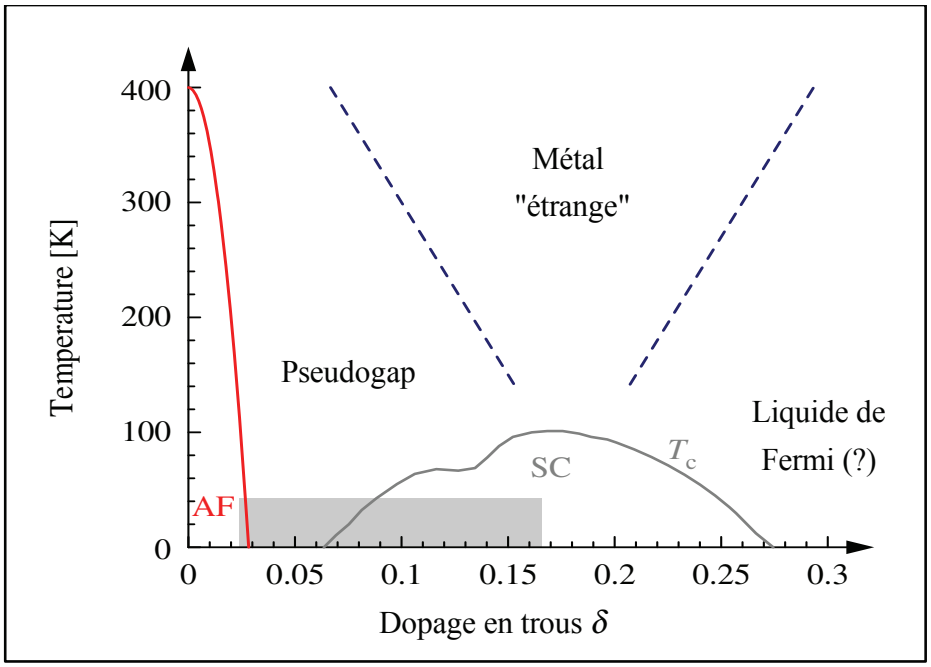


Figure 2 : Diagramme de phase générique des cuprates supraconducteurs. « AF » et « SC » désignent respectivement les phases antiferromagnétique et supraconductrice en onde *d*. La zone grisée rassemble les phases brisant les symétries du réseau. Extrait de la référence [Voj09].

bidimensionelle pour décrire approximativement le comportement des électrons en interaction dans les plans CuO_2 des cuprates. La démarche a par la suite été plus formellement justifiée à partir des états électroniques actifs $3d_{x^2-y^2}$ du cuivre et $2p_x$, $2p_y$ des atomes d'oxygène [Zha88, Rai96, Pav01]. Introduit simultanément en 1963 par J. Hubbard [Hub63], M. C. Gutzwiller [Gut63] et J. Kanamori [Kan63], ce modèle est l'un des plus simples et des plus couramment utilisés pour étudier les propriétés génériques de fermions de spin 1/2 se déplaçant par sauts sur un réseau et expérimentant une interaction locale à deux corps. Dans le langage de la seconde quantification, son Hamiltonien s'écrit de la manière suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_U = -t \sum_{\substack{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle \\ \sigma=\uparrow,\downarrow}} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}'\sigma} + U \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}\uparrow} \hat{n}_{\vec{r}\downarrow}$$

où $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$, $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}$ et $\hat{n}_{\vec{r}\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}\sigma}$ sont respectivement les opérateurs de création, d'annihilation et de nombre d'électrons dans un état de Wannier centré sur le site $\vec{r}$ avec le spin $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$. Le terme d'énergie cinétique $\hat{H}_t$ se limite ici à une contribution de sauts entre sites contigus $\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle$ avec une amplitude de probabilité $t > 0$. Cette restriction ne se justifie que dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes où les fonctions de Wannier s'identifient quasiment aux orbitales atomiques et ont ainsi un recouvrement d'autant plus négligeable que les sites sont éloignés. Notons que pour les cuprates, il est communément admis de devoir étendre les sauts au moins jusqu'aux seconds plus proches voisins (avec une amplitude de transfert t'). D'une manière générale, la contribution cinétique $\hat{H}_t$ tend à délocaliser les électrons sur l'ensemble du réseau. Sa diagonalisation est immédiate en passant dans l'espace

réciproque : $\hat{H}_t = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}$ où $\varepsilon_{\vec{k}} = -2t\left[\cos\left(k_x a\right) + \cos\left(k_y a\right)\right]$ est la relation de dispersion pour un réseau carré de pas a et $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_{\vec{r}}}} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$ l'opérateur de création d'un électron de spin σ avec le vecteur d'onde $\vec{k}$ de la première zone de Brillouin ($N_{\vec{r}}$ étant le nombre total de sites du cluster). L'état fondamental de $\hat{H}_t$ est donc simplement un produit antisymétrisé d'états à une particule ayant la forme d'ondes planes. Au contraire, le terme d'interaction $\hat{H}_U$ localise les électrons. Pour $U > 0$, il représente une répulsion coulombienne fortement écrantée par les électrons des couches internes et par conséquent réduite à ne se manifester que pour deux particules occupant un même site. On peut très aisément se convaincre qu'en dépit de son caractère élémentaire, cette interaction peut bien induire des corrélations électroniques, au moins dans le canal magnétique. Considérons en effet simplement un système de deux électrons pouvant se répartir sur des sites $\vec{r}, \vec{r}'$ adjacents. Dans la limite atomique $t = 0$, l'état fondamental correspond à un électron sur chaque site. Pour $t \ll U$ et avec des spins parallèles, aucun d'eux ne peut gagner de l'énergie cinétique par saut sur l'autre site en raison du principe de Pauli. Les configurations à spins anti-parallèles sont donc énergétiquement favorisées dans le régime de fort couplage $t \ll U$, ce que confirme la théorie des perturbations en montrant l'émergence d'une interaction effective de type Heisenberg $J\, \hat{\vec{S}}_{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{S}}_{\vec{r}'}$ entre les spins locaux avec un couplage antiferromagnétique $J = 4t^2/U$. En outre, l'état fondamental est l'état singulet de spin dans lequel les deux électrons sont bien corrélés.

Outre les cuprates supraconducteurs dont il fournit a priori une description minimale, le modèle de Hubbard est aussi en mesure de capturer la physique en plein essor des gaz atomiques dans des réseaux optiques [Hof02]. Ces systèmes offrent de plus une versatilité et un degré de contrôle inégalés qui permettent de les considérer comme de potentiels candidats pour réaliser une émulation quantique de l'Hamiltonien au sens proposé par R. Feynman [Fey82]. Le principe repose sur la superposition d'ondes laser stationnaires dans des directions mutuellement orthogonales pour créer un potentiel périodique $V(\vec{r}) = V_0\left(\sin^2(kx) + \sin^2(ky) + \sin^2(kz)\right)$ formé de puits au fond desquels les atomes oscillent avec la pulsation $\omega = k\sqrt{2V_0/m}$ (m étant la masse des atomes, V_0 l'intensité du laser et k son nombre d'onde). La Figure 3 en donne une représentation schématique à deux dimensions. Pour des énergies d'agitation thermique et d'interaction interatomique faibles devant $\hbar\omega$, il est alors légitime de restreindre la description à l'état fondamental dans chaque puits. En outre, les processus d'interaction entre les atomes à basse énergie se réduisent à des collisions en onde s uniquement caractérisées par la longueur de diffusion a_s. Précisons que la technique des résonances de Feshbach [Ino98, Chi10] permet d'ajuster ce paramètre à une valeur positive ou négative dans un large intervalle. Dans la limite où a_s ne dépasse pas l'extension spatiale d'un puits, les interactions binaires peuvent au final se modéliser par un pseudopotentiel de contact et le modèle de Hubbard à une bande est ainsi immédiatement retrouvé. L'amplitude de saut t par effet tunnel entre puits adjacents est de plus contrôlée par la profondeur V_0 du réseau optique et l'interaction sur site U est proportionnelle à la longueur de diffusion [Jac98, Zwe03] :

$$t = 4E_R \xi^3 \mathrm{e}^{-2\xi^2}/\sqrt{\pi}\ ,\ U = E_R k a_s \xi^3 \sqrt{8/\pi}$$

où $\xi = (V_0/E_R)^{1/4}$, $E_R = \hbar^2 k^2/2m$ étant l'énergie de recul. En changeant seulement V_0, il est donc possible de faire varier de manière importante le rapport U/t et d'accéder à des phases fortement corrélées. Pour des bosons, une telle démarche a par exemple permis d'observer la transition d'un condensat vers un état de Mott sous l'effet des interactions [Gre02]. Avec des ondes laser d'intensités différentes, le couplage tunnel dans une ou deux directions peut également être gelé pour changer la dimensionnalité du réseau. Différents protocoles ont enfin permis d'accéder à des réseaux de géométrie plus complexe, comme ceux de Kagome [Jo12] ou en nid d'abeille [Tar12].

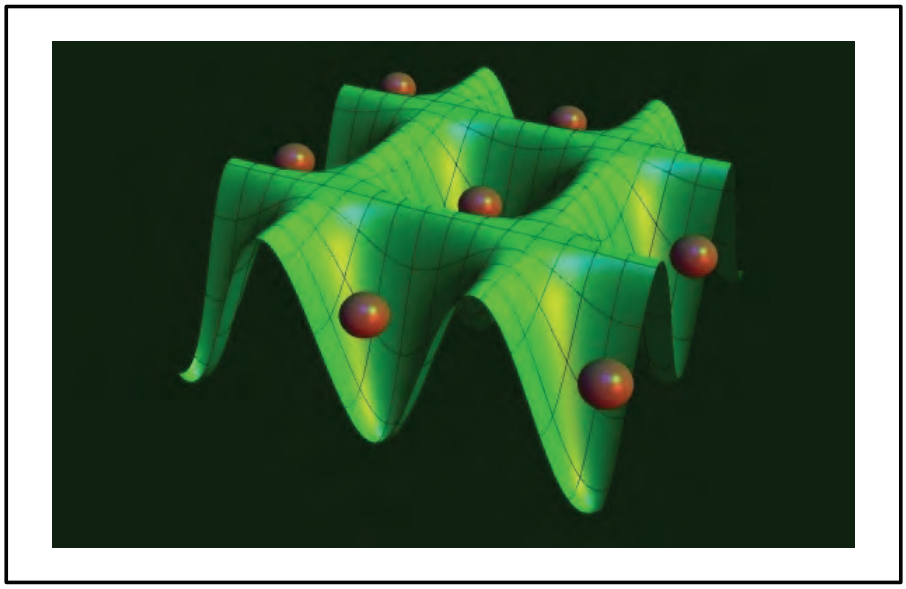


Figure 3 : Représentation schématique d'un réseau optique bidimensionnel.

Avec des vapeurs fermioniques, de premiers résultats expérimentaux marquants ont été rapportés telles que la visualisation directe des surfaces de Fermi en l'absence d'interactions [Khö05] ou l'obtention d'une phase superfluide dans un régime attractif de fort couplage. Pour des interactions répulsives, l'isolant de Mott au demi-remplissage a été réalisé [Jör08] et des corrélations antiferromagnétiques de courte portée ont été très récemment observées au dessus de la température de Néel [Har15]. Signalons qu'un schéma de préparation et de détection d'une phase superfluide non conventionnelle en onde *d* a aussi été proposé [Rey09].

Malgré une apparente simplicité, il n'existe de solution exacte pour le modèle de Hubbard que pour une chaîne en utilisant l'ansatz de Bethe [Lie68], ou dans le cadre d'un réseau de connectivité infinie [Met89]. L'alternative numérique la plus évidente repose a priori sur une diagonalisation exacte de l'Hamiltonien, mais elle se heurte à une croissance exponentielle de la dimension de l'espace des états (typiquement [(1)] en $4^{N_{\vec{r}}}/N_{\vec{r}}$ pour un système demi-rempli dans la limite d'un grand nombre $N_{\vec{r}}$ de sites). Seuls de petits clusters

[(1)] Pour chaque projection $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$ du spin, il y a en effet $C_{N_{\vec{r}}}^{N_\sigma} = \dfrac{N_{\vec{r}}!}{N_\sigma!(N_{\vec{r}} - N_\sigma)!}$ possibilités de répartir un nombre N_σ donné de fermions sur les $N_{\vec{r}}$ sites considérés. En conséquence, la dimension exacte de l'espace de Hilbert est $D = C_{N_{\vec{r}}}^{N_\uparrow} C_{N_{\vec{r}}}^{N_\downarrow}$, c'est-à-dire $D = (N_{\vec{r}}!)^2 \big/ \left((N_{\vec{r}}/2)!\right)^4$ au demi remplissage. L'approximation de Stirling conduit alors immédiatement à l'expression donnée.

constitués d'une vingtaine de sites, peuvent ainsi être appréhendés avec les ressources informatiques actuelles. Afin de contourner cette complexité, caractéristique de tous les problèmes quantiques à $N-$corps, de multiples schémas d'approximations ont été développés au cours des dernières décennies. Très schématiquement, ils peuvent se classer en deux catégories selon que l'on cherche soit à caractériser l'état fondamental du modèle de Hubbard au travers de ses excitations encodées dans la fonction de Green, soit à directement reconstruire sa fonction d'onde. Dans la limite de couplage faible, où la répulsion U sur site est petite devant la largeur de bande, les approches perturbatives sont justifiées tout comme celles de champ moyen Hartree-Fock que nous détaillerons dans le premier chapitre. Les modes collectifs ainsi que les différents canaux dans lesquels des instabilités se développent peuvent aussi être appréhendés par l'approximation Random Phase Approximation (RPA). Le groupe de renormalisation fonctionnelle [Hal00, Met12] et l'approche auto-cohérente à deux particules (TPSC) [Vil94, Vil97] poursuivent ce même objectif tout en offrant la possibilité d'initier l'étude des régimes d'interactions intermédiaires. Signalons que la méthode TPSC corrige certaines violations du principe de Pauli inhérentes à la RPA et s'avère particulièrement adaptée aux systèmes bidimensionnels en respectant le théorème de Mermin-Wagner. Pour de forts couplages U/t, un développement perturbatif autour de la limite atomique $t=0$ peut être envisagé [Pai98] même s'il est rendu délicat par la forme quartique dans les opérateurs de fermions de l'Hamiltonien non perturbé $\hat{H}_U$ qui invalide les règles de Feymann. Les phases fortement corrélées du modèle de Hubbard répulsif sont aussi traditionnellement étudiées via des approches variationnelles à l'aide de fonctions d'onde de Gutzwiller qui visent à éliminer totalement ou partiellement les sites doublement occupés à partir d'un état de référence de type Hartree-Fock ou BCS [Gut63, Ede07]. A ce jour, il demeure néanmoins nécessaire de privilégier des corrélations spécifiques dans les canaux de charge, de spin et/ou supraconducteurs en sélectionnant au préalable les paramètres d'ordre jugés pertinents. Au final, plusieurs méthodes théoriques peuvent a priori s'adresser à tous les régimes d'interaction. Par exemple, les techniques de bosons esclaves [Kot86, Fre92] offrent un cadre original pour traiter la répulsion coulombienne en élargissant l'espace de Hilbert via l'introduction de degrés de liberté bosoniques supplémentaires. Dans la version introduite par G. Kotliar et A. Ruckenstein, il s'agit précisément d'assigner un boson auxiliaire par site et par nombre d'occupation. L'Hamiltonien est alors traité au travers d'une approximation de champ moyen pour ces bosons, avec des contraintes pour éliminer les états non physiques. Au cours des vingt dernières années, la théorie de champ moyen dynamique (DMFT) s'est aussi imposée comme un des cadres théoriques de référence pour élucider les propriétés à basse énergie du modèle de Hubbard. Son principe directeur se fonde sur une reformulation du problème, exacte dans la limite d'une coordination infinie, en terme d'un unique site plongé dans un bain auto-cohérent avec lequel il peut échanger des électrons [Met89]. Cette approche s'est en particulier illustrée pour la compréhension détaillée de la transition métal-isolant de Mott qu'elle a fournie [Geo96, Bul01]. En dimensionnalité réduite, la méthode DMFT devient approximative et ne traite exactement que la dynamique locale, les corrélations spatiales étant systématiquement éliminées de la description. Elle a par conséquent été généralisée via un amas de quelques sites couplé de manière auto-cohérente à son environnement pour prendre en compte les corrélations de portée finie [Het98, Kot01]. Avec un cluster 2×2, une telle technique conduit pour le modèle de Hubbard répulsif en dimension deux à un diagramme de phase exhibant une région antiferromagnétique au voisinage du demi-remplissage et un dôme supraconducteur en onde $d_{x^2-y^2}$ [Lic00, Mai00]. Signalons que le champ moyen dynamique cellulaire apparaît aussi comme limite d'une stratégie variationnelle en clusters plus générale basée sur une fonctionnelle de self-énergie [Pot03] et dont un autre cas particulier est la théorie des perturbations inter-amas [Sen00]. Celle-ci consiste plus précisément à représenter

le réseau comme une superposition de petites cellules au sein desquelles l'Hamiltonien peut être exactement diagonalisé et qui sont couplées entre elles par des termes de saut traités en revanche perturbativement. De nouveau, une compétition entre antiferromagnétisme et supraconductivité non conventionnelle en géométrie bidimensionnelle a ainsi été obtenue [Sen05]. Finalement, les simulations Monte-Carlo quantiques (QMC) offrent une alternative attrayante en permettant en principe d'accéder à l'état exact à température nulle ou finie au travers d'un échantillonnage stochastique de la base des fonctions d'onde ou des matrices densités à particules indépendantes [Hir85, Whi89]. Dans le régime répulsif dopé en trous, elles sont cependant contaminées par l'émergence de réalisations qui se compensent mutuellement et dégradent fortement le rapport signal sur bruit. Ce célèbre problème du signe ne peut alors être contourné qu'au prix d'approximations [An91, Zha95] nécessitant le recours à un état d'essai qui biaise nécessairement la description.

Le travail présenté ici se concentre sur un nouveau schéma d'approximation susceptible de pouvoir entrelacer au sein d'une unique fonction d'onde les différentes corrélations exhibées à basse énergie par l'Hamiltonien de Hubbard répulsif. Il se singularise ainsi des méthodes variationnelles usuelles qui privilégient le scénario d'une compétition entre ces corrélations en les imposant séparément dans différents ansätze dont les énergies sont comparées. L'approche repose sur une extension des théories de champ moyen statique par une projection avant variation sur un secteur de symétrie de l'Hamiltonien. Cette technique garantit à l'état d'essai de s'écrire sous la forme d'une superposition de fonctions d'onde à particules indépendantes, qui est requise pour pouvoir absorber des corrélations. Le premier chapitre détaille la démarche et l'illustre pour de petits amas, après avoir revu les principaux traitements de champ moyen statique pour le modèle de Hubbard. Les stratégies de reconstruction de l'état fondamental par développement dans une base d'états généraux de champ moyen, à symétries restaurées et optimisés pour minimiser l'énergie, sont ensuite décrites dans le second chapitre. Une attention particulière est portée à l'inclusion de fonctions d'onde de Bogoliubov-de Gennes pour enrichir la description. En effet, leur prise en compte n'avait pas été jusqu'alors retenue dans de telles méthodes et elle constitue l'objectif central assigné dans cette thèse. Le schéma ainsi mis en place est finalement testé dans le chapitre 3 puis systématiquement appliqué dans une géométrie en forme d'échelle à quatre montants qui constitue une première étape dans la transition dimensionnelle entre la chaîne analytiquement soluble et le réseau carré encore largement inconnu. Cette configuration présente en outre l'intérêt d'être expérimentalement accessible avec des fermions froids à partir des réseaux de plaquettes optiques récemment créés [Nas12]. Nous montrons que le diagramme des phases dans le plan interaction U/t – dopage δ en trous manifeste bien un entrelacement des degrés de liberté de charge, de spin et de paires en onde *d*.

Références

[An91] G. An and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. B* **44**, 9410 (1991).

[And87] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).

[Bed86] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).

[Bra94] D. A. Brawner and H. R. Ott, *Phys. Rev. B* **50**, 6530 (R) (1994).

[Bul01] R. Bulla, T. A. Costi and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B*. **64**, 045103 (2001).

[Chi10] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne and E. Tiesinga, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1225 (2010).

[Dro15] A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov and S. I. Shylin, *Nature* **525** , 73 (2015).

[Ede07] B. Eddeger, V. N. Muthukumar and C. Gros, *Adv. Phys.* **56**, 927 (2007).

[Fey82] R. Feynman, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).

[Fre92] R. Frésard and P. Wölfle, *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 685 (1992).

[Geo96] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).

[Gre02] M. Greiner, O. Mandel, T. Hänsch and I. Bloch, *Nature* **419**, 51 (2002).

[Gut63] M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).

[Hal00] C. J. Halboth and W. Metzner, *Phys. Rev. B* **61**, 7364 (2000).

[Har15] R. A. Hart R A, P. M. Duarte, T. L. Yang, X. Liu, T. Paiva, E. Khatami, R. T. Scalettar, N. Trivedi, D. A. Huse and R. G. Hulet, *Nature* **519**, 211 (2015).

[Het98] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke and H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B* **58**, R7475 (R) (1998).

[Hir15] J. E. Hirsch and F. Marsiglio, *Physica C* **511**, 45 (2015).

[Hir85] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).

[Hof02] W. Hofstetter, J. I. Cirac, P.Zoller, E. Demler and M. D. Lukin, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 220407 (2002).

[Hot03] R. Hott, *High Temperature Superconductivity 2 - Engineering Applications*, 35, edited by A. V. Narlikar, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg (2004).

[Hub63] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London A* **276,** 238 (1963).

[Ino98] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn and W. Ketterle, *Nature* **392**, 151 (1998).

[Jak98] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).

[Jer80] D. Jerome, A. Mazaud, M. Ribault and K. Bechgaard, *J. Phys. Lett. (Paris)* **41**, L95 (1980).

[Jo12] G.-B. Jo, J. Guzman, C. K. Thomas, P. Hosur, A. Vishwanath and D. M. Stamper-Kurn, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 045305 (2012).

[Jör08] R. Jördens, N. Strohmaier, K. Günter, H. Moritz and T. Esslinger, *Nature* **455**, 204 (2008).

[Kan63] J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)* **30,** 275 (1963).

[Khö05] M. Khöl, H. Moritz, T. Stöferle, K. Günter and T. Esslinger, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 080403 (2005).

[Kot01] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001).

[Kot86] G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).

[Lic00] A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **62**, R9283(R) (2000).

[Lie68] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20,** 1445 (1968).

[Mai00] T. Maier, M. Jarrell, Th. Pruschke and J. Keller, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1524 (2000).

[Mal07] A. P. Malozemoff, *Nature Materials* **6**, 617 - 619 (2007).

[Met12] W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp, V. Meden V and J. Schönhammer, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 299 (2012).

[Met89] W. Metzner and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).

[Nas12] S. Nascimbène, Y. A. Chen, M. Atala, M. Aidelsburger, S. Trotzky, B. Paredes and I. Bloch, *Phys*. *Rev*. *Lett*. **108**, 205301 (2012).

[Oza08] T. C. Ozawa and S. M. Kauzlarich, *Sci. Technol. Adv. Matter.* **9**, 033003 (2008).

[Pai98] S. Pairault, D. Sénéchal and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5389 (1998).

[Pav01] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen and O. K. Andersen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047003 (2001).

[Pot03] M. Potthoff, M. Aichorn and C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 206402 (2003).

[Rai96] R. Raimondi, J. H. Jefferson and L. F. Feiner, *Phys. Rev. B* **53**, 8774 (1996).

[Rey09] A. M. Rey, R. Sensarma1, S. Folling , M. Greiner, E. Demler and M. D. Lukin, *Europhys. Lett.* **87**, 60001 (2009).

[Sch94] J. Schrieffer, *Solid State Commun.* **92**, 129 (1994).

[Sen00] D. Sénéchal, D. Perez and M. Prioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).

[Sen05] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 156404 (2005).

[Sen12] D. Sénéchal, *Strongly correlated systems*, Springer Series in Solid-State Sciences **171**, 341, edited by A. Avella and F. Mancini, Springer-Verlag Berlin-Heidelberg (2012).

[Ste79] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz and H. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892 (1979).

[Tar12] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu and T. Esslinger, *Nature* **483**, 302 (2012).

[Tim98] T. Timusk and B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 61 (1999).

[Vil94] Y. M. Vilk, L. Chen and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*. **49**, 13267 (R) (1994).

[Vil97] Y. M. Vilk and A.-M. S. Tremblay, *J. Phys. I (France)* **7**, 1309 (1997).

[Voj09] M. Vojta, *Adv. Phys.* **58**, 699 (2009).

[Vol12] D. Vollhardt, K. Byczuk and M. Kollar, *Strongly correlated systems*, Springer Series in Solid-State Sciences **171**, 203, edited by A. Avella and F. Mancini, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2012).

[Whi89] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar, *Phys. Rev. B*. **40**, 506 (1989).

[Zha88] F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).

[Zha95] S. Zhang, J. Carlson and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3652 (1995).

[Zwe03] W. Zwerger, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **5**, S9 (2003).

Chapitre 1

Du champ moyen aux approches à symétries restaurées

Nous présentons dans ce chapitre les approximations de champ moyen statique généralement employées pour traiter le modèle de Hubbard en régime répulsif. La méthode Hartree-Fock, reposant sur une description effective à particules indépendantes, est ainsi brièvement rappelée. Nous introduisons ensuite son extension dans les régimes de fort couplage qui se fonde sur un traitement perturbatif de l'Hamiltonien vis-à-vis des termes de saut suivi d'une renormalisation des principales contributions obtenues par l'approximation de Gutzwiller. Les principaux ordres magnétiques, de charge ou supraconducteurs qui sont issus de tels traitements sont également sommairement décrits. Bien entendu, la littérature dédiée ces dernières décennies au modèle de Hubbard bidimensionnel est extrêmement riche. Il ne s'agit pas ici d'examiner l'ensemble des schémas d'approximation et des phases qui y ont été proposées mais plutôt de se focaliser sur des exemples représentatifs nous permettant d'introduire les outils et les notions nécessaires pour la suite.

Enfin, nous initions la mise en place de l'approche variationnelle au cœur du manuscrit. Elle vise à reconstruire progressivement l'état fondamental du modèle de Hubbard dans une base d'états de champ moyen à symétries restaurées et qui sont optimisés pour minimiser l'énergie. Dans un premier temps, seuls des amas à deux et quatre sites seront considérés avec une valeur arbitraire de l'interaction sur site afin de tester analytiquement la méthode au regard des solutions exactes qui peuvent alors être aisément obtenues.

I. Les approximations de champ moyen Hartree-Fock

La méthode Hartree-Fock (HF) est le paradigme le plus simple pour décrire un système de fermions en interaction. Elle a souvent livré les fondements pour une compréhension qualitative de nombreux systèmes en physique de la matière condensée. Dans le cadre du modèle de Hubbard, elle peut être introduite au travers d'une linéarisation des couplages sur site pour conduire à un Hamiltonien effectif à un corps $\hat{\mathcal{H}}$ qui est synonyme d'un état fondamental approximé par une fonction d'onde à particules indépendantes, c'est-à-dire de type $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \prod_{n=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{\phi_n} \left|\ \right\rangle$ où les vecteurs orthonormés $\left|\phi_1\right\rangle,\cdots,\left|\phi_N\right\rangle$ désignent les états individuels occupés. Dans sa version la plus élémentaire, le champ moyen HF requiert plus précisément de négliger les contributions du second ordre dans les fluctuations $\delta\hat{n}_{\vec{r}\sigma} = \hat{n}_{\vec{r}\sigma} - \left\langle \hat{n}_{\vec{r}\sigma} \right\rangle$ des nombres d'occupation de chaque site autour de leur valeur moyenne. Ainsi,

$$\hat{H} \to \hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}'\sigma} + U \sum_{\vec{r}\sigma} \left(\hat{n}_{\vec{r}\sigma} \left\langle \hat{n}_{\vec{r}\bar{\sigma}} \right\rangle - \frac{1}{2} \left\langle \hat{n}_{\vec{r}\sigma} \right\rangle \left\langle \hat{n}_{\vec{r}\bar{\sigma}} \right\rangle \right). \quad (1)$$

La recherche d'une solution est alors menée au travers d'une procédure auto-cohérente dans laquelle $\hat{\mathcal{H}}$ est tout d'abord construit à partir de valeurs moyennes $\left\langle \hat{n}_{\vec{r}\bar{\sigma}} \right\rangle$ dans un déterminant

de Slater $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ d'essai. Par diagonalisation de la matrice associée dans l'espace à un corps, les états propres associés aux valeurs propres les plus basses sont ensuite retenus pour raffiner la fonction d'onde $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ et la démarche est itérée jusqu'à atteindre la convergence. Notons qu'avec l'Hamiltonien Hartree-Fock Eq. (1), chaque état individuel peuplé $\left|\phi_n\right\rangle$ est associé à un spin bien défini dans la direction Oz. En outre, la procédure revêt un caractère optimal dans la mesure où elle correspond aussi à la solution variationnelle obtenue en minimisant l'énergie moyenne du modèle de Hubbard dans un ansatz factorisé en un produit de déterminants de Slater attachés à chaque canal « up » et « down » de spin.

En général, la présence de multiples minima locaux dans la fonctionnelle d'énergie complique considérablement la détermination de l'état fondamental à l'approximation HF. En conséquence, on se limite souvent à comparer les énergies de différentes phases dont les ordres sont intuités et décrits à l'aide de quelques paramètres. Par exemple, la recherche d'une solution HF de type antiferromagnétique consistera à poser $\left\langle \hat{n}_{\vec{r}\uparrow}\right\rangle = \left(n + m(-1)^{x+y}\right)/2$, $\left\langle \hat{n}_{\vec{r}\downarrow}\right\rangle = \left(n - m(-1)^{x+y}\right)/2$ où n est la densité totale et m l'aimantation alternée par site. A notre connaissance, une telle démarche a été initiée pour le modèle de Hubbard par D.R. Penn sur un réseau cubique [Pen66], puis reprise par J. E. Hirsch en géométrie bidimensionnelle [Hir85]. Récemment, la minimisation de l'énergie a pu être réalisée en s'affranchissant d'états individuels construits pour exhiber un ordre prédéfini dans le déterminant de Slater approximant l'état fondamental [Xu11]. Le diagramme de phase HF ainsi obtenu pour un réseau carré est synthétisé sur la Figure 1.

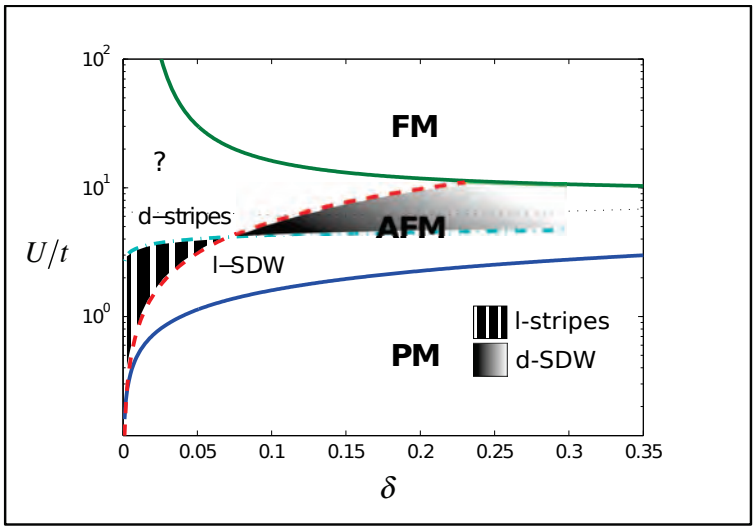


Figure 1 : Diagramme de phase à l'approximation Hartree-Fock pour le modèle de Hubbard en régime répulsif sur un cluster carré dans le plan interaction U/t - dopage δ en trous. Les acronymes « PM », « AFM » et « FM » se réfèrent respectivement à des états paramagnétiques, antiferromagnétiques et ferromagnétiques. « l-SDW » (resp. « d-SDW ») désigne des ondes de densité de spin se développant dans une direction verticale (resp. diagonale). Il en est de même pour les phases inhomogènes « l-stripes » (resp. « d-stripes ») pour laquelle les trous sont organisés sous forme de rayures verticales (resp. diagonales). Reproduit de la référence [Xu11].

Au demi-remplissage, le traitement HF prédit correctement un état fondamental antiferromagnétique (AFM) quelle que soit l'interaction $U > 0$, même si le paramètre d'ordre est surestimé au regard des résultats exacts obtenus par simulations Monte-Carlo quantiques [Hir85]. Dans le régime dopé en trous, la mise en ordre des moments magnétiques ne s'amorce en revanche que pour des couplages U/t suffisamment importants, la valeur critique augmentant avec le dopage. Les simulations HF privilégient alors l'émergence d'ondes de densité de spin (SDW) dans lesquelles l'aimantation alternée oscille dans une direction donnée, les trous étant délocalisés sur l'ensemble du réseau. Cette phase est schématisée sur la Figure 2.

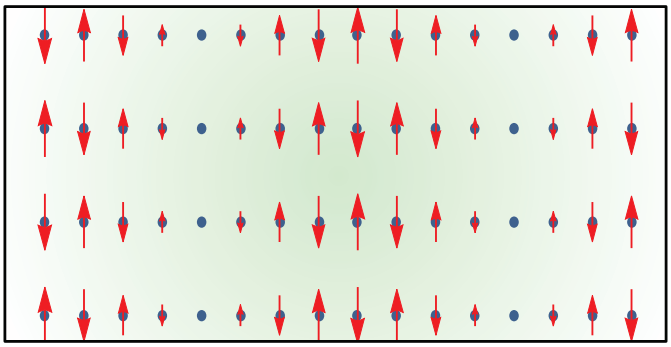


Figure 2 : Onde de densité de spin de longueur d'onde $\lambda_{spin} = 16$ (en unité de pas de réseau) le long de l'axe Ox.

Avec une répulsion sur site encore accrue, l'approximation HF conduit au développement d'inhomogénéités sous forme de rayures qui coïncident avec les parois des domaines magnétiques définis par l'onde de densité de spin. Ces « stripes » correspondent donc à une localisation des trous le long d'un axe (horizontal, vertical ou diagonal) dans un fond antiferromagnétique. Elles sont souvent trouvées comme étant remplies ou demi-remplies : le premier cas se traduit par un trou sur chaque site de la rayure tandis que le second indique la présence d'un demi-trou par site en moyenne [Zaa96]. Par ailleurs, les domaines magnétiques de part et d'autre d'une paroi diffèrent en général par le retournement de tous leurs spins, comme montré sur la Figure 3. Les ondes de densité de charge et de spin sont donc entrelacées et leur longueur d'onde respective satisfont la relation $\lambda_{spin} = 2\lambda_{charge}$. Néanmoins, signalons que des « stripes » caractérisées par la répétition du même domaine peuvent également être stabilisées et dans ce cas $\lambda_{spin} = \lambda_{charge}$.

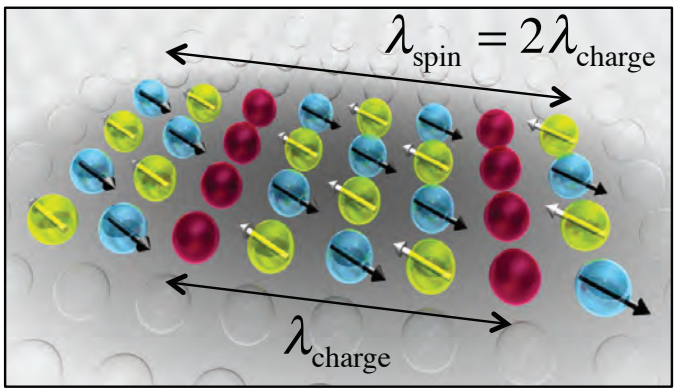


Figure 3 : Représentation schématique de « stripes » antiferromagnétiques verticales de périodes $\lambda_{charge} = 4$ en charge et $\lambda_{spin} = 8$ en spin.

Même si le scénario d'un état fondamental exhibant des ondes de densité de spin ou des « stripes » pour des interactions intermédiaires et fortes se trouve conforté par certaines simulations Monte-Carlo quantiques approchées [Cha10], plusieurs autres phases ont également été identifiées à l'approximation HF. Par exemple, des polarons magnétiques ont été mis en évidence pour de larges valeurs du rapport U/t [Su88, Ver91] : il s'agit sommairement de configurations globalement antiferromagnétiques mais avec des défauts en forme de « bulles » au sein desquelles les spins sont alignés et où les trous se localisent. Par ailleurs, en étendant l'approche de champ moyen pour que les directions des spins ne soient plus contraintes selon Oz mais variationnellement optimisées, le diagramme de phase précédent Fig. 1 est susceptible de se modifier. Concrètement, il suffit de minimiser l'énergie moyenne du modèle de Hubbard dans un déterminant de Slater $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ construit à partir d'états individuels n'ayant plus une composante du spin selon Oz bien définie. L'Hamiltonien effectif à un corps $\hat{\mathcal{H}}$, dont la fonction d'onde $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ doit être vecteur propre, couple alors les deux projections « up » et « down » du spin. En conséquence, la solution du problème auto-cohérent peut maintenant stabiliser des phases exotiques où les spins ne sont pas nécessairement colinéaires. Par exemple, des vortex ont ainsi été obtenus : ils sont caractérisés par des trous localisés et par une aimantation alternée qui tourne autour d'eux. Il a aussi été montré récemment que des ordres magnétiques en forme de spirales pouvaient émerger de telles optimisations [Gou14], conformément aux travaux menés précédemment sur cette thématique [Pen66, Dzi92]. Il s'agit précisément d'une configuration où les spins moyens sont coplanaires, de norme constante et orientés dans une direction variant régulièrement d'un même angle le long d'un axe donné, comme illustré sur la Figure 4.

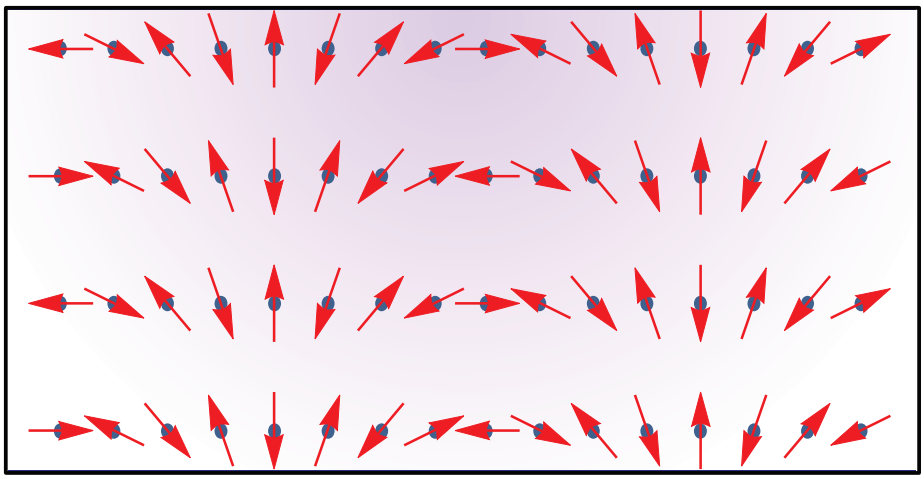


Figure 4 : Phase spirale de longueur d'onde $\lambda_{spin} = 16$ dans la direction Ox.

Enfin, pour de très fortes interactions, la méthode HF suggère une phase ferromagnétique (FM). Sa validité n'est rigoureusement prouvée que dans la limite d'un unique trou et d'un couplage U/t infini via le théorème de Y. Nagaoka [Nag66]. Au travers de diagonalisations exactes pour de petits clusters [Rie89], de traitements Monte-Carlo quantiques approchés [Car11] ou de simulations DMRG [Liu12], plusieurs travaux tendent toutefois également à valider l'émergence d'un ordre ferromagnétique avec une concentration finie de trous et $U = \infty$ dans une région du diagramme de phase proche du demi-remplissage.

II. Les approximations de champ moyen « renormalisé » : premiers pas vers la supraconductivité non conventionnelle

Dans le régime de couplage fort, l'utilisation d'une transformation canonique de Schrieffer-Wolff permet de déterminer systématiquement les opérateurs pertinents ainsi que leurs constantes de couplage à l'ordre p désiré en $t.(t/U)^p$. Le modèle $t-J$ est probablement le plus répandu des modèles effectifs ainsi obtenus à partir de l'Hamiltonien de Hubbard. Il se limite à l'ordre $p=1$ et s'écrit [Har67, Spa77, Cha78, Spa88], *dans le sous-espace des états sans double occupation*, comme :

$$\hat{H}^{(t-J)} = -t \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}'\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle} \left(\hat{\vec{S}}_{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{S}}_{\vec{r}'} - \frac{1}{4} \hat{n}_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}'} \right) \tag{2}$$

où $\hat{\vec{S}}_{\vec{r}} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \vec{\tau}_{\sigma,\sigma'} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}\sigma'}$ et $\hat{n}_{\vec{r}} = \hat{n}_{\vec{r}\uparrow} + \hat{n}_{\vec{r}\downarrow}$ désignent respectivement l'observable de spin et celle de densité locale au site $\vec{r}$ du réseau, les composantes du vecteur $\vec{\tau}$ représentant les matrices de Pauli. Enfin, $J = 4t^2/U$ est la constante de couplage entre les spins attachés à deux sites adjacents. Notons que les couples $\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle$ et $\langle \vec{r}',\vec{r} \rangle$ doivent être considérés comme distincts dans l'expression Eq. (2) pour garantir l'hermiticité du terme de sauts. Au demi-remplissage, l'Hamiltonien Eq. (2) se réduit donc à celui de Heisenberg avec un super-échange $J>0$ qui explique ainsi l'ordre antiferromagnétique. En outre, $\hat{H}^{(t-J)}$ peut être réécrit pour exhiber une interaction attractive entre des paires singulets de spin $\hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}'} = \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}'\downarrow} - \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\downarrow} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}'\uparrow}$ se formant sur les liaisons entre deux sites $\vec{r}$ et $\vec{r}'$ plus proches voisins :

$$\frac{J}{2} \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle} \left(\hat{\vec{S}}_{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{S}}_{\vec{r}'} - \frac{1}{4} \hat{n}_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}'} \right) = -\frac{J}{4} \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle} \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}'} \hat{\Delta}_{\vec{r},\vec{r}'} \tag{3}$$

La condensation de ces paires pour conduire à un comportement supraconducteur peut alors être envisagée en privilégiant les canaux associés à la superposition des paires $\hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}\pm\vec{u}_x}$ et $\hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}\pm\vec{u}_y}$ dans les deux directions du réseau :

$$\begin{cases} \hat{\Delta}^{\dagger}_{d_{x^2-y^2}} = \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}+\vec{u}_x} + \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}-\vec{u}_x} - \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}+\vec{u}_y} - \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}-\vec{u}_y} \\ \hat{\Delta}^{\dagger}_{s^*} = \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}+\vec{u}_x} + \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}-\vec{u}_x} + \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}+\vec{u}_y} + \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}-\vec{u}_y} \end{cases} \tag{4}$$

Dans le cas d'une symétrie $d_{x^2-y^2}$, l'opérateur de création de la paire est changé en son opposé sous une rotation d'angle $\pi/2$ autour d'un axe perpendiculaire au cluster alors qu'il reste invariant avec une symétrie s^* (aussi appelée « s étendue »). Cependant, toute supraconductivité dans ce canal s^* implique également la condensation de paires locales [Zha90b], qui sont prohibées par le modèle $t-J$. Dès lors, il apparaît naturel de rechercher un éventuel caractère supraconducteur dans le cadre d'une approche variationnelle basée sur une fonction d'onde BCS en onde $d_{x^2-y^2}$:

$$\left| \Phi^{(BCS)}_{d-wave} \right\rangle = \prod_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{k},\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{-\vec{k},\downarrow} \right) \left| \right\rangle, \tag{5}$$

où $\Delta_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = \Delta_0 \left(\cos k_x - \cos k_y \right)$ est le gap anisotrope pour cette symétrie dans l'espace des impulsions $\vec{k}$. Il convient toutefois de se restreindre aux seules composantes dans le sous-

espace exempt de tout site doublement occupé et dans lequel l'Hamiltonien $t-J$ Eq. (2) est défini. En faisant alors appel au projecteur de Gutzwiller $\hat{P}_{Gutz.}=\prod_{\vec{r}}\left(1-\hat{n}_{\vec{r}\uparrow}\hat{n}_{\vec{r}\downarrow}\right)$ pour satisfaire une telle contrainte, il s'agit donc de minimiser l'énergie moyenne du modèle $t-J$ dans la fonction d'onde « Resonating Valence Bond » (RVB) donnée par $\left|\Phi^{(RVB)}\right\rangle=\hat{P}_{Gutz.}\left|\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\right\rangle$ et historiquement proposée par P. W. Anderson [And87]. Cette démarche a été réalisée par F. C. Zhang, C. Gros, T. M. Rice & H. Shiba [Zha88] à l'approximation de Gutzwiller [Gut63, Bri70] où l'élimination de la double occupation se réduit à une pondération des valeurs moyennes dans l'état non projeté par des facteurs estimés classiquement à partir de simples dénombrements :

$$\frac{\left\langle\Phi^{(RVB)}\left|\hat{H}^{(t-J)}\right|\Phi^{(RVB)}\right\rangle}{\left\langle\Phi^{(RVB)}\middle|\Phi^{(RVB)}\right\rangle}=\frac{\left\langle\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\left|\hat{P}_{Gutz.}\hat{H}^{(t-J)}\hat{P}_{Gutz.}\right|\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\right\rangle}{\left\langle\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\left|\hat{P}^{2}_{Gutz.}\right|\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\right\rangle}\simeq\left\langle\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\left|\hat{H}^{(t-J)}_{RMFT}\right|\Phi^{(BCS)}_{d-wave}\right\rangle \qquad (6)$$

avec $\hat{H}^{(t-J)}_{RMFT}=-t\sum_{\langle\vec{r},\vec{r}'\rangle}g_t\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma}+\frac{J}{2}\sum_{\langle\vec{r},\vec{r}'\rangle}\left(g_s\hat{\vec{S}}_{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{S}}_{\vec{r}'}-\frac{1}{4}\hat{n}_{\vec{r}}\hat{n}_{\vec{r}'}\right)$, g_t et g_s étant respectivement les facteurs de renormalisation des amplitudes de saut et du super-échange. Leur expression dépend seulement du dopage en trous δ selon $g_t=2\delta/(1+\delta)$ et $g_s=4/(1+\delta)^2$ pour une phase homogène paramagnétique, comme celle décrite par la fonction d'onde BCS Eq. (5). La minimisation de la fonctionnelle d'énergie Eq. (6) sous la contrainte d'une densité totale fixée révèle alors l'existence d'un dôme supraconducteur en onde *d* autour du dopage $\delta=1/6$, comme le montre la Figure 5.

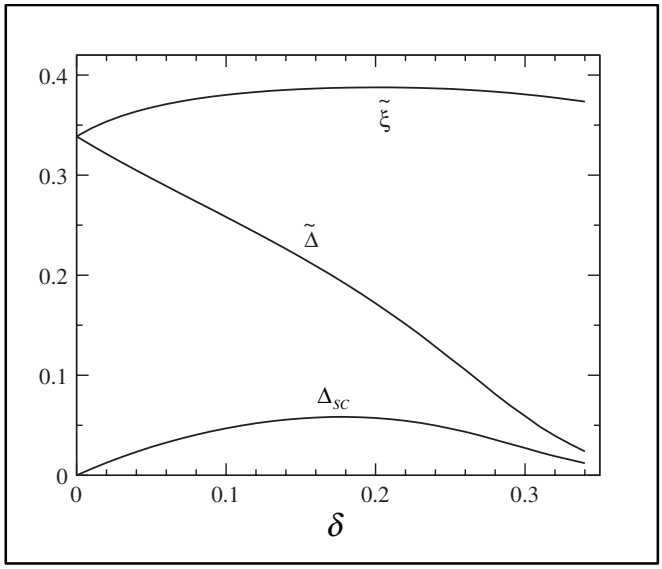


Figure 5 : Dépendance vis-à-vis du dopage δ en trous des amplitudes de saut $\tilde{\xi}=\sum_{\sigma}\left\langle\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}\pm\vec{u}_x\sigma}\right\rangle_{\Phi^{(BCS)}_{d-wave}}=\sum_{\sigma}\left\langle\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}\pm\vec{u}_y\sigma}\right\rangle_{\Phi^{(BCS)}_{d-wave}}$ et d'appariement dans le canal d'onde *d* $\tilde{\Delta}=\left\langle\hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}\pm\vec{u}_x}\right\rangle_{\Phi^{(BCS)}_{d-wave}}=-\left\langle\hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}\pm\vec{u}_y}\right\rangle_{\Phi^{(BCS)}_{d-wave}}$ pour la fonction d'onde BCS non projetée Eq. (5). $\Delta_{SC}=\left\langle\hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}\pm\vec{u}_x}\right\rangle_{\Phi^{(RVB)}}\simeq g_t\tilde{\Delta}$ est une estimation du paramètre d'ordre supraconducteur dans l'état RVB associé. Ces résultats sont issus de l'approximation de champ moyen renormalisé pour le modèle $t-J$ avec un super-échange $J=t/3$. Reproduit de la référence [Ede07].

L'approche de champ moyen renormalisé à partir de l'Hamiltonien $t-J$ peut par ailleurs être étendue pour autoriser le développement d'un ordre supraconducteur en présence d'antiferromagnétisme [Him99], d'une onde de densité de charge [Rac07], d'inhomogénéités sous forme de damiers [Poi05, Li06], ou encore de « stripes » antiferromagnétiques [Yan09]. Elle a aussi été utilisée pour étudier les phases normales, comme par exemple celle avec apparition spontanée de courants de charge [Led89, Zha90a, Poi05] (phase de flux encore appelée, selon le contexte, antiferromagnétisme orbital ou onde de densité de charge de symétrie d).

En outre, la validité de l'approximation de Gutzwiller et du traitement de champ moyen pour l'Hamiltonien effectif qui en résulte a pu être testée en confrontant ses prédictions avec les résultats de la minimisation de l'énergie du modèle $t-J$ dans un ansatz « RVB » [Zha88, Yok96]. Dans ce contexte, les valeurs moyennes des observables pertinentes ne peuvent être obtenues qu'en échantillonnant toutes les répartitions possibles des fermions sur le réseau par une procédure Monte-Carlo (VMC). Un exemple représentatif de telles simulations est donné sur la Figure 6 et il conduit à confirmer la stabilisation de phases supraconductrices avec un paramètre d'ordre de symétrie $d_{x^2-y^2}$.

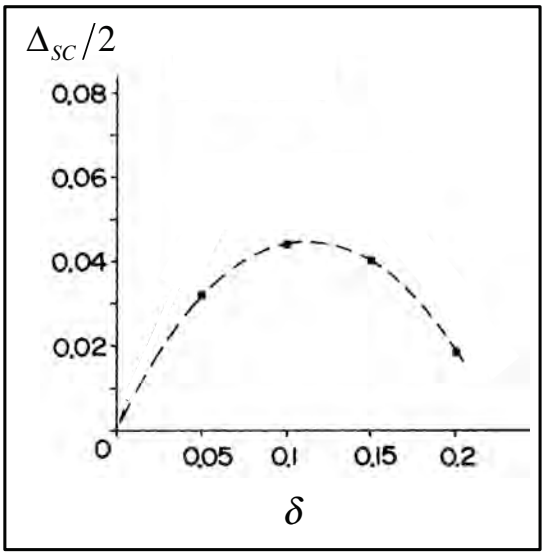


Figure 6 : Evolution, en fonction du dopage, du paramètre d'ordre supraconducteur $\Delta_{SC} = \left\langle \hat{\Delta}^{\dagger}_{\vec{r},\vec{r}\pm\vec{u}_x} \right\rangle_{\Phi^{(RVB)}}$ dans le canal de symétrie $d_{x^2-y^2}$ à partir d'une approche VMC pour le modèle $t-J$ sur une cellule 8×8 dans le régime $J = 0.4t$. Adapté de la référence [Yok88].

Il convient enfin de préciser que la pertinence de l'Hamiltonien $t-J$ Eq. (2) pour appréhender la physique du modèle de Hubbard dans le régime fortement corrélé reste controversée [Szc90] dans la mesure où le développement en $t.(t/U)^p$ ne génère pas seulement une interaction de super-échange. En particulier, des termes du même ordre que J et associés à des sauts corrélés à trois sites sont obtenus [Spa88], ainsi qu'un échange cyclique à quatre spins avec une constante de couplage $K = 20t^4/U^3$ néanmoins plus faible [Del05]. La fonction d'onde « RVB » a ainsi été confrontée directement aux résultats expérimentaux mesurés pour les cuprates au travers de calculs VMC avec un Hamiltonien $t-J$ Eq. (2) augmenté des contributions à trois sites et frustré par un terme de saut $t' < 0$ entre sites seconds plus proches voisins pour se rapprocher de la structure de bande de ces matériaux [Par04]. Plus généralement, de multiples travaux se concentrent sur une approximation de

l'état fondamental du modèle de Hubbard directement en terme d'une fonction d'onde issue de l'ansatz « RVB ». Pour une valeur donnée de l'interaction sur site U, celle-ci trouve en effet naturellement son prolongement en remplaçant le projecteur de Gutzwiller par un opérateur similaire $\hat{P}_{Gutz.}(g)$ mais qui vise seulement à réduire la double occupation au lieu de la supprimer complétement :

$$\hat{P}_{Gutz.}(g) = \prod_{\vec{r}} \left(1 + (g-1)\hat{n}_{\vec{r}\uparrow}\hat{n}_{\vec{r}\downarrow}\right) \tag{7}$$

Ici la variable g contrôle précisément la double occupation des sites du réseau et elle est optimisée selon une procédure VMC en même temps que les paramètres utilisés pour caractériser l'état non projeté. De telles méthodes variationnelles ont été proposées pour étudier une possible coexistence dans le modèle de Hubbard de la supraconductivité en onde d avec des corrélations antiferromagnétiques [Gia90, Gia91], des « stripes » [Miy02] ou encore des spirales [Dzi93]. Des fonctions d'onde de Gutzwiller étendues à l'aide de facteurs de Jastrow [Cap05, Toc08, Mis14], de facteurs de corrélations doublon-holon [Yok04, Yok13, Mis14] ou encore visant à promouvoir la mobilité des trous [Eic07] ont également été suggérées afin d'enrichir l'ansatz. Globalement, ces études conduisent à de faibles écarts en énergie entre les différents ordres considérés [Yok13]. En conséquence, il s'avère difficile de pouvoir distinguer le scénario d'une compétition entre différentes phases quasiment dégénérées de celui d'un enchevêtrement de plusieurs degrés de liberté au sein d'une unique fonction d'onde. Seule l'utilisation d'états moins restreints serait susceptible d'apporter des éléments de réponse. Toutefois, les approches VMC ne sont à même de minimiser qu'une fonctionnelle d'énergie comportant un nombre limité de paramètres. A ce jour, il est par exemple impossible de réaliser la projection partielle de Gutzwiller sur un état HF sans aucune autre restriction sur son contenu physique.

III. Le champ moyen étendu par projection sur les nombres quantiques avant variation

Dans cette thèse, nous poursuivons l'objectif de rechercher un état fondamental approché pour le modèle de Hubbard répulsif au travers d'un schéma variationnel conservant la versatilité des fonctions d'onde Hartree-Fock et BCS, tout en introduisant des corrélations au delà de l'approximation de champ-moyen. Il s'agit également de s'affranchir de toute hypothèse sur le contenu physique afin de mettre en exergue les corrélations qui émergent spontanément de l'Hamiltonien à basse énergie. Leur détection ne pourra donc être réalisée que selon les procédures inhérentes aux méthodes non biaisées de type Monte-Carlo quantique ou diagonalisation exacte.

Une des pistes pour spécifier ce programme réside alors dans les résultats présentés auparavant à l'approximation de champ-moyen et qui témoignent de brisures de symétries. Par exemple, les « stripes » brisent manifestement l'invariance par translation alors qu'elles sont obtenues dans des simulations menées sur des clusters de taille finie pour lesquels cette symétrie du modèle de Hubbard est nécessairement respectée dans la solution exacte. Il en va de même pour les spirales avec l'invariance par rotation dans l'espace de spin. En réalité, des solutions HF possédant toutes les symétries de l'Hamiltonien peuvent être obtenues en initiant le processus d'optimisation auto-cohérent à partir d'un déterminant choisi pour respecter ces symétries. Néanmoins, les énergies obtenues sont en général supérieures à celles issues d'une solution à symétries brisées. Ce phénomène est caractéristique des approximations de champ-moyen, qui en étant restreintes à un état de fermions indépendants, peuvent difficilement

concilier le respect des invariances de l'Hamiltonien et l'absorption des interactions entre les particules. De plus, toute solution de champ-moyen à symétrie brisée n'est pas unique : tous les déterminants reliés par une transformation de symétrie $\hat{T}$ de l'hamiltonien sont également des solutions avec la même énergie [Bla85]. Ils sont construits à partir d'états individuels $T|\phi_1\rangle, T|\phi_2\rangle \ldots T|\phi_N\rangle$ ayant subi l'opération considérée. Dès lors, on peut envisager la restauration de la symétrie au sein de ce sous-espace, par exemple en y diagonalisant l'Hamiltonien. Pour le modèle de Hubbard, une telle stratégie a été mise en œuvre par E. Louis & *al* [Lou01] et a permis de montrer que les interférences entre les configurations au sein du mélange permettent d'obtenir un gain d'énergie : les méthodes fondées sur la restauration des symétries se révèlent donc pertinentes pour intégrer des corrélations au delà du champ-moyen. Sur cette base, il est néanmoins possible d'améliorer nettement la qualité de l'approximation en initiant directement le processus variationnel avec une fonction d'onde à symétries adaptées par projection sur les nombres quantiques associés : on parle alors de projection *avant* variation. La différence cruciale avec une restauration post-variationnelle réside alors dans le fait que l'ansatz est par essence une combinaison linéaire d'états de champ moyen et donc une fonction d'onde corrélée. L'optimisation de telles superpositions est au cœur de cette thèse et nous parlerons par la suite d'une approche de champ-moyen enchevêtrée par les symétries (« SEMF »). Nous nous proposons dans ce chapitre d'illustrer la méthode sur des exemples simples à deux et quatre sites dans la limite du demi-remplissage, avant de détailler son formalisme dans le second chapitre du manuscrit.

III.a) Modèle à deux sites

On se place ici dans le cadre d'un système formé de deux fermions de spin 1/2 pouvant accéder à deux sites *a* et *b* pour lequel l'énergie de l'état fondamental est $E_0 = \left(U - \sqrt{U^2 + 16t^2}\right)/2$. Nous considérons un déterminant de Slater $|\Phi^{(HF)}\rangle = \hat{c}^\dagger_{\phi_1}\hat{c}^\dagger_{\phi_2}|\ \rangle$ où les états individuels $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ définis par

$$\begin{cases} |\phi_1\rangle = \cos(\theta/2)|a\uparrow\rangle + \sin(\theta/2)|b\uparrow\rangle \\ |\phi_2\rangle = \sin(\theta/2)|a\downarrow\rangle + \cos(\theta/2)|b\downarrow\rangle \end{cases} \tag{8}$$

assurent à la fonction d'onde le caractère antiferromagnétique attendu à demi-remplissage. La méthode Hartree-Fock aboutit alors à l'énergie moyenne $\langle \hat{H} \rangle_{\Phi^{(HF)}} = \frac{1}{2}\sin\theta(U\sin\theta - 4t)$ qui est rendue stationnaire pour les valeurs suivantes de l'angle θ :

$$\begin{cases} \theta = \pi/2 \text{ pour } U \le 2t \\ \sin\theta = 2t/U \text{ pour } U \ge 2t \end{cases} \tag{9}$$

Dans tous les cas, l'énergie de l'état fondamental exact n'est pas retrouvée. Pour implémenter ici la méthode SEMF en se limitant à la projection sur le sous-espace singulet de spin, il suffit alors de remarquer que le déterminant $|\Phi^{(HF)}\rangle$ se décompose linéairement en fonction des quatre vecteurs orthonormés

$$\begin{cases} |1\rangle = \hat{c}^\dagger_{a\uparrow}\hat{c}^\dagger_{a\downarrow}|\ \rangle \\ |2\rangle = \hat{c}^\dagger_{b\uparrow}\hat{c}^\dagger_{b\downarrow}|\ \rangle \end{cases}, \quad \begin{cases} |3\rangle = \left(\hat{c}^\dagger_{a\uparrow}\hat{c}^\dagger_{b\downarrow} - \hat{c}^\dagger_{a\downarrow}\hat{c}^\dagger_{b\uparrow}\right)|\ \rangle/\sqrt{2} \\ |4\rangle = \left(\hat{c}^\dagger_{a\uparrow}\hat{c}^\dagger_{b\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{a\downarrow}\hat{c}^\dagger_{b\uparrow}\right)|\ \rangle/\sqrt{2} \end{cases} \tag{10}$$

selon $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \frac{1}{2}\left[\sin\theta|1\rangle + \sin\theta|2\rangle + \sqrt{2}|3\rangle + \sqrt{2}\left(\cos^2\theta - \sin^2\theta\right)|4\rangle\right]$. Seuls les trois premiers états sont des singulets de spin alors que le quatrième est un triplet. Notons que la solution HF est donc bien une fonction d'onde à symétries brisées. La restauration de l'invariance par rotation dans l'espace de spin se résume alors à éliminer la contribution de l'état $|4\rangle$ dans $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$. De plus, dans le sous-espace $S=0$ engendré par les vecteurs $|1\rangle$, $|2\rangle$ et $|3\rangle$, la matrice hamiltonienne est simplement donnée par :

$$\hat{H} \Rightarrow \begin{pmatrix} U & 0 & -\sqrt{2}t \\ 0 & U & -\sqrt{2}t \\ -\sqrt{2}t & -\sqrt{2}t & 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

Le calcul de l'énergie moyenne dans l'état HF projeté sur le secteur $S=0$ est donc direct et conduit à l'expression $E_{S=0} = \frac{U\sin^2\theta - 4t\sin\theta}{1+\sin^2\theta}$. Son minimum est ainsi obtenu pour $\sin\theta = \left(\sqrt{U^2+16t^2} - U\right)\Big/(4t)$ et il s'identifie à l'énergie exacte pour l'état fondamental. L'approche SEMF, avec restauration du nombre quantique de spin total avant variation, permet donc d'absorber pour deux sites l'intégralité des corrélations que l'approximation Hartree-Fock avait négligées.

III.b) Modèle à quatre sites

Dans ce paragraphe, nous présentons sommairement la méthodologie et les résultats mis en œuvre dans l'article publié [Lep14] et reproduit à partir de la page 24. Il s'agit à nouveau d'illustrer le schéma SEMF pour le modèle de Hubbard défini sur un amas carré 2×2 demi-rempli avec des conditions aux bords périodiques. Dans un premier temps, nous recherchons une solution exacte au travers de la diagonalisation directe de l'Hamiltonien dans une base orthonormée construite à partir d'un état doublement occupé. Ce vecteur singulet de spin est rendu invariant par translation et projeté sur le secteur de symétrie en onde *d* au regard d'une rotation d'angle $\pi/2$ autour d'un axe *Oz* orthogonal au cluster. Les états complétant la base sont ensuite obtenus analytiquement par la méthode de Lanczos, ce qui garantit la préservation des nombres quantiques considérés. Finalement, nous aboutissons à un sous-espace tridimensionnel dans lequel l'Hamiltonien s'exprime matriciellement selon :

$$\hat{H} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2U & 2t & 0 \\ 2t & U & -2\sqrt{3}t \\ 0 & -2\sqrt{3}t & 0 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Ses valeurs propres satisfont donc une équation cubique que nous résolvons grâce à la formule de Cardan. Ainsi, l'énergie exacte de l'état fondamental est obtenue pour toute constante de couplage U/t et servira de référence pour jauger la qualité de la méthode SEMF.

A l'instar du modèle à deux sites, nous initions le schéma à symétries restaurées avant variation à partir d'un déterminant de Slater $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{\phi_1\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{\phi_2\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{\phi_3\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\phi_4\downarrow}|\ \rangle$ issu d'un Hamiltonien de type Hartree-Fock pour une solution antiferromagnétique. Sa composante dans le canal de spin total nul est alors déterminée analytiquement via la technique générale des projecteurs de symétrie et qui sera détaillée dans le second chapitre. L'optimisation de l'énergie moyenne

pour la fonction d'onde projetée $\hat{P}_{S=0}\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ ainsi obtenue révèle alors un excellent accord avec la solution exacte : l'erreur relative, en fonction de la répulsion sur site, est en effet au plus de 0.05% (cette valeur étant atteinte pour $U/t \simeq 2$). Un tel résultat contraste fortement avec l'approche conventionnelle de Gutzwiller implémentée à partir du même état de référence. Dans ce cas, l'état d'essai est donc $\hat{P}_{Gutz.}(g)\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ où le paramètre supplémentaire g vise à réduire le poids des configurations doublement occupées (cf. Eq. (7)). Précisons que les symétries discrètes du déterminant $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ simplifient grandement le calcul analytique de la fonctionnelle d'énergie à minimiser. Au final, il demeure un écart relatif important avec l'énergie exacte, saturant aux alentours de 28% dans la limite où l'interaction sur site tend vers l'infini.

De par son principe, la méthode SEMF conduit à un ansatz variationnel s'écrivant comme une combinaison linéaire d'états de champ moyen, d'autant plus large que la fonction d'onde de référence exhibe des symétries brisées que l'on restaure par projection sur les nombres quantiques retenus. Dès lors, nous avons cherché à enrichir le schéma d'approximation SEMF précédent pour que le déterminant $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ brise toutes les invariances du modèle de Hubbard. En effet, avec la configuration antiferromagnétique, les symétries discrètes qui subsistent entraînent que la seule projection sur le secteur singulet de spin restaure simultanément l'invariance par translation. Pour s'affranchir d'une telle propriété, l'Hamiltonien effectif à un corps, qui définit par diagonalisation la fonction d'onde de référence $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$, peut être modifié en introduisant des amplitudes de saut non uniformes et dépendant du spin « up » ou « down ». Ainsi, nous pouvons projeter $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ avant variation sur les nombres quantiques de spin total $S=0$ et de quasi-impulsion totale $\vec{K}=(0,0)$ qui caractérisent l'état fondamental. De nouveau la minimisation de l'énergie moyenne associée a pu être menée analytiquement pour montrer que l'on retrouve l'expression de l'énergie exacte quelle que soit l'intensité de la répulsion sur site. L'approche SEMF fournit ainsi une représentation alternative de l'état fondamental du modèle de Hubbard répulsif pour un cluster 2×2 au demi-remplissage.

Références

[And87] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).

[Bla85] J.-P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, The MIT Press, Cambridge, MA (1985).

[Bri70] W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 4302 (1970).

[Cap05] M. Capello, F. Becca, M. Fabrizio, S. Sorella and E. Tosati, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 026406 (2005).

[Car11] G. Carleo, S. Moroni, F. Becca and S. Baroni, *Phys. Rev. B* **83**, 060411(R) (2011).

[Cha10] C. C. Chang and S. Zhang, *Phys. Rev. Lett*. **104**, 116402 (2010).

[Cha78] K. A. Chao, J. Spalek and A. M. Oles, *Phys. Rev. B* **18**, 3453 (1978).

[Del05] J.-Y. Delannoy, M. J. P. Gringras, P. C. Holdworth and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **72**, 115114 (2205).

[Dzi92] M. Dzierzawa, *Z. Phys. B* **86**, 49 (1992).

[Dzi93] M. Dzierzawa and R. Frésard, *Z. Phys. B* **91**, 245 (1993).

[Ede07] B. Eddeger, V. N. Muthukumar and C. Gros, *Adv. Phys.* **56**, 927 (2007).

[Eic07] D. Eichenberger and D. Baeriswyl, *Phys. Rev. B* **76**, 180504 (2007).

[Gia90] T. Giamarchi and C. Lhuillier, *Phys. Rev. B* **42**, 10641 (1990).

[Gia91] T. Giamarchi and C. Lhuillier, *Phys. Rev. B* **43**, 12943 (1991).

[Gou14] J.D. Gouveia and R. G. Dias, *Solid State Communications* **185**, 21 (2014).

[Gut63] M. C. Gutzwiller*, Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).

[Har67] A.B. Harris and R. V. Lange, *Phys. Rev.* **157**, 295 (1967).

[Him99] A. Himeda and M. Ogata, *Phys. Rev. B* **60**, R9935 (1999).

[Hir85] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).

[Led89] P. Lederer, D. Poilblanc and T. M. Rice, *Phys. Rev. Lett*. **63**, 1519 (1989).

[Lep14] A. Leprévost, O. Juillet and R. Frésard, *Ann. Phys (Berlin)* **526**, 430 (2014).

[Li06] C. Li, S. Zhou and Z. Wang, *Phys. Rev. B* **73**, 060501(R) (2006).

[Liu12] L. Liu, H. Yao, E. Berg and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 126406 (2012).

[Lou01] E. Louis, F. Guinea, M. P. López Sancho and A. Vergés, *Phys. Rev. B* **64**, 205108 (2001).

[Mis14] T. Misawa and M. Imada, *Phys. Rev. B* **90**, 115137 (2014).

[Miy02] M. Miyazaki, K. Yamaji, T. Yanagisawa, *J. Phys. Chem. Solids* **63**, 1403 (2002).

[Nag66] Y. Nagoaka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966).

[Par04] A. Paramekanti, M. Randeria and N. Trivedi, *Phys. Rev. B* **70**, 054504 (2004).

[Pen66] D. R. Penn, *Phys. Rev*. **142**, 350 (1966).

[Poi05] D. Poilblanc, *Phys. Rev. B* **72**, 060508(R) (2005).

[Rac07] M. Raczkowski, M. Capello, D. Poilblanc, R. Frésard and A. M. Oles, *Phys. Rev. B* **76**, 140505(R) (2007).

[Rie89] J. A. Riera and A. P. Young , *Phys. Rev. B* **40**, 5285 (1989).

[Spa77] J. Spalek and A. M. Oles, *Physica B* **86**, 375 (1977).

[Spa88] J. Spalek, *Phys. Rev. B* **37**, 533 (1988).

[Su88] W. P. Su, *Phys. Rev. B* **37**, 9904 (1988).

[Szc90] K. J. von Szczepanski, P. Horsch, W. Stephan and M. Ziegler, *Phys. Rev. B* **41**, 2017 (1990).

[Toc08] L. F. Tocchio, F. Becca, A. Parola and S. Sorella, *Phys. Rev. B* **78**, 041101(R) (2008).

[Ver91] J. A. Vergés, E. Louis, P. S. Lomdahl, F. Guinea and A. R. Bishop, *Phys. Rev. B* **43**, 6099 (1991).

[Xu11] J. Xu, C.-C. Chang, E. J. Walter and S. Zhang, *J. Phys. Condens. Matter* **23**, 505601 (2011).

[Yan09] K.-Y. Yang, W. Q. Chen, T. M. Rice, M. Sigrist and F.-C. Zhang, *New. J. Phys.* **11**, 055053 (2009).

[Yok04] H. Yokoyama, Y. Tanaka, M. Ogata and H. Tsuchiura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1119 (2004).

[Yok13] H. Yokoyama, M. Ogata, Y. Tanaka, K. Kobayashi and H. Tsuchiura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 014707 (2013).

[Yok88] H. Yokoyama and H. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn* **57**, 2482 (1988).

[Yok96] H. Yokoyama and M. Ogata, *J. Phys. Soc. Jpn* **65**, 3615 (1996).

[Zaa96] J. Zaanen and A. M. Oles, *Ann. Phys. (Berlin)* **508**, 224 (1996).

[Zha88] F. C. Zhang, C. Gros, T. M. Rice and H. Shiba, *Supercond. Sc. Tech.* **1**, 36 (1988).

[Zha90a] F. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 974 (1990).

[Zha90b] S. Zhang, *Phys. Rev. B* **42**, 1012 (R) (1990).

Original Paper

Ann. Phys. (Berlin) **526**, No. 9–10, 430–436 (2014) / DOI 10.1002/andp.201400129

annalen der physik

Exact ground state of strongly correlated electron systems from symmetry-entangled wave-functions

Alexandre Leprévost[1], *Olivier Juillet*[1], *and Raymond Frésard*[2,*]

Received 10 June 2014, revised 18 July 2014, accepted 21 July 2014
Published online 11 August 2014

The four-site Hubbard model is considered from the exact diagonalisation and variational method points of view. It is shown that the exact ground-state can be recovered by a symmetry projected Slater determinant, irrespective of the interaction strength. This is in contrast to the Gutzwiller wave-function, which is calculated as well.

1 Introduction

The intriguing properties of transition metal oxides have a long history, perhaps starting with the pioneering work of de Boer and Verwey on systems with partially filled and with completely filled 3d-bands [1]. Since then, tremendous efforts have been devoted to the study of transition metal oxides, especially in the form of perovskites ABO_3, with A being, e.g., La, Sr or a mixture of both of them, and B any transition metal. As reviewed by Imada et al. [2], numerous phase transitions have been discovered, especially towards magnetic and superconducting states [3], as well as the Mott metal-to-insulator transition. Arising in systems with partially filled bands, it points towards the relevance of electronic correlations. Examples are provided by $RTiO_3$ (see, e.g., [4]) and $RNiO_3$ (see, e.g., [5] for a review), with R being a rare earth. Furthermore, the colossal magnetoresistance (see, e.g., [6]) and large thermopower (see, e.g., [7]) have attracted considerable interest, too.

The transition metal oxides family is richer, and interest in systems exhibiting application-oriented properties immensely grew in recent years. This is especially true for high-T_c superconductors (see, e.g., [8, 9]), transparent conducting oxides (see, e.g., [10]), quantum criticality (see, e.g., [11]), and high capacitance heterostructures [12], to quote a few. In addition, they also entail fascinating phenomena such as superconductivity at the interface of two insulators [13], peculiar magnetism in low dimensional systems [14], high temperature ferromagnetism in vanadate superlattices [15], all of them providing a strong challenge to investigate these systems from the theory side. Yet, one may fairly say that current theoretical approaches meet with severe difficulties when studying the models which describe these systems. Indeed, the tool which is best mastered (perturbation theory), badly fails when the Coulomb interaction is sufficiently strong, thereby calling for alternative approaches.

The microscopic model for interaction driven properties which has received the largest amount of attention is certainly the Hubbard model [16–18], especially after Anderson's proposal that the key properties of high-T_c superconductors are embodied in it or in the t-J model [19]. The Hubbard model describes an interacting many-body system which cannot be solved analytically, except for dimension $d = 1$ [20], or in the limit of large spacial dimensions [21–23].

In two dimensions, consensus has been reached at half-filling only: the interaction strength drives a Mott transition [24] to an insulator with long-ranged antiferromagnetic (AF) order [25]. The consequences of (hole) doping remain controversial: The debate focuses on whether the ground-state supports charge inhomogeneities or unconventional fermion-pair condensates and, if so, how their order parameters are intertwined with magnetic properties. Even though numerous many-body techniques have been applied, only a partial answer could be obtained. As reviewed in [26], they are, e.g., cluster extensions [27] of the dynamical mean-field theory (DMFT) [23], the two-particle self-consistent

* Corresponding author E-mail: Raymond.Fresard@ensicaen.fr, Phone: +33 231 45 26 09, Fax: +33 231 95 16 00
[1] Laboratoire LPC Caen, ENSICAEN, Université de Caen, CNRS/IN2P3, 6 Boulevard Maréchal Juin, 14050 Caen CEDEX, France
[2] Laboratoire CRISMAT, UMR CNRS-ENSICAEN(ISMRA) 6508, 6 Boulevard Maréchal Juin, 14050 Caen CEDEX, France

© 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

Ann. Phys. (Berlin) **526**, No. 9–10 (2014)

annalen der physik

Original Paper

approximation [28], Gutzwiller variational schemes [29], or slave-boson approaches [30, 31]. Standard quantum Monte Carlo simulations (QMC) are also restricted [32] owing to the notorious sign problem that is particularly severe for doped Hubbard models. However, progress has been made through diagrammatic Monte Carlo in continuous time [33], especially for impurity problems [34].

An alternative approach with unrestricted symmetry projected wave-functions has been recently introduced. This symmetry-entangled mean-field (SEMF) theory is variational [35], and has been shown to be exact for a two-site cluster, sharing this property with the Gutzwiller wave-function (GWF). In addition, excellent agreement with exact diagonalisation data on 4×4 clusters has been obtained [36]. This then raises the question of whether the SEMF could be exact for clusters made of more than two sites, which provides the purpose of this paper. It is organised as follows: We first summarise in Section 2 the exact diagonalisation procedure to the calculation of the ground-state of the Hubbard model on a 2×2 cluster which we determine. We then present the principles of the SEMF in Section 3 and work out the wave-function obtained after restoration of the spin rotational invariance. For comparison, we also determine the Gutzwiller wave-function as well as the Hartree-Fock wave-function. Finally, in Section 4 we calculate the SEMF wave-function obtained after spin and total momentum projection, and we show that the exact ground-state energy is recovered for arbitrary interaction strength. Our work is summarised in Section 5.

2 Exact diagonalisation for the ground-state

In this work we consider the Hubbard Model on four sites $i \in \{a, b, c, d\}$ as depicted in Fig. 1. We write the Hamiltonian in the form

$$\mathscr{H} = -\frac{t}{2} \sum_{<i,j>,\sigma} c^\dagger_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{1}$$

Note that the unusual factor $\frac{1}{2}$ for the hopping amplitude is simply introduced to avoid double counting following from the periodic boundary conditions (PBC) we use. This Hamiltonian is invariant under both continuous and discrete symmetry operations. They involve the $SU(2)$ spin rotational symmetry, as well as translational symmetry and C_{4v} lattice transformations. In addition, at half-filling, the Hamiltonian Eq. (1) possesses $SU(2)$ charge rotational symmetry. As it turns out that this symmetry is not needed to obtain the exact ground-state in the SEMF approach, it will be discarded.

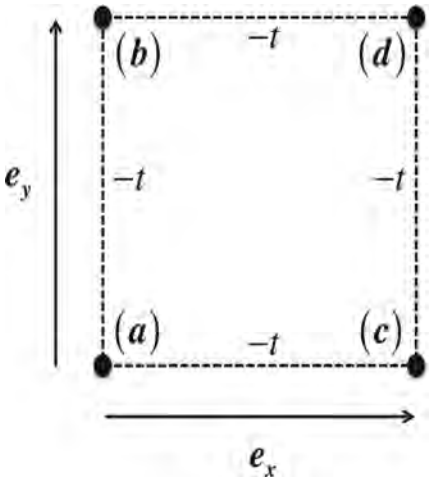


Figure 1 Labelling of the sites for the Hubbard model on the 2×2 cluster.

According to previous studies [37, 38] the ground-state is characterised by zero total spin, zero total momentum and d-wave symmetry. A convenient basis to the calculation of the ground-state may be found starting from a state with two doubly occupied sites that is symmetrised according to the above quantum numbers. The other basis states are obtained by repeatedly applying the hopping operator. Thus, we end with a three-dimensional subspace spanned by the following vectors:

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= \frac{1}{2}\left(\Delta^\dagger_a - \Delta^\dagger_d\right)\left(\Delta^\dagger_b - \Delta^\dagger_c\right)|0\rangle \\
|2\rangle &= \frac{1}{4}\Big[\left(\Delta^\dagger_a + \Delta^\dagger_b\right)\left(c^\dagger_{c\uparrow} c^\dagger_{d\downarrow} - c^\dagger_{c\downarrow} c^\dagger_{d\uparrow}\right) \\
&\quad - \left(\Delta^\dagger_a + \Delta^\dagger_c\right)\left(c^\dagger_{b\uparrow} c^\dagger_{d\downarrow} - c^\dagger_{b\downarrow} c^\dagger_{d\uparrow}\right) \\
&\quad - \left(\Delta^\dagger_b + \Delta^\dagger_d\right)\left(c^\dagger_{a\uparrow} c^\dagger_{c\downarrow} - c^\dagger_{a\downarrow} c^\dagger_{c\uparrow}\right) \\
&\quad + \left(\Delta^\dagger_c + \Delta^\dagger_d\right)\left(c^\dagger_{a\uparrow} c^\dagger_{b\downarrow} - c^\dagger_{a\downarrow} c^\dagger_{b\uparrow}\right)\Big]|0\rangle \\
|3\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{3}}\Big[c^\dagger_{a\uparrow} c^\dagger_{b\uparrow} c^\dagger_{c\downarrow} c^\dagger_{d\downarrow} + c^\dagger_{a\downarrow} c^\dagger_{b\uparrow} c^\dagger_{c\downarrow} c^\dagger_{d\uparrow} \\
&\quad + c^\dagger_{a\downarrow} c^\dagger_{b\downarrow} c^\dagger_{c\uparrow} c^\dagger_{d\uparrow} + c^\dagger_{a\uparrow} c^\dagger_{b\downarrow} c^\dagger_{c\uparrow} c^\dagger_{d\downarrow} \\
&\quad - 2\left(c^\dagger_{a\uparrow} c^\dagger_{b\downarrow} c^\dagger_{c\downarrow} c^\dagger_{d\uparrow} + c^\dagger_{a\downarrow} c^\dagger_{b\uparrow} c^\dagger_{c\uparrow} c^\dagger_{d\downarrow}\right)\Big]|0\rangle
\end{aligned} \tag{2}$$

© 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

where we introduced the short-hand notation $\Delta_i^\dagger \equiv c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger$. In this basis the Hamiltonian matrix reads:

$$H = \begin{pmatrix} 2U & 2t & 0 \\ 2t & U & -2\sqrt{3}t \\ 0 & -2\sqrt{3}t & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

In order to determine the eigenvalues E_k it is convenient to write:

$$E \equiv U - 4t\zeta. \tag{4}$$

ζ then satisfies to a cubic equation in depressed form:

$$16t^3\zeta^3 - \zeta(16t^2 + U^2)t - 2t^2U = 0. \tag{5}$$

Eq. (5) may be solved using Cardano's formula, and the eigenvalues of the Hamiltonian matrix Eq. (3) finally read:

$$E_k = U - 2\sqrt{\frac{16t^2 + U^2}{3}} \cos\left(\frac{\beta - 2k\pi}{3}\right) \tag{6}$$

with $k = 0,\ 1,\ 2$, and

$$\cos\beta = 4t^2U\left(\frac{3}{16t^2 + U^2}\right)^{\frac{3}{2}}. \tag{7}$$

The ground-state corresponds to $k = 0$.

The Hamiltonian Eq. (1) also corresponds to the Hubbard Model on a four-site chain with PBC. Note that the d-wave character of the ground-state on the 2×2 cluster maps onto a total momentum $K = \pi$ for the chain. Then, the solution Eqs. (6–7) reproduces the results obtained in the 1D case [39, 40].

3 Principles of the SEMF approach for the 2 × 2 cluster

Symmetry breaking wave-functions with assumed magnetic, charge or superconducting orders are usually considered in variational treatments of the Hubbard model [41]. However, on finite-size clusters, Hamiltonian symmetries must be restored by quantum fluctuations and substantial energy improvements can be obtained by quantum number projection on top of these states. An illustration with the Gutzwiller wave-function can be found in [42]. Indeed, symmetry restoration leads to coherent superpositions of symmetry related states that induce correlations. The SEMF approach follows such a strategy to approximate low-lying eigenstates of the Hubbard model. Up to now, the method works at the Hartree-Fock level and gives the optimal Slater determinant minimising the energy *after* symmetry projection. First attempts for the spectroscopy of Hubbard chains [43] and square clusters up to 36 sites have been performed with reliable results [44]. By reformulating the stationarity of the projected energy as a mean-field like equation, SEMF simulations on larger cells and with all symmetries of the Hubbard model have revealed an intriguing interplay of spin, charge and pairing correlations in the hole doped region [35].

3.1 Restoration of spin-rotational invariance

One of the most attractive features of the SEMF approximation relies on the ability to perform an unbiased energy minimisation, *i.e.* to consider totally unrestricted Slater determinants. However, we here focus on analytical SEMF solutions and thus follow conventional calculations with projected wave-functions by constraining the variational subspace to exhibit a relevant order. At half-filling, an antiferromagnetic Slater determinant $|\Phi_{\text{ref}}\rangle$ is considered. For the 2×2 cluster, we assume a positive magnetisation m on sites a and d, and the opposite magnetisation on sites b and c. In each spin sector σ, the two occupied orbitals are simply obtained as the lowest energy eigenstates of the effective one-body Hamiltonian

$$h_\sigma^{\text{ref}}[m] = \begin{pmatrix} \frac{U}{2}(1 - \sigma m) & -t & -t & 0 \\ -t & \frac{U}{2}(1 + \sigma m) & 0 & -t \\ -t & 0 & \frac{U}{2}(1 + \sigma m) & -t \\ 0 & -t & -t & \frac{U}{2}(1 - \sigma m) \end{pmatrix} \tag{8}$$

For our purpose, it is convenient to introduce

$$\tilde{m} = \frac{Um}{2t}$$
$$\cos(2\varphi) = \frac{\tilde{m}}{\sqrt{4 + \tilde{m}^2}}$$
$$\sin(2\varphi) = \frac{2}{\sqrt{4 + \tilde{m}^2}} \tag{9}$$

in terms of which the four-electron state $|\Phi_{\text{ref}}\rangle$ reads:

$$|\Phi_{\text{ref}}\rangle = c_{\phi_1\uparrow}^\dagger c_{\phi_2\uparrow}^\dagger c_{\phi_3\downarrow}^\dagger c_{\phi_4\downarrow}^\dagger |0\rangle \tag{10}$$

© 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

Ann. Phys. (Berlin) **526**, No. 9–10 (2014)

annalen der physik

Original Paper

with

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|a\rangle - |d\rangle\right) \tag{11}$$

$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos(\varphi)|a\rangle + \sin(\varphi)|b\rangle + \sin(\varphi)|c\rangle + \cos(\varphi)|d\rangle\right)$$

$$|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|b\rangle - |c\rangle\right)$$

$$|\phi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sin(\varphi)|a\rangle + \cos(\varphi)|b\rangle + \cos(\varphi)|c\rangle + \sin(\varphi)|d\rangle\right)$$

In SEMF, one introduces a symmetry adapted mean-field state $|\Psi\rangle = \mathscr{P}^{(\Gamma)}|\Phi_{\text{ref}}\rangle$ where $\mathscr{P}^{(\Gamma)}$ is a projector on the subspace with quantum numbers Γ. We first limit ourselves to the restoration of spin rotational invariance for which the singlet projection can be achieved by [45]

$$\mathscr{P}^{(S=0)} = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma\, R(\alpha,\beta,\gamma) \tag{12}$$

where $R(\alpha,\beta,\gamma) = e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}S_z} e^{-\frac{i\beta}{\hbar}S_y} e^{-\frac{i\gamma}{\hbar}S_z}$ is the Euler angles (α,β,γ) parameterisation of rotations (with $\mathbf{S}$ the total spin observable). The unnormalised $S=0$ component of the AF state is then easily obtained and may be written as a linear combination of the basis vectors $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ Eq. (2) spanning the subspace of the exact ground-state:

$$|\Psi\rangle = \sin^2(\varphi)|1\rangle - \sin(2\varphi)|2\rangle - \frac{1+\cos^2(\varphi)}{\sqrt{3}}|3\rangle \tag{13}$$

Indeed, this result reflects unbroken symmetries of the AF reference state. For instance, one can immediately check that $|\Phi_{\text{ref}}\rangle$ is invariant under a spin-rotation around the y-axis by an angle π combined with a translation T_y by one lattice spacing along the y-direction. Therefore, after performing all spin rotations and integrating over the Euler angles, the resulting $S=0$ vector is simultaneously translational invariant:

$$\begin{aligned} T_y|\Psi\rangle &= \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\alpha\, e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}S_z} \int_0^{\pi} d\beta \sin\beta\, e^{-\frac{i\beta}{\hbar}S_y} T_y|\Phi_{\text{ref}}\rangle \\ &= \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\alpha' e^{i\frac{\alpha'-2\pi}{\hbar}S_z} \int_0^{\pi} d\beta' \sin(\pi-\beta') \times \\ &\quad e^{\frac{i\beta'}{\hbar}S_y} e^{-\frac{i\pi}{\hbar}S_y} T_y|\Phi_{\text{ref}}\rangle \\ &= e^{-\frac{2i\pi}{\hbar}S_z}\mathscr{P}^{(S=0)}|\Phi_{\text{ref}}\rangle|\Psi\rangle \end{aligned} \tag{14}$$

where we used the hermiticity of the projector Eq. (12). With the help of the Hamiltonian matrix Eq. (3) in the subspace $|1\rangle$, $|2\rangle$, and $|3\rangle$, one is left with the following

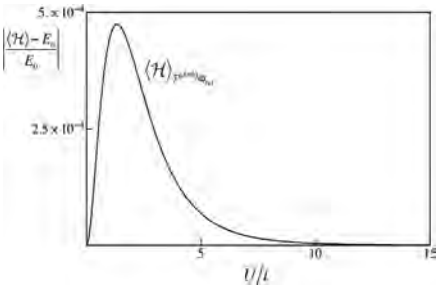


Figure 2 Ground-state energy from spin singlet projected SEMF.

average energy $E^{(S=0)}$ in the SEMF state $|\Psi\rangle$:

$$\langle\mathscr{H}\rangle_{\mathscr{P}^{(S=0)}\Phi_{\text{ref}}} = \frac{\frac{3}{8}U(5-4\cos(2\varphi)-\cos(4\varphi)) - 12t\sin(2\varphi)}{2+\sin^2(2\varphi)} \tag{15}$$

Its minimisation with respect to φ yields a cubic equation for the dimensionless staggered magnetisation $\tilde{m}$:

$$2\tilde{m}t(2+\tilde{m}^2) - U(3+\tilde{m}^2) = 0 \tag{16}$$

Comparison of the resulting energy to the exact solution is performed in Fig. 2. The agreement is obviously excellent for any on-site interaction, but the SEMF approach limited to the spin singlet projection is not exact.

3.2 Comparison with the conventional Gutzwiller wave-function

Let us now proceed to the usual variational calculation with the Gutzwiller projector

$$\mathscr{P}_G = \Pi_i\left(1+(g-1)n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}\right) \tag{17}$$

to reduce the weights of configurations with double occupancy in the AF reference state. Thus, one aims at minimising :

$$\langle\mathscr{H}\rangle(\varphi,g) \equiv \frac{\langle\Phi_{\text{ref}}|\mathscr{P}_G\mathscr{H}\mathscr{P}_G|\Phi_{\text{ref}}\rangle}{\langle\Phi_{\text{ref}}|\mathscr{P}_G\mathscr{P}_G|\Phi_{\text{ref}}\rangle} \tag{18}$$

with respect to φ and g. While the evaluation of the norm of the projected wave-function and the expectation value of the interaction energy is straightforward, the one of the kinetic energy is more tedious. Yet, symmetries of the AF background greatly simplify the calculation since all hopping contributions are equal. For instance, from the

© 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

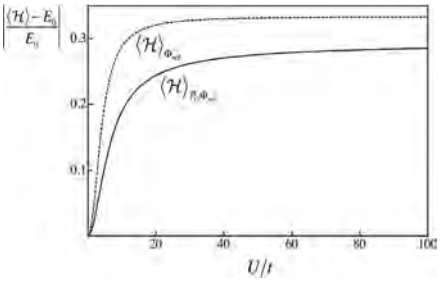


Figure 3 Ground-state energy from antiferromagnetic Gutzwiller wave-function (full line) and in mean-field theory (dashed line), relative to the exact one.

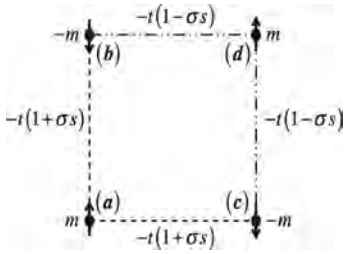


Figure 4 Mean-field like scheme defining the reference Slater determinant for the SEMF approach with spin and total momentum projection.

invariance of $|\Phi_{\rm ref}\rangle$ under the product $U_y = T_y R(0,\pi,0)$, one has:

$$\langle\Phi_{\rm ref}|\mathscr{P}_G c^\dagger_{a\uparrow} c_{c\uparrow}\mathscr{P}_G|\Phi_{\rm ref}\rangle = \langle\Phi_{\rm ref}|\mathscr{P}_G U_y^\dagger c^\dagger_{a\uparrow} c_{c\uparrow} U_y \mathscr{P}_G|\Phi_{\rm ref}\rangle = \langle\Phi_{\rm ref}|\mathscr{P}_G c^\dagger_{b\downarrow} c_{d\downarrow}\mathscr{P}_G|\Phi_{\rm ref}\rangle \quad (19)$$

where we have used the invariance of the Gutzwiller operator under symmetry transformations of the Hamiltonian. The average energy (12) is finally obtained as:

$$\langle\mathscr{H}\rangle_{\mathscr{P}_G\Phi_{\rm ref}} = \left(-8tg\sin(\varphi)\cos(\varphi) + 2Ug^2\sin^2(\varphi)\right) \quad (20)$$
$$\times \frac{\left[(1+g)^2\sin^2(\varphi) + 4\cos^2(\varphi)\right]}{4\cos^4(\varphi) + 8g^2\cos^2(\varphi)\sin^2(\varphi) + (1+g^2)^2\sin^4(\varphi)}$$

Minimising Eq. (20) with respect to g and φ reveals that the relative energy difference with the exact solution increases with U and saturates to 28% for $U\to\infty$ as shown in Fig. 3. Nevertheless, the Gutzwiller projection improves the simple Hartree-Fock approximation which is recovered by imposing the staggered magnetisation m to solve the self-consistency condition $m = \langle n_{a\uparrow} - n_{a\downarrow}\rangle_{\Phi_{\rm ref}}$. This relation is equivalent to require a zero derivative of $\langle\mathscr{H}\rangle_{\Phi_{\rm ref}}$ with respect to m. The energy obtained with such a mean-field solution is also displayed in Fig. 3 and gives a relative error of 33% in the strong coupling limit of the Hubbard model.

4 The exact ground-state as a symmetry projected wave-function

In the spirit of the SEMF methodology, breaking symmetries in the underlying reference state followed by their restoration is a way to recover the small part of the correlation energy that cannot be reached by the only projection onto the spin-singlet subspace. We consider here a scheme obtained by adding a bond-spin contribution to an antiferromagnetic order, as depicted in Fig. 4. As a result, the Slater determinant $|\Phi_{\rm ref}\rangle$ is built from the lowest energy eigenstates of the mean-field like Hamiltonian:

$$h^{\rm ref}_\sigma[m,s] = \begin{pmatrix} \frac{U}{2}(1-\sigma m) & -t(1+\sigma s) & -t(1+\sigma s) & 0 \\ -t(1+\sigma s) & \frac{U}{2}(1+\sigma m) & 0 & -t(1-\sigma s) \\ -t(1+\sigma s) & 0 & \frac{U}{2}(1+\sigma m) & -t(1-\sigma s) \\ 0 & -t(1-\sigma s) & -t(1-\sigma s) & \frac{U}{2}(1-\sigma m) \end{pmatrix} \quad (21)$$

The SEMF variational ansatz then results from the projection on zero-spin and total momentum $\mathbf{K} = (0,0)$:

$$|\Psi\rangle = \mathscr{P}^{(\mathbf{K}=0)}\mathscr{P}^{(S=0)}|\Phi_{\rm ref}\rangle \quad (22)$$

where $\mathscr{P}^{(\mathbf{K}=0)} = \frac{1}{4}\left(\mathbf{I} + T_x + T_y + T_{x+y}\right)$ ensures the invariance under translations T_x, T_y, T_{x+y} by one lattice spacing along the directions $\mathbf{e_x}$, $\mathbf{e_y}$, $\mathbf{e_x}+\mathbf{e_y}$ [45]. Through similar steps as for spin projection, the SEMF energy is given by

$$E^{(S=0,\mathbf{K}=0)} = \frac{3(1+s^2)}{2} \times \frac{-8t\left(\tilde{m}s^2 + (2+s^2)A\right) + U(1+s^2)\left(6+\tilde{m}^2+2s^2-\tilde{m}A\right)]}{\tilde{m}s^2A + 2(1+s^2)(6+6s^2+s^4) + \tilde{m}^2(2+3s^2+2s^4)} \quad (23)$$

with $A \equiv \sqrt{4(1+s^2)+\tilde{m}^2}$. In order to solve analytically the minimum equations, it is convenient to introduce

 © 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

Ann. Phys. (Berlin) **526**, No. 9–10 (2014)

annalen der physik

Original Paper

new variables, ξ and η. They are defined as:

$$\xi \equiv \frac{2(2+s^2)+\tilde{m}\left(\tilde{m}+\sqrt{4(1+s^2)+\tilde{m}^2}\right)}{2\left(\tilde{m}+\sqrt{4(1+s^2)+\tilde{m}^2}\right)}$$
$$\eta \equiv \frac{2}{\sqrt{4(1+s^2)+\tilde{m}^2}-\tilde{m}}, \quad (24)$$

and allow to cast the energy (23) in the form

$$E^{(S=0,\mathbf{K}=0)} = \frac{3}{2}\frac{-16\xi\eta^2 t + U(1+2\eta^2)}{4\xi^2\eta^2+3\eta^2-2\xi\eta+1}. \quad (25)$$

Minimisation with respect to ξ and η yields:

$$\xi^2 4\eta(4\eta t - U) - \xi\left((2\eta^2-1)U+16\eta\right) = U\eta$$
$$\xi^2 32\eta^3 t - 4\xi U\eta(2\eta^2+1) = 8\eta t(3\eta^2+1) - U(2\eta^2+1) \quad (26)$$

Eq. (26) may be viewed as a linear system of equations in ξ and ξ^2 that is easily solved to express these variables in terms of η, *i.e.* $\xi = f(\eta), \xi^2 = g(\eta)$. Therefore, the relation $g(\eta) - f(\eta)^2 = 0$ has to be satisfied, which can be factorised into

$$\left[4\eta^4(48t^2+U^2) - 16\eta^3 tU + 4\eta^2(16t^2+U^2) - 8\eta tU + U^2\right]$$
$$\times\left[8\eta^3 t^2 - 6\eta^2 tU + \eta(U^2-8t^2) + tU\right] = 0 \quad (27)$$

The quartic factor $Q(\eta)$ as a function of $\eta > 0$ is strictly positive for any interaction strength. Indeed, $Q(0) = U^2$ and Q goes to infinity with η which proves the result in the case of a monotonic evolution. Otherwise, the value $Q(\eta_0)$ at an extremum point η_0 can be obtained from the remainder of the Euclidean division of the polynomial Q by its derivative :

$$Q(\eta_0) = \left[2\eta_0^2(768t^4+58t^2U^2+U^4) - 4\eta_0 tU(64t^2+U^2)\right.$$
$$\left. + U^2(46t^2+U^2)\right] / \left(48t^2+U^2\right) \quad (28)$$

Since the discriminant of the quadratic numerator is strictly negative, $Q(\eta_0) > 0$ and so $Q(\eta) > 0$ even for non-monotonic behaviour. Finally, the SEMF energy for $S = 0$ and $\mathbf{K} = (0, 0)$ is minimised if and only if η is a root of the cubic factor in Eq. (27). In this case, the difference $\eta - \xi = \eta - f(\eta)$ simplifies to the interaction, up to a constant:

$$\eta - \xi = \frac{U}{4t} \quad (29)$$

Thus, the cubic equation for η turns into a similar equation in terms of ξ:

$$16t^2\xi^3 - \xi(16t^2+U^2) - 2tU = 0 \quad (30)$$

This relation must be satisfied for the projected energy Eq. (25) to reach its minimum, given by

$$E_{\min}^{(S=0,\mathbf{K}=0)} = U - 4\xi t \quad (31)$$

We recover exactly Eq. (4) and Eq. (5) obtained in Section 2 after direct diagonalisation of the Hamiltonian matrix. Note that the result is valid for arbitrary interaction strength. This SEMF derivation provides an alternative view of the exact ground-state in terms of a one-parameter symmetry restored Slater determinant.

5 Conclusion

In this work we showed analytically that conventional Hartree-Fock approximations can be greatly improved to account for strong electronic correlations as long as the variational ansatz is enhanced by symmetry projections. For the 2×2 cluster, we demonstrated that restoring the spin-rotational invariance leads to an almost exact description. Furthermore, we established that the more symmetry breakings in the underlying Slater determinant followed by their restoration, the better the SEMF approach will be. Specifically, spin-singlet and total momentum projections are sufficient to recover the exact ground-state for any interaction strength. Combined with previous numerical results on larger cells [35], the present work highlights the SEMF method as a reliable starting point to elucidate correlations that spontaneously emerge from the Hubbard model at low energy. Furthermore, SEMF is not limited to ground-state quantum numbers and reliable excited states in terms of symmetry restored wave-functions may also be obtained to ultimately compute spectral functions for small clusters [44]. This could provide a basis for devising a new quantum solver to treat such clusters when embedded in self-consistent bathes, as arising in DMFT approaches.

This work was supported by the Région Basse-Normandie, and by the Ministère de la Recherche.

Key words. Low-dimensional systems, exact diagonalisation, variational methods.

References

[1] J. H. de Boer and E. J. W. Verwey, Proc. Phys. Soc. **49**, 59 (1937).
[2] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
[3] C. S. Koonce, M L. Cohen, J. F. Schooley, W. R. Hosler, and E. R. Pfeiffer, Phys. Rev. **163**, 380 (1967).

© 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

[4] Y. Tokura, Y. Taguchi, Y. Okada, Y. Fujishima, T. Arima, K. Kumagai, and Y. Iye, Phys. Rev. Lett. **70**, 2126 (1993).
[5] M. L. Medarde, J. Phys.: Condens. Matt. **9**, 1679 (1997).
[6] R. von Helmolt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, Phys. Rev. Lett. **71**, 2331 (1993); Y. Tomioka, A. Asamitsu, Y. Moritomo, H. Kuwahara, and Y. Tokura, Phys. Rev. Lett. **74**, 5108 (1995); B. Raveau, A. Maignan, and V. Caignaert, J. Solid State Chem. **117**, 424 (1995); A. Maignan, C. Simon, V. Caignaert, and B. Raveau, Solid State Commun. **96**, 623 (1995).
[7] H. Ohta, S.-W. Kim, Y. Mune, T. Mizoguchi, K. Nomura, S. Ohta, T. Nomura, Y. Nakanishi, Y. Ikuhara, M. Hirano, H. Hosono, and K. Koumoto et al. Nature Mat. **6**, 129 (2007); R. Frésard, S. Hébert, A. Maignan, L. Pi, and J. Hejtmanek, Phys. Lett. A **303**, 223 (2002); A. Maignan, V. Eyert, C. Martin, S. Kremer, R. Frésard, and D. Pelloquin, Phys. Rev. B **80**, 115103 (2009).
[8] A. P. Malozemoff, J. Mannhart, and D. Scalapino, Phys. Today **58**, 41 (2005).
[9] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Physik B **64**, 189 (1986); B. Raveau, C. Michel, M. Hervieu, and D. Groult, Crystal Chemistry of High-T_c Superconducting Copper Oxides, Springer Series in Material Science Vol. 15 (Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1991).
[10] H. Kawazoe, H. Yasakuwa, H. Hyodo, M. Kurota, H. Yanagi, and H. Hosono, Nature **389**, 939 (1997).
[11] N. Büttgen, H.-A. Krug von Nidda, W. Kraetschmer, A. Günther, S. Widmann, S. Riegg, A. Krimmel, and A. Loidl, J. Low Temp. Phys. **161**, 148 (2010); P. Limelette, V. TaPhuoc, F. Gervais, and R. Frésard, Phys. Rev. B. **87**, 035102 (2013).
[12] L. Li, C. Richter, S. Paetel, T. Kopp, J. Mannhart, and R. C. Ashoori, Science **332**, 825 (2011).
[13] N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, L. Fitting Kourkoutis, G. Hammerl, C. Richter, C. W. Schneider, T. Kopp, A.-S. Rüetschi, D. Jaccard, M. Gabay, D. A. Muller, J.-M. Triscone, and J. Mannhart, Science **317**, 1196 (2007).
[14] S. Aasland, H. Fjellvag, and B. C. Hauback, Solid State Comm. **101**, 187 (1997); H. Kageyama, K. Yoshimura, K. Kosuge, H. Mitamura, and T. Goto, J. Phys. Soc. Japan **66**, 1607 (1997); A. Maignan, C. Michel, A. C. Masset, C. Martin, and B. Raveau, Eur. Phys. J. B **15**, 657 (2000).
[15] U. Lüders, W. C. Sheets, A. David, W. Prellier, and R. Frésard, Phys. Rev. B **80**, 241102(R) (2009).
[16] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 59 (1963).
[17] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Lond. A **276**, 238 (1963).
[18] J. Kanamori, Prog. Theo. Phys. **30**, 275 (1963).
[19] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
[20] E. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1455 (1968).
[21] W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
[22] E. Müller-Hartmann, Z. Phys. B **74**, 507 (1989).
[23] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
[24] F. F. Assaad and M. Imada, Phys. Rev. Lett. **76**, 3176 (1996).
[25] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985).
[26] A. Avella and F. Mancini, Theoretical Methods for Strongly Correlated Systems (Springer Verlag, Berlin, 2011).
[27] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. Hettler, Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005).
[28] A.-M. S. Tremblay, B. Kyung, and D. Sénéchal, Low Temp. Phys. **32**, 424 (2006).
[29] B. Edegger, V. N. Muthukumar, and C. Gros, Adv. Phys. **56**, 927 (2007).
[30] M. Raczkowski, R. Frésard, and A. M. Oleś, Europhys. Lett. **76**, 128 (2006).
[31] G. Seibold and J. Lorenzana, Phys. Rev. B **69**, 134513 (2004).
[32] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, and R. T. Scalettar, Phys. Rev. B **40**, 506 (1989).
[33] E. Kozik, K. Van Houcke, E. Gull, L. Pollet, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer, EPL **90**, 10004 (2010).
[34] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
[35] O. Juillet and R. Frésard, Phys. Rev. B **87**, 115136 (2013).
[36] O. Juillet and R. Frésard, Supplemental Material at http://link.aps.org/supplemental/10.1103/PhysRevB.87.115136.
[37] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989).
[38] A. Moreo and E. Dagotto, Phys. Rev. B **41**, 9488 (1990).
[39] C. Noce and M. Cuoco, Phys. Rev. B **54**, 13047 (1996).
[40] R. Schumann, Ann. Phys. (Leipzig) **11**, 49 (2002).
[41] H. Yokohama, M. Ogata, Y. Tanaka, K. Kobayashi, and H. Tsuchiura, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 014707 (2013); T. Yanagisawa, M. Miyazaki, and K. Yamagi, J. Mod. Phys. **4**, 33 (2013).
[42] D. Tahara and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 114701 (2008).
[43] K. W. Schmid, T. Dahm, J. Margueron, and H. Müther, Phys. Rev. B **72**, 085116 (2005).
[44] R. Rodríguez-Guzmán, K. W. Schmid, C. A. Jiménez-Hoyos, and G. E. Scuseria, Phys. Rev. B **85**, 245130 (2012).
[45] M. Hamermesh, Group Theory and its Application to Physical Problems (Addison-Wesley, Reading, MA, 1962).

 © 2014 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

Chapitre 2

Stratégies variationnelles de champ moyen enchevêtré par les symétries pour le modèle de Fermi-Hubbard

Dans ce chapitre, nous détaillons les fondements théoriques des schémas d'approximation basés sur l'introduction de corrélations à travers la restauration de symétries délibérément brisées dans un ansatz variationnel en forme d'une superposition d'états Hartree-Fock et/ou Bogoliubov-de Gennes. Après une revue des principales propriétés de ces fonctions d'onde, les invariances de l'Hamiltonien de Hubbard sont présentées ainsi que les techniques de projection sur les nombres quantiques qui leur sont associés. Une attention particulière est enfin portée à la détermination des équations auto-consistantes auxquelles doivent satisfaire plusieurs états factorisés, non orthonormés et à symétries restaurées, pour conduire à une approximation optimale de l'état fondamental.

Par la suite, nous désignerons par $d = 2N_{\vec{r}}$ la dimension de l'espace des états $\mathcal{H}^{(1)}$ à un corps pour un cluster formé d'un nombre $N_{\vec{r}}$ de sites. Le nombre total de fermions sera noté N et il sera supposé pair.

I. Etats factorisés d'un système de fermions

I.a) Les déterminants de Slater

En étant définis comme des produits antisymétrisés d'états individuels, les déterminants de Slater, également appelés états de Hartree-Fock (HF) et que nous désignerons de façon générique par $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$, constituent indubitablement les fonctions d'onde les plus simples d'un système de fermions. Ils jouissent à ce titre d'un rôle privilégié dans les traitements théoriques du problème à $N-$corps fermionique, même s'ils n'en fournissent une solution exacte qu'en l'absence d'interactions. Par exemple, les diagonalisations exactes du modèle de Hubbard sur de petites cellules se fondent sur la base orthonormée des états factorisés $\prod_{n=1}^{N}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}_n\sigma_n}\left|\ \right\rangle$ obtenus en considérant toutes les répartitions des N particules sur les $N_{\vec{r}}$ sites du cluster qui respectent le principe d'indiscernabilité. De façon plus générale, chaque fermion sera caractérisé par une amplitude de probabilité d'être localisé sur chacun des sites $\vec{r}$ avec une des deux projections σ du spin. Dans ce cas, on écrira donc $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \prod_{n=1}^{N}\hat{c}^{\dagger}_{\phi_n}\left|\ \right\rangle$ où $\hat{c}^{\dagger}_{\phi_n} = \sum_{\vec{r}\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\phi_{\vec{r}\sigma,n}$. Il est alors immédiat de vérifier la normalisation du déterminant dès lors que les états individuels peuplés $\left|\phi_n\right\rangle$ sont orthonormés. Finalement, en complétant leur ensemble d'une famille de vecteurs $\left\{\left|\overline{\phi}_1\right\rangle,\cdots,\left|\overline{\phi}_{d-N}\right\rangle\right\}$ pour disposer d'une

base orthonormée de l'espace $\mathcal{H}^{(1)}$ à un corps, l'état HF apparaît comme un vide pour les opérateurs $\hat{c}^{\dagger}_{\phi_n}$ et $\hat{c}_{\bar{\phi}_\nu} = \sum_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}\sigma} \bar{\phi}^{*}_{\vec{r}\sigma,\nu}$ issus d'une transformation canonique unitaire des opérateurs fermioniques originaux $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}, \hat{c}_{\vec{r}\sigma}$:

$$\hat{c}^{\dagger}_{\phi_n} \left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = 0,\ \hat{c}_{\bar{\phi}_\nu} \left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = 0 \tag{1}$$

La méthode du champ moyen HF constitue certainement l'application la plus répandue de ces déterminants de Slater généraux. L'état fondamental d'un système de fermions en interaction y est alors restreint à un unique déterminant $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$ obtenu variationnellement, c'est-à-dire dont les états occupés $\left\{\left|\phi^{(0)}_n\right\rangle\right\}$ minimisent l'énergie moyenne. La prise en compte des corrélations au delà du champ moyen peut alors être envisagée au travers de couplages entre cette solution optimale et ses excitations « particule-trou », c'est-à-dire les déterminants $\hat{c}^{\dagger}_{\bar{\phi}^{(0)}_\nu} \hat{c}_{\phi^{(0)}_n} \left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$, $\hat{c}^{\dagger}_{\bar{\phi}^{(0)}_\mu} \hat{c}^{\dagger}_{\bar{\phi}^{(0)}_\nu} \hat{c}_{\phi^{(0)}_m} \hat{c}_{\phi^{(0)}_n} \left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$ $\left(\text{avec } \mu < \nu \text{ et } m < n\right), \cdots$ obtenus en promouvant un ou plusieurs fermions vers les états à un corps $\left\{\left|\bar{\phi}^{(0)}_\nu\right\rangle\right\}$ initialement inoccupés. L'ensemble des états HF ainsi générés forme en effet une base orthonormée dans laquelle l'Hamiltonien peut être diagonalisé. Cette démarche est couramment mise en œuvre en chimie quantique [She99] ou en physique nucléaire [Cau05, Pill05], au prix de sévères troncations de la base afin de contourner la complexité exponentielle du problème. Alternativement, on peut remarquer que des superpositions cohérentes spécifiques de $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$ et de toutes les configurations particule-trou qui en sont issues correspondent en réalité à de nouveaux états HF. Plus précisément, le théorème de Thouless [Tho60] permet de paramétriser un déterminant $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ quelconque, mais non orthogonal à $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$, au travers de $(d-N)N$ variables complexes $Z^{(HF)}_{\nu n}$ selon :

$$\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \mathcal{K}^{(HF)} \exp\left(\hat{Z}^{(HF)}\right) \left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle,\ \hat{Z}^{(HF)} = \sum_{\nu=1}^{d-N} \sum_{n=1}^{N} Z^{(HF)}_{\nu n}\ \hat{c}^{\dagger}_{\bar{\phi}^{(0)}_\nu} \hat{c}_{\phi^{(0)}_n} \tag{2}$$

où $\mathcal{K}^{(HF)}$ est un facteur de normalisation. La preuve résulte immédiatement de la formule de Glauber :

$$\exp\left(\hat{Z}^{(HF)}\right) \left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle = \prod_{n=1}^{N} \exp\left(\hat{Z}^{(HF)}\right) \hat{c}^{\dagger}_{\phi_n} \exp\left(-\hat{Z}^{(HF)}\right) \left|\ \right\rangle = \prod_{n=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{\varphi_n} \left|\ \right\rangle \tag{3}$$

avec $\left|\varphi_n\right\rangle = \left|\phi^{(0)}_n\right\rangle + \sum_{\nu=1}^{d-N} \left|\phi^{(0)}_\nu\right\rangle Z^{(HF)}_{\nu n}$. Or, on peut toujours décomposer les états individuels occupés du déterminant $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ sur la base orthonormée $\left\{\left|\phi^{(0)}_1\right\rangle, \cdots, \left|\phi^{(0)}_N\right\rangle, \left|\bar{\phi}^{(0)}_1\right\rangle, \cdots, \left|\bar{\phi}^{(0)}_{d-N}\right\rangle\right\}$ relative à l'état HF de référence $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$:

$$\left|\phi_n\right\rangle = \sum_{m=1}^{N} \left|\phi^{(0)}_m\right\rangle A_{mn} + \sum_{\nu=1}^{d-N} \left|\bar{\phi}^{(0)}_\nu\right\rangle B_{\nu n} \tag{4}$$

On obtient ainsi directement $\left\langle\Phi^{(HF_0)}\middle|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \det(A)$ pour le recouvrement des deux déterminants, si bien que leur non-orthogonalité implique que la matrice A est inversible. Dès lors, le développement Eq. (4) peut être réécrit sous la forme $\left|\phi_n\right\rangle = \sum_{m=1}^{N} \left|\varphi_m\right\rangle A_{mn}$ si l'on

pose $Z^{(HF)} = BA^{-1}$. D'où $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \prod_{n=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{\phi_n} \left|\ \right\rangle = \det(A) \prod_{n=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{\varphi_n} \left|\ \right\rangle$, ce qui prouve le théorème Eq. (2) avec $\mathcal{K}^{(HF)} = \det(A)$. Outre son intérêt pratique pour écrire un déterminant de Slater en fonction de variables indépendantes, ce résultat promeut également les fonctions d'onde HF au rang d'états cohérents pour l'algèbre de Lie du groupe unitaire $U(d)$ généré par les opérateurs bi-fermioniques $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}$ [Zha90a]. En conséquence, les états HF forment une base surcomplète en autorisant une résolution de l'identité par intégration sur les amplitudes de Thouless :

$$\int \mathcal{D}\Phi^{(HF)} \left|\Phi^{(HF)}\right\rangle\left\langle\Phi^{(HF)}\right| = \hat{1}_N \tag{5}$$

où $\mathcal{D}\Phi^{(HF)} \propto \prod_{\nu=1}^{d-N}\prod_{n=1}^{N} d\,\mathrm{Re}\,Z^{(HF)}_{\nu n}\, d\,\mathrm{Im}\,Z^{(HF)}_{\nu n} \left[\det\left(1_N + Z^{(HF)\dagger} Z^{(HF)}\right)\right]^{-d}$ est la mesure invariante de Haar associée au groupe $U(d)$. Signalons, par ailleurs, que ces résultats demeurent valides même si le déterminant de référence $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$ n'est pas issu de l'approximation de champ moyen HF pour l'état fondamental.

Tout état corrélé d'un système de fermions peut donc également être reconstruit par combinaison linéaire de fonctions d'onde HF non orthogonales. Les méthodes Monte-Carlo quantiques à champs auxillaires (AFQMC) se fondent sur un tel schéma en réalisant un échantillonnage aléatoire de la relation de fermeture Eq. (5). La variété des déterminants de Slater y est plus précisément explorée au travers d'un mouvement Brownien en temps imaginaire résultant d'une reformulation stochastique du propagateur $\exp\left(-\tau\hat{H}\right)$, $\tau \to \infty$ grâce à une linéarisation du terme d'interaction par la transformation de Hubbard-Stratonovich [Hir83a]. Pour le modèle de Hubbard en régime répulsif, seules des cellules demi-remplies de fermions non polarisés en spin garantissent des poids positifs à toutes les réalisations et les simulations correspondantes ont confirmé l'émergence d'une phase antiferromagnétique [Hir83b, Hir85, Whi89]. En dehors de cette limite, l'échantillonnage devient NP-complexe [Tro05] en raison de sa contamination par une population statistiquement significative de déterminants qui sont collectivement orthogonaux à l'état fondamental. Cette pathologie, communément appelée « problème de signe », induit une sévère dégradation du rapport signal sur bruit qui rend impossible la détermination des propriétés de l'état fondamental pour des cellules de grande taille et/ou des fortes interactions U/t . Dès lors, le modèle de Hubbard répulsif dopé en trous ne peut être appréhendé dans le cadre AFQMC qu'en faisant appel à un état fondamental approché grâce auquel les réalisations pathologiques sont éliminées [Zha95, Zha97a]. En contraignant les chemins stochastiques à l'aide du déterminant résultant d'un traitement de champ moyen HF, des ondes de densité de spin et de charge entrelacées sous forme de « stripes » ont pu être mises en évidence en géométrie bidimensionnelle [Cha10], essentiellement pour des dopages $\delta \leq 1/8$ et des constantes de couplage $U/t \geq 6$. En revanche, la problématique d'une supraconductivité/superfluidité avec la symétrie $d_{x^2-y^2}$ demeure ouverte dans la mesure où seule une signature évanescente et peu robuste à l'augmentation de la taille des clusters considérés a pu être révélée [Zha97b]. Aucun changement significatif n'a été en outre été constaté en restreignant les réalisations QMC au travers d'une fonction d'onde BCS [Gue99]. Néanmoins, un tel ansatz n'est pas plus pertinent qu'une solution HF pour approximer l'état fondamental dans le secteur $U > 0$ puisqu'aucun gain en énergie ne peut être obtenu dans le cadre du champ moyen BCS via le développement d'une instabilité dans le canal

d'appariement. Au final, même si les approches AFQMC du modèle de Hubbard répulsif continuent à faire régulièrement l'objet de multiples développements [Aim07a, Aim07b, Cor04, Cor08, Jui07, Cor08, Sor11], elles ne peuvent à ce jour qu'échantillonner partiellement la base surcomplète des déterminants de Slater et l'état fondamental qui en résulte reste en général biaisé par le recours à des fonctions d'onde d'essai simples pour contourner le problème de signe.

La relation de fermeture Eq.(5) ouvre alternativement l'opportunité de développer des schémas variationnels d'approximation pour un système de fermions en interaction au travers de sa discrétisation avec un nombre fini de fonctions d'onde HF mutuellement non orthogonales. Dans ce contexte, la méthode du groupe de renormalisation de l'intégrale de chemin, connue sous l'acronyme « PIRG » («Path Integral Renormalization Group ») et développée par M. Imada & *al* [Kas01, Miz04], se propose d'obtenir un état fondamental approché par combinaison linéaire de déterminants fixés avec des coefficients variationnellement optimisés. Ces amplitudes sont donc déterminées par un problème aux valeurs propres généralisé traduisant l'équation de Schrödinger dans la base non orthonormée considérée. Les états HF retenus sont en outre sélectionnés, parmi ceux que génère l'approche AFQMC, selon leur efficacité pour décroître l'énergie dans le sous-espace de dimension choisie. Avec l'Hamiltonien de Hubbard et des interactions répulsives intermédiaires $U/t \leq 6$, l'approche « PIRG » se montre en général performante, au moins jusqu'à des clusters de taille 10×10. Elle a essentiellement permis d'élucider les phases magnétiques au demi-remplissage en présence d'une frustration géométrique induite par une amplitude de saut diagonal, c'est-à-dire d'un site à ses seconds plus proches voisins [Miz06]. Signalons par ailleurs que l'algorithme PIRG a été implémenté en physique moléculaire [Koj09] et qu'une méthode analogue adaptée au modèle en couches nucléaire [Hon96] constitue actuellement un des cadres de référence pour accéder à la spectroscopie de basse énergie. Finalement, l'utilisation de superpositions finies de déterminants non-orthogonaux est également au cœur du schéma de champ moyen HF résonant (« Resonating Hartree-Fock ») [Fuk88]. Les vecteurs de base n'y sont plus générés stochastiquement mais optimisés par minimisation de l'énergie, exprimée alors comme une fonctionnelle d'amplitudes de Thouless assurant la paramétrisation des différents déterminants. Récemment, une version légèrement dégradée a été proposée afin de pouvoir considérer des sous-espaces de plus grande dimension [Rod13]. Nommée « FED » (« Few Déterminants méthodology »), elle vise à introduire progressivement les différentes fonctions d'onde HF en les optimisant selon un processus séquentiel, c'est-à-dire en laissant inchangés les vecteurs de base précédemment déterminés. Les deux approximations ont été appliquées au modèle de Hubbard 2D dans la limite de fortes corrélations [Tom09, Rod14] et conduisent à des états fondamentaux approchés exhibant des « stripes » autour du dopage $\delta = 1/8$, en adéquation avec les simulations AFQMC à chemins contraints.

I.b) Les vides de Bogoliubov

Tout comme la condensation de Bose-Einstein des systèmes de bosons, les phases supraconductrices ou superfluides de fermions en interaction se réfèrent à l'émergence d'une cohérence quantique à l'échelle macroscopique. Leur identification sur le plan théorique a été élucidée par Yang [Yan62] en généralisant aux fermions le critère de Penrose-Onsager [Pen56] pour un état condensé de bosons. Il s'agit précisément de déceler une valeur propre dominante N_0 de l'ordre du nombre N de particules dans le spectre de la matrice densité

réduite à deux corps $\rho^{(2)}_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2,\,\vec{r}_1'\sigma_1'\vec{r}_2'\sigma_2'} = \left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1'\sigma_1'}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}_2'\sigma'}\hat{c}_{\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}_{\vec{r}_1\sigma_1}\right\rangle$. Cette propriété, autorisée[1] par les propriétés mathématiques de $\rho^{(2)}$, traduit la condensation de paires de Cooper définies par le vecteur propre associé $F_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2}$ au travers de l'opérateur $\hat{F}^\dagger = \frac{1}{2}\sum_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2} F_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1\sigma_1}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}_2\sigma_2}$ [Ort07] et dont l'algèbre est approximativement celle des bosons :

$$\left[\hat{F},\hat{F}^\dagger\right] = \hat{1} + \sum_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2\vec{r}_3\sigma_3} F_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_3\sigma_3}F^*_{\vec{r}_3\sigma_3\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1\sigma_1}\hat{c}_{\vec{r}_2\sigma_2} \tag{6}$$

(où nous avons supposé le vecteur $F_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2}$ normalisé à l'unité). En outre, il en résulte un ordre non-diagonal à longue distance dans la densité réduite $\rho^{(2)}$ au sens où :

$$\rho^{(2)}_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2,\,\vec{r}_1'\sigma_1'\vec{r}_2'\sigma_2'} \to N_0 F^*_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2}F_{\vec{r}_1'\sigma_1'\vec{r}_2'\sigma_2'} \tag{7}$$

dans la limite d'une distance $\left\|\vec{R}-\vec{R}'\right\|$ infiniment grande entre les centres de masse $\vec{R} = \left(\vec{r}_1+\vec{r}_2\right)/2$ et $\vec{R}' = \left(\vec{r}_1'+\vec{r}_2'\right)/2$.

La fonction d'onde de Bogoliubov-de Gennes (BdG), mieux connue en physique nucléaire comme l'ansatz de Hartree-Fock-Bogoliubov [Bla85, Rin80], vise à reproduire de telles propriétés dans le cadre simple d'un état factorisé $\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle$. L'objectif est ainsi de pouvoir écrire la densité réduite $\rho^{(2)}_{\vec{r}_1\sigma_1\vec{r}_2\sigma_2,\,\vec{r}_1'\sigma_1'\vec{r}_2'\sigma_2'}$ essentiellement comme le produit $\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1'\sigma_1'}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}_2'\sigma'}\right\rangle\left\langle \hat{c}_{\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}_{\vec{r}_1\sigma_1}\right\rangle$ de deux valeurs moyennes anormales à grande distance $\left\|\vec{R}-\vec{R}'\right\|$ et donc de pouvoir facilement mettre en exergue un ordre supraconducteur ou superfluide. Il est en conséquence nécessaire de briser la symétrie de jauge $U(1)$ associée à la conservation du nombre de particules. Dès lors, on pose, à un facteur de normalisation près qui sera détaillé par la suite :

$$\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle \propto \prod_{n=1}^{d}\hat{\gamma}_n\left|\ \right\rangle \tag{8}$$

où les opérateurs de quasiparticules $\hat{\gamma}_n$ $\left(n\in\{1,\cdots,d\}\right)$ obéissent à la statistique de Fermi-Dirac et sont linéairement reliés aux opérateurs de création/annihilation d'un fermion sur un site $\vec{r}$ avec le spin σ :

$$\hat{\gamma}_n = \sum_{\vec{r}\sigma}\left(\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}V^*_{\vec{r}\sigma,n} + \hat{c}_{\vec{r}\sigma}U^*_{\vec{r}\sigma,n}\right), \text{ soit } \begin{pmatrix}\hat{\gamma}\\ \hat{\gamma}^\dagger\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}U^\dagger & V^\dagger\\ V^T & U^T\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{c}\\ \hat{c}^\dagger\end{pmatrix} \equiv \mathcal{B}^\dagger\begin{pmatrix}\hat{c}\\ \hat{c}^\dagger\end{pmatrix} \tag{9}$$

Ainsi, $\hat{\gamma}_n\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle = 0$ et l'état BdG apparaît comme un vide de quasiparticules. De plus, les relations d'anticommutation canoniques $\left[\hat{\gamma}_n,\hat{\gamma}_p\right]_+ = 0$, $\left[\hat{\gamma}_n,\hat{\gamma}_p^\dagger\right]_+ = \delta_{n,p}\hat{1}$ sont respectées dès lors que la matrice $\mathcal{B}$ de la transformation de Bogoliubov Eq. (9) vérifie $\mathcal{B}^\dagger\mathcal{B} = 1$. En général,

[1] Dans la mesure où $Tr\left(\rho^{(2)}\right) = N(N-1)$, on pourrait s'attendre à ce que N_0 soit de l'ordre de N^2. En réalité, le principe d'exclusion de Pauli interdit un tel comportement en contraignant N_0 à satisfaire l'inégalité $N_0 \le N\left(1+\frac{2-N}{d}\right)$ [Yan62].

on impose en complément $\mathcal{B}\mathcal{B}^{\dagger}=1$ pour assurer l'unitarité de $\mathcal{B}$ et donc obtenir immédiatement les opérateurs physiques $\hat{c}_{\vec{r}\sigma},\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$ en termes des quasiparticules :

$$\begin{pmatrix} \hat{c} \\ \hat{c}^{\dagger} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} U & V^{*} \\ V & U^{*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{\gamma} \\ \hat{\gamma}^{\dagger} \end{pmatrix}\Leftrightarrow \hat{c}_{\vec{r}\sigma}=\sum_{n}\left(U_{\vec{r}\sigma,n}\hat{\gamma}_{n}+V^{*}_{\vec{r}\sigma,n}\hat{\gamma}^{\dagger}_{n}\right) \tag{10}$$

Ces résultats peuvent également être formulés en adjoignant à chaque état individuel un label $\varpi\in\{p,h\}$ pour indiquer s'il se réfère à une particule (p) ou un trou (h). En d'autres termes, on définit $\hat{c}^{\dagger}_{p,\vec{r}\sigma}=\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$ et $\hat{c}^{\dagger}_{h,\vec{r}\sigma}=\hat{c}_{\vec{r}\sigma}$. L'espace à un corps étendu ainsi obtenu s'identifie mathématiquement au produit tensoriel $\mathcal{H}^{(1)}_{ex}=\mathcal{H}^{(ph)}\otimes\mathcal{H}^{(1)}$ où $\mathcal{H}^{(ph)}$ désigne l'espace abstrait de dimension deux sous-tendu par une base orthonormée $\left\{|e_p\rangle,|e_h\rangle\right\}$ attachée aux deux saveurs « particule », « trou ». Dans ce contexte, on vérifie immédiatement que le caractère unitaire de la matrice de Bogoliubov $\mathcal{B}$ équivaut à doter l'espace étendu $\mathcal{H}^{(1)}_{ex}$ d'une base orthonormée formée des vecteurs $|\gamma_n\rangle=\begin{pmatrix} |V^{*}_{n}\rangle \\ |U^{*}_{n}\rangle \end{pmatrix}$, $|\overline{\gamma}_n\rangle=\begin{pmatrix} |U_{n}\rangle \\ |V_{n}\rangle \end{pmatrix}$ où $|U_n\rangle=\sum_{\vec{r}\sigma}|\vec{r}\sigma\rangle U_{\vec{r}\sigma,n}$, $|U^{*}_{n}\rangle=\sum_{\vec{r}\sigma}|\vec{r}\sigma\rangle U^{*}_{\vec{r}\sigma,n}$ $\left(\text{et de même pour } |V_n\rangle,\ |V^{*}_{n}\rangle\right)$ sont définis à partir des amplitudes de la transformation:

$$\sum_{n=1}^{d}\left(|\gamma_n\rangle\langle\gamma_n|+|\overline{\gamma}_n\rangle\langle\overline{\gamma}_n|\right)=1,\ \begin{cases} \langle\gamma_n|\gamma_p\rangle=\langle\overline{\gamma}_n|\overline{\gamma}_p\rangle=\delta_{n,p} \\ \langle\gamma_n|\overline{\gamma}_p\rangle=0 \end{cases} \tag{11}$$

En outre, les relations Eqs (9), (10) entre les opérateurs de fermions attachés au réseau et les quasiparticules s'écrivent alors simplement sous la forme :

$$\begin{cases} \hat{\gamma}_n=\sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\varpi,\vec{r}\sigma}\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\gamma_n\rangle=\sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\langle\overline{\gamma}_n|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma} \\ \hat{\gamma}^{\dagger}_n=\sum_{\omega,\vec{r}\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\omega,\vec{r}\sigma}\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\overline{\gamma}_n\rangle=\sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\langle\gamma_n|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma} \end{cases} \tag{12}$$

et

$$\begin{cases} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}=\sum_{n=1}^{d}\left(\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\overline{\gamma}_n\rangle\ \hat{\gamma}_n+\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\gamma_n\rangle\ \hat{\gamma}^{\dagger}_n\right) \\ \hat{c}^{\dagger}_{\varpi,\vec{r}\sigma}=\sum_{n=1}^{d}\left(\hat{\gamma}_n\langle\gamma_n|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle+\hat{\gamma}^{\dagger}_n\langle\overline{\gamma}_n|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle\right) \end{cases} \tag{13}$$

Ces développements montrent que l'opérateur $\hat{\gamma}_n$ dépend linéairement du ket $|\gamma_n\rangle$ ou du bra $\langle\overline{\gamma}_n|$, son adjoint $\hat{\gamma}^{\dagger}_n$ étant logiquement une fonction linéaire du ket $|\overline{\gamma}_n\rangle$ ou du bra $\langle\gamma_n|$.

Historiquement, la supraconductivité ou la superfluidité d'un système de fermions est associée à la fonction d'onde BCS exprimée en termes de couples $\left(|\varphi_\alpha\rangle,|\varphi_{\bar{\alpha}}\rangle\right)$ d'états individuels entre lesquels l'appariement s'établit et qui forment une base orthonormée :

$$\left|\Phi^{(BCS)}\right\rangle = \prod_{\alpha=1}^{d/2}\left(u_\alpha + v_\alpha \hat{c}^\dagger_{\varphi_\alpha}\hat{c}^\dagger_{\varphi_{\tilde{\alpha}}}\right)\left|\ \right\rangle \tag{14}$$

Ici u_α est l'amplitude de probabilité pour que le couple $\left(\left|\varphi_\alpha\right\rangle,\left|\varphi_{\tilde{\alpha}}\right\rangle\right)$ soit vide et v_α celle pour qu'il soit peuplé. La méthode du champ moyen BCS repose alors sur la minimisation de l'énergie dans l'ansatz Eq. (14) vis-à-vis de ces paramètres, les paires $\hat{c}^\dagger_{\varphi_\alpha}\hat{c}^\dagger_{\varphi_{\tilde{\alpha}}}$ mises en jeu étant fixées sur la base de considérations physiques. On conçoit ainsi aisément qu'une approche variationnelle plus complète puisse être obtenue en recherchant également la base $\left\{\left|\varphi_\alpha\right\rangle,\left|\varphi_{\tilde{\alpha}}\right\rangle\right\}$ optimale. En réalité, l'ansatz BdG répond à une telle problématique en pouvant se réécrire sous la forme BCS avec des états $\left\{\left|\varphi_\alpha\right\rangle,\left|\varphi_{\tilde{\alpha}}\right\rangle\right\}$ directement encodés dans la transformation de Bogoliubov. Dès lors, toute optimisation des matrices U et V impliquera simultanément celle de la structure interne des paires. La preuve d'un tel résultat se base sur le théorème de Bloch-Messiah-Zumino [Blo62, Zum62] selon lequel, il existe des matrices unitaires C et D telles que :

$$D^\dagger U C^\dagger = \begin{pmatrix} \underline{U}_1 & 0_{2\times2} & \cdots & 0_{2\times2} \\ 0_{2\times2} & \underline{U}_2 & \cdots & 0_{2\times2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0_{2\times2} & 0_{2\times2} & \cdots & \underline{U}_{d/2} \end{pmatrix} \equiv \underline{U}\ ,\ D^T V C^\dagger = \begin{pmatrix} \underline{V}_1 & 0_{2\times2} & \cdots & 0_{2\times2} \\ 0_{2\times2} & \underline{V}_2 & \cdots & 0_{2\times2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0_{2\times2} & 0_{2\times2} & \cdots & \underline{V}_{d/2} \end{pmatrix} \equiv \underline{V} \tag{15}$$

où les blocs 2×2 diagonaux $\underline{U}_\alpha$, $\underline{V}_\alpha$ $\left(\alpha\in\left\{1,\cdots,d/2\right\}\right)$ sont respectivement caractérisés par deux réels positifs u_α, v_α et sont donnés par

$$\underline{U}_\alpha = \begin{pmatrix} u_\alpha & 0 \\ 0 & u_\alpha \end{pmatrix},\ \underline{V}_\alpha = \begin{pmatrix} 0 & v_\alpha \\ -v_\alpha & 0 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Définissons alors la base orthonormée $\left\{\left|\varphi_\alpha\right\rangle,\left|\varphi_{\tilde{\alpha}}\right\rangle\right\}$ comme celle obtenue en appliquant la transformation unitaire D sur la famille $\left\{\left|\vec{r}\sigma\right\rangle\right\}$:

$$\left|\varphi_\alpha\right\rangle = \sum_{\vec{r}\sigma}\left|\vec{r}\sigma\right\rangle D_{\vec{r}\sigma,2\alpha-1},\ \left|\varphi_{\tilde{\alpha}}\right\rangle = \sum_{\vec{r}\sigma}\left|\vec{r}\sigma\right\rangle D_{\vec{r}\sigma,2\alpha} \tag{17}$$

Au travers de la décomposition précédente des matrices U et V sous leur forme canonique respective $\underline{U}$ et $\underline{V}$, les opérateurs de quasiparticules $\hat{\gamma}_n$ Eq. (9) de l'état BdG s'obtiennent ainsi immédiatement en termes de leurs homologues $\underline{\hat{\gamma}}_\alpha = u_\alpha \hat{c}_{\varphi_\alpha} - v_\alpha \hat{c}^\dagger_{\varphi_{\tilde{\alpha}}}$, $\underline{\hat{\gamma}}_{\tilde{\alpha}} = u_\alpha \hat{c}_{\varphi_{\tilde{\alpha}}} + v_\alpha \hat{c}^\dagger_{\varphi_\alpha}$ pour la fonction d'onde BCS Eq. (14) :

$$\hat{\gamma}_n = \sum_{\alpha=1}^{d/2}\left(\underline{\hat{\gamma}}_\alpha C^*_{2\alpha-1,n} + \underline{\hat{\gamma}}_{\tilde{\alpha}} C^*_{2\alpha,n}\right) \tag{18}$$

Il en résulte $\prod_{n=1}^{d}\hat{\gamma}_n\left|\ \right\rangle = \det\left(C^*\right)\prod_{\alpha=1}^{d/2}\underline{\hat{\gamma}}_\alpha\underline{\hat{\gamma}}_\alpha\left|\ \right\rangle$ compte tenu de l'algèbre anticommutative des différents facteurs. De plus, tous les produits $\underline{\hat{\gamma}}_\alpha\underline{\hat{\gamma}}_{\tilde{\alpha}}$ commutent et l'action de chacun d'entre eux sur le vide équivaut à celle de $u_\alpha v_\alpha \hat{c}_{\varphi_\alpha}\hat{c}^\dagger_{\varphi_\alpha} - v_\alpha^2 \hat{c}^\dagger_{\varphi_{\tilde{\alpha}}}\hat{c}^\dagger_{\varphi_\alpha}$ ou encore de $u_\alpha v_\alpha \hat{1} + v_\alpha^2 \hat{c}^\dagger_{\varphi_\alpha}\hat{c}^\dagger_{\varphi_{\tilde{\alpha}}}$. Finalement, l'état BdG se réduit donc à un ansatz BCS, avec des paires directement issues de la transformation de Bogoliubov, dès lors qu'on pose :

$$\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle = \frac{\det C}{v_1\cdots v_{d/2}}\hat{\gamma}_1\cdots\hat{\gamma}_d\left|\ \right\rangle \tag{19}$$

Nous utiliserons dorénavant cette forme qui garantit la normalisation de la fonction d'onde. Numériquement, la factorisation de Bloch-Messiah-Zumino Eq. (15) s'obtient au travers de la matrice densité réduite à un corps ρ et au tenseur antisymétrique d'appariement κ :

$$\rho_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'} = \left\langle \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}'\sigma'} \hat{c}_{\vec{r}\sigma} \right\rangle_{\Phi^{(BdG)}} \;,\; \kappa_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'} = \left\langle \hat{c}_{\vec{r}'\sigma'} \hat{c}_{\vec{r}\sigma} \right\rangle_{\Phi^{(BdG)}} \tag{20}$$

A partir des développements Eq. (10), il est aisé de vérifier les relations $\rho = V^{*}V^{T}$ et $\kappa = V^{*}U^{T}$. En conséquence, $D^{\dagger}\rho D$ et $D^{\dagger}\kappa D^{*}$ sont des matrices diagonales par blocs 2×2 de type $\underline{\rho}_{\alpha} = \begin{pmatrix} v_{\alpha}^{2} & 0 \\ 0 & v_{\alpha}^{2} \end{pmatrix}$ et $\underline{\kappa}_{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & u_{\alpha}v_{\alpha} \\ -u_{\alpha}v_{\alpha} & 0 \end{pmatrix}$, respectivement. Les états individuels appariés $\left|\varphi_{\alpha}\right\rangle, \left|\varphi_{\tilde{\alpha}}\right\rangle$ correspondent donc aux vecteurs propres de ρ associés aux valeurs propres doublement dégénérées v_{α}^{2} qui représentent les nombres moyens d'occupation de ces états. La transformation unitaire D Eq. (15) est alors complètement définie après avoir procédé à des ajustements de phase pour garantir la forme canonique $\underline{\kappa}_{\alpha}$ du tenseur κ, où nous rappelons que u_{α}, v_{α} sont des réels positifs avec $u_{\alpha}^{2} + v_{\alpha}^{2} = 1$. La matrice C est ensuite retrouvée par application directe du théorème Eq. (15).

A l'instar des déterminants de Slater, une fonction d'onde BdG de référence $\left|\Phi^{(BdG_0)}\right\rangle$ associée à des quasiparticules $\left\{\hat{\gamma}_{n}^{(0)}\right\}$ peut engendrer tous les états factorisés $\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle$ qui ne lui sont pas orthogonaux par l'intermédiaire d'un jeu de paramètres $Z_{mn}^{(BdG)}$ $\left(1 \le m < n \le d\right)$ selon :

$$\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle = \mathcal{K}^{(BdG)} \exp\left(\sum_{m=1}^{d} \sum_{n=m+1}^{d} Z_{mn}^{(BdG)} \hat{\gamma}_{m}^{(0)\dagger} \hat{\gamma}_{n}^{(0)\dagger} \right) \left|\Phi^{(BdG_0)}\right\rangle, \tag{21}$$

où le facteur $\mathcal{K}^{(BdG)}$ assure la normalisation. Il s'agit d'une extension du théorème de Thouless dont la démonstration est parfaitement similaire à celle présentée auparavant dans le cas HF [Rin80] (cf également la section III-b). De nouveau, la paramétrisation Eq. (21) confère aux vides de Bogoliubov la qualité d'états cohérents associés ici à l'algèbre de Lie $SO(2d)$ des opérateurs $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'} - \frac{1}{2}\delta_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'}$, $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}^{\dagger}$, $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}$ [Zha90a]. Les états BdG forment ainsi un ensemble surcomplet de l'espace de Fock caractérisé par la relation de fermeture suivante :

$$\int \mathcal{D}\Phi^{(BdG)} \left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle \left\langle\Phi^{(BdG)}\right| = \hat{1}\,, \tag{22}$$

$\mathcal{D}\Phi^{(BdG)} \propto \prod_{m=1}^{d}\prod_{n=m+1}^{d} d\,\mathrm{Re}\,Z_{mn}^{(BdG)}\, d\,\mathrm{Im}\,Z_{mn}^{(BdG)} \left[\det\left(1_{d} + Z^{(BdG)\dagger}Z^{(BdG)}\right)\right]^{-2d}$ étant la mesure invariante d'intégration sur les amplitudes de Thouless regroupées dans la matrice antisymétrique $Z^{(BdG)}$. Tous les schémas QMC ou d'approximations variationnelles discutés dans le cadre des fonctions d'onde HF peuvent ainsi trouver leur prolongement en termes de superpositions d'états BdG non orthogonaux. A ce jour, nous n'avons toutefois pas connaissance de travaux antérieurs visant à mettre en place de telles stratégies pour le modèle de Hubbard, les seules applications rapportées concernant la physique nucléaire [Sch04] (avec le plus souvent de sévères restrictions sur les états BdG afin de limiter le nombre de paramètres variationnels à déterminer).

II. Les symétries du modèle de Hubbard et leur restauration

En structurant l'espace des états comme une somme directe de sous-espaces irréductibles, les symétries d'un système fini de fermions en interaction jouent un rôle crucial pour affronter la complexité exponentielle de la détermination de son état fondamental. Elles sont ainsi systématiquement mises à profit dans les diagonalisations exactes du modèle de Hubbard pour des clusters avec un faible nombre de sites [Dag92, Par91]. Pour de plus grands systèmes, mais de taille finie, la plupart des schémas d'approximation proposés s'affranchissent en revanche des invariances de l'Hamiltonien et exhibent dans leurs solutions des brisures de symétrie qui ne peuvent se concevoir qu'à la limite thermodynamique. Les méthodes AFQMC à chemins contraints ou de développement sur un nombre fini d'états cohérents n'échappent pas à une telle pathologie si elles sont directement appliquée sans précautions spécifiques. Nous examinons ici une solution pour restaurer les symétries artificiellement brisées en terme de projection sur les nombres quantiques caractérisant l'état fondamental du modèle de Hubbard. Cette technique est en réalité mise en œuvre dans les méthodes « PIRG », de champ moyen résonant ou « FED » présentées au précédent paragraphe. Elle a également été récemment implémentée dans les approches AFQMC contraintes [Shi13, Shi14] ainsi que dans le cadre de nouveaux échantillonnages stochastiques [Cor08, Aim07a, Aim07b] a priori exempts du problème de signe (mais qui souffrent d'erreurs systématiques non élucidées).

L'Hamiltonien de Hubbard exhibe en premier lieu les symétries discrètes du réseau à partir duquel il est défini (dès lors que les amplitudes de saut entre plus proches voisins sont uniformes). Il est ainsi logiquement invariant sous les opérateurs de translation $\hat{T}_{\vec{l}}$ dont le vecteur $\vec{l}$ correspond à un déplacement entre deux sites du cluster et qui transforment les opérateurs de fermions selon

$$\hat{T}_{\vec{l}}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{T}^{\dagger}_{\vec{l}} = \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}+\vec{l}\sigma}\,. \tag{23}$$

Chaque vecteur propre $|\Psi_v\rangle$ de $\hat{H}$ est en conséquence caractérisé par une quasi-impulsion totale $\hbar\vec{K}_v$ qui dicte son comportement lors d'une translation : $\hat{T}_{\vec{l}}|\Psi_v\rangle = e^{-i\vec{K}_v\cdot\vec{l}}|\Psi_v\rangle$. L'opérateur de projection $\hat{P}_{\vec{K}}$ sur le sous-espace formé par tous les états stationnaires partageant une même impulsion cristalline totale $\hbar\vec{K}$ s'obtient alors facilement au moyen d'une combinaison linéaire de toutes les translations :

$$\hat{P}_{\vec{K}} = \frac{1}{N_{\vec{r}}}\sum_{\vec{l}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{l}}\hat{T}_{\vec{l}} \tag{24}$$

En effet, pour tout vecteur $|\Phi\rangle$, il vient bien :

$$\hat{T}_{\vec{l}_0}\left(\hat{P}_{\vec{K}}|\Phi\rangle\right) = \frac{1}{N_{\vec{r}}}\sum_{\vec{l}} e^{i\vec{K}\cdot\vec{l}}\hat{T}_{\vec{l}_0+\vec{l}}|\Phi\rangle = \frac{1}{N_{\vec{r}}}\sum_{\vec{l}'=\vec{l}_0+\vec{l}} e^{i\vec{K}\cdot(\vec{l}'-\vec{l}_0)}\hat{T}_{\vec{l}'}|\Phi\rangle = e^{-i\vec{K}\cdot\vec{l}_0}\left(\hat{P}_{\vec{K}}|\Phi\rangle\right). \tag{25}$$

On vérifie de plus directement l'hermiticité et l'idempotence de l'opérateur Eq (24) qui correspond donc à un projecteur. Ces résultats s'étendent sans difficulté au groupe cristallographique du réseau dont les opérations de symétrie $\mathcal{S}$ se décomposent en produits de rotations géométriques et de réflexions planes. Leur représentation dans l'espace de Fock est réalisée par des opérateurs unitaires $\hat{T}_{\mathcal{S}}$ tels que

$$\hat{T}_{\mathcal{S}}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{T}^{\dagger}_{\mathcal{S}} = \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}_{\mathcal{S}}\sigma}\,, \tag{26}$$

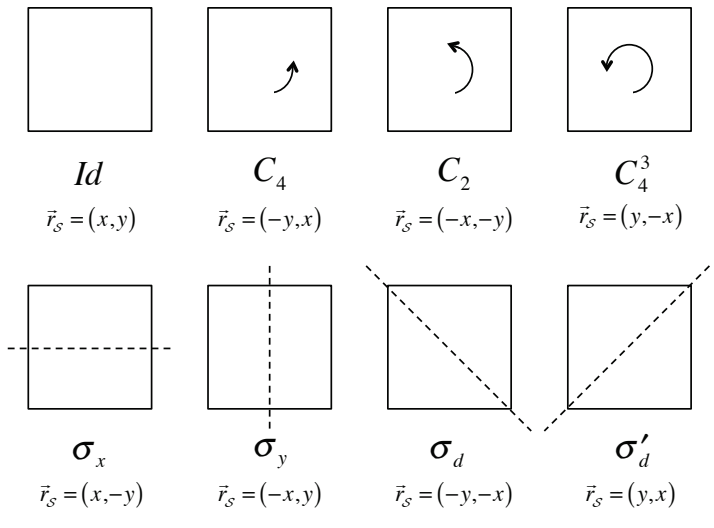
où $\vec{r}_{\mathcal{S}}$ désigne le site transformé. Par exemple, pour une cellule carrée de centre O du plan xy avec les mêmes conditions aux bords dans les deux directions x et y, le groupe

d'invariance C_{4v} comprend, outre l'identité Id, les rotations C_4, C_2, C_4^3 d'angles respectifs $\pi/2, \pi, 3\pi/2$ autour de l'axe Oz perpendiculaire au plan du réseau (cf. Figure 1). Il inclut aussi les réflexions σ_x, σ_y par rapport aux plans Oxz, Oyz ainsi que les symétries miroir σ_d, σ_d' selon les plans engendrés par Oz et l'une des diagonales du carré. Comme pour les translations, les états propres de l'Hamiltonien sont chacun associés à une représentation irréductible $\Gamma_{lattice}$ du groupe ponctuel $\mathcal{G}_{lattice}$ du cluster qui correspond à une loi précise de transformation sous ses opérations $\mathcal{S}$. Ainsi, les états A_1 d'un réseau carré sont équivalents à la symétrie s et ils sont invariants par le groupe C_{4v}. De même, une fonction d'onde de la représentation B_1 $\left(\text{resp. } B_2\right)$ exhibe la symétrie $d_{x^2-y^2}\left(\text{resp. } d_{xy}\right)$: elle change de signe en appliquant les opérations C_4, C_4^3, σ_d, σ_d' $\left(\text{resp. } C_4, C_4^3, \sigma_x, \sigma_y\right)$ et n'est pas modifiée par les autres transformations. Un état $|\Phi\rangle$ quelconque peut en outre être projeté sur ces différents secteurs via l'opérateur

$$\hat{P}_{\Gamma_{C_{4v}}} = \frac{1}{8}\sum_{\mathcal{S}} \chi^*_{\Gamma_{C_{4v}},\mathcal{S}} \hat{T}_{\mathcal{S}} \ , \tag{27}$$

où les « poids » $\chi_{\Gamma_{C_{4v}},\mathcal{S}}$ affectés aux éléments $\mathcal{S}$ du groupe garantissent la restauration de la symétrie $\Gamma_{C_{4v}}$ et sont indiqués sur la Figure 1. Par exemple, la table de multiplication du groupe C_{4v} montre immédiatement que le projecteur $\hat{P}_{d_{x^2-y^2}}$ conduit bien à un état transformé en son opposé par la rotation C_4 d'angle $\pi/2$ autour de Oz :

$$\begin{aligned}
\hat{T}_{C_4}\left(\hat{P}_{d_{x^2-y^2}}|\Phi\rangle\right) &= \frac{1}{8}\hat{T}_{C_4}\left(\hat{1} - \hat{T}_{C_4} + \hat{T}_{C_2} - \hat{T}_{C_4^3} + \hat{T}_{\sigma_x} + \hat{T}_{\sigma_y} - \hat{T}_{\sigma_d} - \hat{T}_{\sigma_d'}\right)|\Phi\rangle \\
&= \frac{1}{8}\left(\hat{T}_{C_4} - \hat{T}_{C_2} + \hat{T}_{C_4^3} - \hat{1} + \hat{T}_{\sigma_d'} + \hat{T}_{\sigma_d} - \hat{T}_{\sigma_x} - \hat{T}_{\sigma_y}\right)|\Phi\rangle \\
&= -\left(\hat{P}_{d_{x^2-y^2}}|\Phi\rangle\right)
\end{aligned} \tag{28}$$



$\mathcal{S}$ \ $\Gamma_{C_{4v}}$	A_1 s	B_1 $d_{x^2-y^2}$	B_2 d_{xy}
Id	+1	+1	+1
C_4	+1	−1	−1
C_2	+1	+1	+1
C_4^3	+1	−1	−1
σ_x	+1	+1	−1
σ_y	+1	+1	−1
σ_d	+1	−1	+1
σ_d'	+1	−1	+1

Figure 1 : Opérations $\mathcal{S}$ du groupe ponctuel de symétrie d'un réseau carré. Le tableau rassemble les caractères $\chi_{\Gamma_{C_{4v}},\mathcal{S}}$ pour les représentations irréductibles $\Gamma_{C_{4v}} \in \{A_1, B_1, B_2\}$.

Par la suite, nous serons également amené à considérer des cellules anisotropes de forme rectangulaire ou des réseaux à maille carrée avec des conditions aux limites différentes dans les directions x et y. Dans ce cas, il n'y a évidemment plus d'axe de rotation d'ordre 4 et les transformations ponctuelles de symétrie $\mathcal{S}$ se réduisent ainsi à l'ensemble $\{Id, C_2, \sigma_x, \sigma_y\}$ qui définit le groupe C_{2v}. Dès lors, les fonctions d'onde de symétries s et $d_{x^2-y^2}$ ne peuvent plus être distinguées par leur comportement sous les opérations $\mathcal{S}$ et elles se transforment donc selon la même représentation irréductible A_1 du groupe. En revanche, la symétrie d_{xy} correspond toujours à une représentation différente A_2. Finalement et plus généralement, la restauration du label $\Gamma_{lattice}$ associé au groupe ponctuel du réseau peut encore être réalisée au travers d'un projecteur $\hat{P}_{\Gamma_{lattice}}$ similaire à celui Eq. (27) discuté pour un cluster carré [Ham64]

$$\hat{P}_{\Gamma_{lattice}} = \frac{1}{N_{\mathcal{S}}} \sum_{\mathcal{S}} \chi^{*}_{\Gamma_{lattice},\mathcal{S}} \hat{T}_{\mathcal{S}}, \tag{29}$$

avec $N_{\mathcal{S}}$ le nombre d'opérations de symétrie du groupe et $\{\chi_{\Gamma_{lattice},\mathcal{S}}\}$ les caractères de la représentation $\Gamma_{lattice}$ supposée unidimensionnelle. En effet, le traitement des représentations de dimension supérieure à un requiert un traitement plus complexe, analogue à celui que nous présenterons par la suite pour restaurer la symétrie de spin dans le cas d'un spin total non nul.

En complément des symétries spatiales, le modèle de Hubbard est aussi invariant sous plusieurs groupes continus. Le plus élémentaire est celui $U(1)$ des transformations de jauge $\hat{T}_\theta = e^{-i\theta\hat{N}}$ définies à partir de l'opérateur nombre de particules $\hat{N}$ et qui affectent les opérateurs de fermions en les multipliant par un facteur de phase :

$$\hat{T}_\theta \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{T}^{\dagger}_\theta = e^{-i\theta} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \tag{30}$$

Cette symétrie induit évidemment que tous les états propres de l'Hamiltonien ont un nombre de fermions bien défini. Elle ne doit donc être restaurée que pour des états $|\Phi\rangle$ du type BdG qui ne jouissent pas d'une telle propriété. Dans ce cas, la projection sur le sous-espace à N particules est réalisée par l'opérateur

$$\hat{P}_N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\theta N} \hat{T}_\theta \tag{31}$$

En effet, selon le même raisonnement que pour les translations, $\hat{T}_{\theta_0}\left(\hat{P}_N|\Phi\rangle\right) = e^{-i\theta_0 N}\left(\hat{P}_N|\Phi\rangle\right)$ et il suffit de développer cette relation au premier ordre de l'angle de jauge θ_0 pour vérifier que $\hat{P}_N|\Phi\rangle$ est bien vecteur propre de l'opérateur $\hat{N}$ avec le nombre N souhaité de fermions pour valeur propre.

La symétrie de spin du modèle de Hubbard est également basique. Elle correspond à l'invariance sous le groupe $SU(2)$ des rotations $\hat{T}_\Omega$ dans l'espace de spin pour lesquelles

$$\hat{T}_\Omega \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{T}^{\dagger}_\Omega = \sum_{\sigma'} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma'} D^{(1/2)}_{\sigma'\sigma}(\Omega). \tag{32}$$

Ω rassemble les trois angles d'Euler (α,β,γ) qui permettent de paramétriser les rotations selon $\hat{T}_\Omega = e^{-i\alpha\hat{S}_z} e^{-i\beta\hat{S}_y} e^{-i\gamma\hat{S}_z}$, $\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{r}\sigma\sigma'} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \vec{\tau}_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\vec{r}\sigma'}$ étant l'observable de spin total avec τ_x, τ_y, τ_z les matrices de Pauli. Les fonctions $D^{(1/2)}_{\sigma'\sigma}(\Omega)$ sont par ailleurs les éléments de la

matrice D de Wigner [Var88] pour la représentation irréductible du groupe $SU(2)$ de spin $1/2 : D^{(1/2)}_{\sigma'\sigma}(\Omega) = \langle\sigma'|T_\Omega|\sigma\rangle$. En commutant avec $\hat{\vec{S}}$, l'Hamiltonien de Hubbard admet des états propres caractérisés par les nombres quantiques habituels S et M respectivement associés au carré $\hat{\vec{S}}^2$ et à la composante $\hat{S}_z$ du spin total. Dans un secteur (S,M) donné, chaque état stationnaire $|\Psi_{\upsilon SM}\rangle$ génère, par application répétée des opérateurs d'échelle $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$, des solutions $|\Psi_{\upsilon SM'}\rangle$ de l'équation de Schrödinger pour les autres valeurs $M' \in \{M \pm 1, \cdots, \pm S\}$ de $\hat{S}_z$, l'énergie étant inchangée. Le sous-espace ainsi formé supporte alors une représentation irréductible de $SU(2)$ pour le spin S, de sorte que sous une rotation :

$$\hat{T}_\Omega |\Psi_{\upsilon SM}\rangle = \sum_{M'=-S}^{S} |\Psi_{\upsilon SM'}\rangle\, D^{(S)}_{M'M}(\Omega) \tag{33}$$

où $D^{(S)}$ est la matrice D de Wigner d'ordre S. Dans la restauration de la symétrie de spin à partir d'un état $|\Phi\rangle$ arbitraire, le respect d'une telle propriété n'est pas systématique. Il nécessite le recours à des opérateurs $\hat{P}_{SMM'}$ obtenus par une intégration spécifique de toutes les rotations [Vil66] :

$$\hat{P}_{SMM'} = \frac{2S+1}{8\pi^2} \int \mathcal{D}\Omega \, \left(D^{(S)}_{MM'}(\Omega)\right)^* \hat{T}_\Omega \,, \tag{34}$$

$\mathcal{D}\Omega = d\alpha d\beta d\gamma \sin\beta$ étant la mesure de Haar du groupe $SU(2)$. Leur contenu physique est encodé dans la relation $\hat{P}_{SMM'}|\Psi_{\upsilon S_0 M_0}\rangle = \delta_{S_0,S}\delta_{M_0,M'}|\Psi_{\upsilon SM}\rangle$ qui résulte immédiatement des relations d'orthogonalité des fonctions D de Wigner [Var88] et de la loi de transformation Eq. (33) : $\hat{P}_{SMM'}$ assure simultanément la projection sur le nombre quantique S et la transition entre deux valeurs M, M' de la composante $\hat{S}_z$. Pour $M = M'$, l'opérateur Eq. (34) garantit ainsi la restauration des nombres quantiques S et M, mais le vecteur projeté $\hat{P}_{SMM}|\Phi\rangle$ ne peut se transformer comme attendu Eq. (33) dans une rotation. Pour y parvenir, il convient de considérer une combinaison linéaire $|\Phi_{SM}\rangle = \sum_{M'=-S}^{S} \Lambda_{M'} \hat{P}_{SMM'}|\Phi\rangle$ construite à l'aide d'un ensemble $\{\Lambda_{-S}, \cdots, \Lambda_M, \cdots, \Lambda_S\}$ d'amplitudes associées aux différentes valeurs propres de $\hat{S}_z$:

$$\begin{aligned}
\hat{T}_{\Omega_0}|\Phi_{SM}\rangle &= \frac{2S+1}{8\pi^2} \sum_{M'=-S}^{S} \Lambda_{M'} \int \mathcal{D}\Omega \, \left(D^{(S)}_{MM'}(\Omega)\right)^* \hat{T}_{\Omega_0}\hat{T}_\Omega |\Phi\rangle \\
&= \frac{2S+1}{8\pi^2} \sum_{M'=-S}^{S} \Lambda_{M'} \int \mathcal{D}\Omega' \left(\sum_{M''=-S}^{S} D^{(S)}_{MM''}\left(\Omega_0^{-1}\right)\left(D^{(S)}_{M''M'}(\Omega')\right) \right)^* \hat{T}_{\Omega'}|\Phi\rangle \\
&= \sum_{M''=-S}^{S} D^{(S)}_{M''M}(\Omega_0) \frac{2S+1}{8\pi^2} \sum_{M'=-S}^{S} \Lambda_{M'} \int \mathcal{D}\Omega' \, \left(D^{(S)}_{M''M'}(\Omega')\right)^* \hat{T}_{\Omega'}|\Phi\rangle \\
&= \sum_{M''=-S}^{S} |\Phi_{SM''}\rangle D^{(S)}_{M''M}(\Omega_0)
\end{aligned} \tag{35}$$

Ici nous avons introduit la rotation inverse $\hat{T}_{\Omega_0^{-1}} = \hat{T}^\dagger_{\Omega_0}$ et le produit $\hat{T}_{\Omega'} = \hat{T}_{\Omega_0}\hat{T}_\Omega$. L'invariance de la mesure de Haar et le théorème d'addition des fonctions D de Wigner [Var88] ont également été utilisés. A priori, l'arbitraire des amplitudes $\{\Lambda_M\}$ est problématique pour toute implémentation concrète, mais les schémas variationnels offrent naturellement la possibilité

de les inclure dans les paramètres à optimiser pour minimiser l'énergie [Rod12, Rod13]. Notons par ailleurs que la projection dans le secteur singulet de spin est nettement plus simple en étant directement réalisée par l'opérateur Eq. (34), soit :

$$\hat{P}_{S=0} = \frac{1}{8\pi^2}\int \mathcal{D}\Omega\ \hat{T}_{\Omega}\,. \tag{36}$$

Ce cas s'apparente en réalité aux exemples étudiés précédemment pour les groupes discrets et de jauge : la représentation irréductible associée aux nombres quantiques considérés est unidimensionnelle et une superposition de toutes les opérations de symétrie du groupe suffit alors à en assurer la restauration. Signalons aussi qu'au sein d'un sous-espace généré par des fonctions d'onde $|\Phi\rangle$ avec une valeur définie M de la composante $\hat{S}_z$, tels que des états Hartree-Fock factorisés en un produit de déterminants de Slater pour les fermions de spin « up » et « down », seule une projection via l'opérateur $\hat{P}_{SMM}$ peut être envisagée. En conséquence, l'invariance par rotation de spin ne peut être totalement restaurée pour S non nul. Compte-tenu de l'expression $D^{(S)}_{MM}(\Omega) = e^{-i\alpha M} d^{(S)}_{MM'}(\beta) e^{-i\gamma M}$ des fonctions D de Wigner [Var88], les intégrations sur les angles d'Euler α et γ sont de plus triviales lors de l'évaluation d'éléments de matrice d'opérateurs scalaires en spin. Avec des états de départ $|\Phi\rangle$ qui brisent totalement la symétrie $SU(2)$ de spin, l'intégration tridimensionnelle des rotations Eqs (34), (36) est en revanche incontournable et son implémentation s'avère donc très coûteuse numériquement, d'autant qu'elle se couple à la nécessité de réaliser simultanément les projections sur les autres nombres quantiques. Dans un tel contexte, on peut a minima se limiter à projeter sur un sous-espace propre de la composante $\hat{S}_z$, ce qui garantit des bons nombres de fermions de spin « up » et « down » dès que leur nombre total est fixé. Cette stratégie vise, en d'autres termes, à ne restaurer que l'invariance $SO(2)$ sous les rotations de spin autour de Oz. Il est immédiat de vérifier que l'opérateur de projection correspondant $\hat{P}_M$ peut être obtenu au travers d'une expression formellement analogue à celles Eqs (24), (29) relatives à la symétrie de translation ou de jauge :

$$\hat{P}_M = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\gamma\, e^{iM\gamma}\hat{T}_{(0,0,\gamma)}\,, \tag{37}$$

M étant la valeur souhaitée de $\hat{S}_z$. Dans le secteur $M=0$ non polarisé en spin, on peut de plus remarquer que les états stationnaires $|\Psi_{\upsilon S0}\rangle$ sont, en fonction de la parité de leur spin total S, symétriques ou antisymétriques sous l'échange des spins « up » et « down » dans les opérateurs de fermions $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$. En effet, un telle opération équivaut à une rotation de spin d'angle π autour de l'axe Oy pour laquelle la fonction D de Wigner se réduit à $D^{(S)}_{M'0}(0,\pi,0) = \delta_{M',0}(-1)^S$ et donc :

$$\hat{T}_{(0,\pi,0)}|\Psi_{\upsilon S0}\rangle = \sum_{M'=-S}^{S} |\Psi_{\upsilon SM'}\rangle\, D^{(S)}_{M'0}(0,\pi,0) = (-1)^S |\Psi_{\upsilon S0}\rangle\,. \tag{38}$$

Il en résulte que l'opérateur $\left(\hat{1} + \pi_S \hat{T}_{(0,\pi,0)}\right)\!/2$, avec $\pi_S = \pm 1$, est en mesure de ne retenir dans le sous-espace $M=0$ que les composantes sur les secteurs de spin total S ayant la parité requise, c'est-à-dire tels que $(-1)^S = \pi_S$. Au final, le projecteur total à considérer pour réaliser un tel filtrage s'écrit donc

$$\hat{P}_{\pi_S M=0} = \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\gamma \left(\hat{T}_{(0,0,\gamma)} + \pi_S \hat{T}_{(0,\pi,\gamma)}\right). \tag{39}$$

Signalons enfin que pour un réseau bipartite, c'est-à-dire formé de deux sous-réseaux équivalents (A) et (B) tels que les sites de (A) ne soient couplés qu'à ceux de (B), le modèle de Hubbard possède une symétrie continue $SU(2)$ supplémentaire à la limite du demi-remplissage [Zha90b, Öst91]. Ses générateurs sont donnés par les opérateurs de pseudo-spin $\hat{J}_+ = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\downarrow}$, $\hat{J}_- = \sum_{\vec{r}} \varepsilon_{\vec{r}} \hat{c}_{\vec{r}\downarrow} \hat{c}_{\vec{r}\uparrow}$, $\hat{J}_z = \left(\hat{N} - N_{\vec{r}}\right)/2$ où $\varepsilon_{\vec{r}} = 1$ pour un site $\vec{r} \in (A)$ et $\varepsilon_{\vec{r}} = -1$ dans le cas contraire $\vec{r} \in (B)$. La restauration de l'invariance sous les rotations de pseudo-spin se réalise alors selon une stratégie strictement similaire à celle détaillée pour le spin. Elle ne peut toutefois être envisagée que pour un état $|\Phi\rangle$ de départ n'ayant pas un nombre bien défini de particules puisque les transformations impliquées brisent maintenant la symétrie de jauge $U(1)$. Nous ne considérerons pas dans la suite cette symétrie de pseudo-spin dans la mesure où les travaux présentés se concentrent principalement sur des clusters dopés en trous.

Nous nous limiterons dorénavant à des états singulets de spin, d'impulsion totale nulle et se transformant selon une onde s ou $d_{x^2-y^2}$ sous les opérations de symétrie ponctuelle du réseau. Ces nombres quantiques caractérisent rigoureusement l'état fondamental du modèle de Hubbard répulsif en géométrie bidimensionnelle pour un réseau bipartite demi-rempli [Lie89, Mor90]. Ils sont également trouvés dans les diagonalisations exactes de l'Hamiltonien pour de petites cellules dopées en trous [Par91] et ont été adoptés dans les approches variationnelles « PIRG » [Miz04], « FED » [Rod12, Rod14] ou de champ moyen résonant [Tom09]. Avec le nombre N de fermions, ils définissent enfin une représentation irréductible Γ du groupe de symétrie complet. L'opérateur $\hat{P}_\Gamma$ de restauration des symétries attendues de l'état fondamental est donc le produit des projecteurs Eqs (24), (29), (31), (36) associés à chacun des nombres quantiques, soit

$$\hat{P}_\Gamma = \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \hat{T}_g \tag{40}$$

Ici le symbole g regroupe rassemble un vecteur $\vec{l}$ de translation, une opération ponctuelle $\mathcal{S}$, un angle θ de jauge et les trois angles d'Euler Ω ; $\lambda_{\Gamma,g} = e^{-i\theta N} \chi^*_{\Gamma_{lattice},\mathcal{S}} / 16\pi^3 N_{\vec{r}} N_{\mathcal{S}}$ et $\hat{T}_g = \hat{T}_{\vec{l}} \hat{T}_{\mathcal{S}} \hat{T}_\theta \hat{T}_\Omega$ désigne l'opérateur correspondant de transformation dans l'espace de Fock. En combinant les relations Eqs (23), (26), (30), (32), il vérifie donc

$$\hat{T}_g \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma} \hat{T}^\dagger_g = e^{-i\theta} \sum_{\sigma'} \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_{\mathcal{S}}+\vec{l}\sigma'} D^{(1/2)}_{\sigma'\sigma}(\Omega). \tag{41}$$

Précisons que la sommation Eq. (40) sous-entend une intégration sur les paramètres continus. Numériquement, les intégrales portant sur les angles α, γ, θ sont cependant discrétisées avec des points équidistants et celle sur β est évaluée par la méthode de Gauss-Legendre : au final, c'est donc bien une somme discrète qui est implémentée pour le projecteur $\hat{P}_\Gamma$, avec cependant des coefficients $\lambda_{\Gamma,g}$ renormalisés par la quadrature et incluant les poids accordés à chaque valeur de l'angle d'Euler β. Notons aussi que la forme générale Eq. (40) demeure valable en cas de restauration partielle de la symétrie $SU(2)$ de spin au travers de l'opérateur Eq (39) ou pour un état avec un nombre de particules bien défini qui ne nécessite évidemment pas la restauration de l'invariance de jauge. Dans ces cas, il suffit de restreindre le domaine de sommation des paramètres g et d'adapter en conséquence la normalisation des coefficients $\lambda_{\Gamma,g}$.

Nous conclurons cette section en examinant la restauration des invariances du modèle de Hubbard dans toute approche visant à reconstruire son état fondamental par un développement en termes d'états cohérents HF ou BdG. Ces fonctions d'onde s'écrivant à partir du vide $|\ \rangle$ comme un produit dont les facteurs sont des combinaisons linéaires des opérateurs de création $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$ et d'annihilation $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}$ d'un fermion, leur forme est nécessairement préservée sous les opérations $\hat{T}_g$ de symétrie. Par exemple, pour un déterminant de Slater $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \prod_{n=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{\phi_n}|\ \rangle$, la loi de transformation Eq. (41) ainsi que l'unitarité des opérateurs $\hat{T}_g$ et l'invariance du vide $|\ \rangle$ induisent immédiatement que le vecteur transformé $\left|\Phi^{(HF)}_g\right\rangle = \hat{T}_g\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$ demeure un état HF :

$$\left|\Phi^{(HF)}_g\right\rangle = \prod_{n=1}^{N} \hat{T}_g \hat{c}^{\dagger}_{\phi_n} \hat{T}^{\dagger}_g|\ \rangle = \prod_{n=1}^{N} \hat{c}^{\dagger}_{\phi_{g,n}}|\ \rangle, \tag{42}$$

où les nouveaux états individuels peuplés $\left|\phi_{g,n}\right\rangle$ sont reliés à ceux du déterminant de départ par la matrice T_g de l'opération dans l'espace à un corps, soit $\left|\phi_{g,n}\right\rangle = T_g\left|\phi_n\right\rangle$ avec $T_g\left|\vec{r}\sigma\right\rangle = e^{-i\theta}\sum_{\sigma'}\left|\vec{r}_{\mathcal{S}} + \vec{l}\,\sigma'\right\rangle D^{(1/2)}_{\sigma'\sigma}(\Omega)$. Dans le cas d'un vide $\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle$ pour des quasiparticules $\{\hat{\gamma}_n\}$ obtenues par une transformation de Bogoliubov de matrices U et V, le raisonnement est en tout point similaire :

$$\left|\Phi^{(BdG)}_g\right\rangle = \hat{T}_g\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle = \frac{\det(C)}{v_1\cdots v_{d/2}}\prod_{n=1}^{N}\hat{T}_g\hat{\gamma}_n\hat{T}^{\dagger}_g|\ \rangle = \frac{\det(C)}{v_1\cdots v_{d/2}}\prod_{n=1}^{N}\hat{\gamma}_{g,n}|\ \rangle \tag{43}$$

Les quasiparticules transformées $\hat{\gamma}_{g,n}$ sont de nouveau directement issues de la relation générale Eq. (41) : $\hat{\gamma}_{g,n} = \sum_{\vec{r}\sigma}\left[\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\left(V^{*}_g\right)_{\vec{r}\sigma,n} + \hat{c}_{\vec{r}\sigma}\left(U^{*}_g\right)_{\vec{r}\sigma,n}\right]$ avec des matrices $U_g = T_g U$ et $V_g = T^{*}_g V$ de sorte que le vecteur associé dans l'espace à un corps étendu est donc donné par

$$\left|\gamma_{g,n}\right\rangle = \mathcal{T}_g\left|\gamma_n\right\rangle,\ \mathcal{T}_g = \begin{pmatrix} T_g & 0_{d\times d} \\ 0_{d\times d} & T^{*}_g \end{pmatrix} \tag{44}$$

Dans la factorisation de Bloch-Messiah-Zumino Eq. (15), l'opération de symétrie n'affecte ainsi que la matrice D et le facteur de normalisation $\det(C)/v_1\cdots v_{d/2}$ est donc aussi celui d'une fonction d'onde BdG de quasiparticules $\hat{\gamma}_{g,n}$. Au final, chaque état HF ou BdG génère un vecteur du secteur de symétrie de l'état fondamental au travers d'un chemin spécifique dans la base surcomplète qui correspond à la restauration des nombres quantiques Γ via le projecteur $\hat{P}_{\Gamma}$ Eq. (40) :

$$\hat{P}_{\Gamma}\left|\Phi^{(a)}\right\rangle = \sum_{g}\lambda_{\Gamma,g}\left|\Phi^{(a)}_g\right\rangle,\ a\in\{HF,\ BdG\}. \tag{45}$$

On conçoit ainsi aisément que seul un échantillonnage très précis de la variété des fonctions d'onde HF ou BdG puisse conduire à un état reconstruit avec les bonnes symétries. Dans le cadre d'un modèle de Hubbard étendu et dans la limite du demi-remplissage, des simulations exactes AFQMC ont d'ailleurs confirmé une telle affirmation [Ass98]. Avec des méthodes approchées, où la relation de fermeture des états HF ou BdG est systématiquement tronquée, les symétries de l'Hamiltonien ne peuvent en revanche être respectées qu'en les incluant explicitement au travers, par exemple, d'une projection sur les nombres quantiques pertinents.

Plus précisément, il s'agit alors d'envisager un schéma d'approximation en introduisant les résolutions de l'identité des états cohérents HF ou BdG Eqs (5), (22) après avoir remarqué que l'état fondamental exact $\left|\Psi_0\right\rangle$ vérifie bien sûr la relation $\left|\Psi_0\right\rangle = \hat{P}_\Gamma \hat{1} \left|\Psi_0\right\rangle$:

$$\left|\Psi_0\right\rangle = \int \mathcal{D}\Phi^{(HF)} \; x\left(\Phi^{(HF)}\right) \; \hat{P}_\Gamma \left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \int \mathcal{D}\Phi^{(BdG)} \; x\left(\Phi^{(BdG)}\right) \; \hat{P}_\Gamma \left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle, \qquad (46)$$

avec des amplitudes $x\left(\Phi^{(a)}\right)$ données par les recouvrements $\left\langle \Phi^{(a)} \middle| \Psi_0 \right\rangle$, $a \in \{HF,\, BdG\}$.

III. Approximations multi-configurationnelles à symétries adaptées par projection avant variation

III.a) Principe

En les discrétisant avec un nombre fini de vecteurs, les développements précédents Eq. (46) de l'état fondamental suggèrent immédiatement un ansatz variationnel sous forme d'une combinaison linéaire d'états non orthogonaux, à symétries restaurées et issus d'une transformation de Thouless d'un état HF ou BdG de référence. Pour rendre optimale une telle approximation, les coefficients de la combinaison et les amplitudes de Thouless doivent naturellement être déterminés de façon à minimiser l'énergie moyenne en projetant sur les nombres quantiques Γ avant la variation. Même avec une seule fonction d'onde HF ou BdG, l'état d'essai demeure donc une superposition d'états factorisés reliés entre eux par les transformations de symétrie de l'Hamiltonien et l'approche ne se réduit plus ainsi à un traitement de champ moyen. C'est en ce sens que l'on peut parler d'un enchevêtrement du champ moyen par les symétries. Nous utiliserons d'ailleurs par la suite l'acronyme correspondant en anglais « SEMF » (« Symmetry Entangled Mean-Field ») pour désigner une approche variationnelle basée sur des états factorisés HF ou BdG avec restauration des symétries avant variation. Les approximations « PIRG », « FED » ou de champ moyen résonant se basent sur une telle stratégie en la limitant à des déterminants de Slater, éventuellement restreints pour avoir des nombres de fermions de spins « up » et « down » bien définis.

La possibilité d'absorber des corrélations au delà du champ moyen par une projection avant variation sur un secteur de symétrie de l'Hamiltonien a été prouvée pour le modèle de Hubbard, au moins dans le cas de clusters de taille modérée, en considérant un unique déterminant de Slater projeté et une interaction sur site attractive. Dans ce cas, l'approximation HF est peu pertinente en ne pouvant révéler le caractère supraconducteur/superfluide de l'état fondamental. Comme indiqué sur la Figure 2, un ordre non diagonal à longue distance dans la matrice densité à deux corps émerge en revanche de l'état SEMF [Jui13]. Dans le régime répulsif, des premiers résultats encourageants ont été rapportés [Juil13, Rod14]. Ils ont en particulier conduit, pour un dopage en trous $\delta = 1/8$ et des couplages U/t suffisamment forts, à un état fondamental approché exhibant des « stripes » accompagnées de corrélations d'appariement à courte portée et fragmentées entre plusieurs canaux dont celui attendu en onde $d_{x^2-y^2}$. Il convient de préciser que ce contenu physique émerge spontanément de la minimisation de l'énergie, au sens où aucun paramètre d'ordre n'est initialement imposé dans le déterminant de référence. Il s'agit là indubitablement d'un atout majeur, comparativement aux méthodes variationnelles basées sur des fonctions d'onde de type Gutzwiller et qui ne peuvent s'affranchir à ce jour de privilégier *a priori* certaines corrélations [Mis14, Yan13, Yok13]. En outre, il a aussi été montré

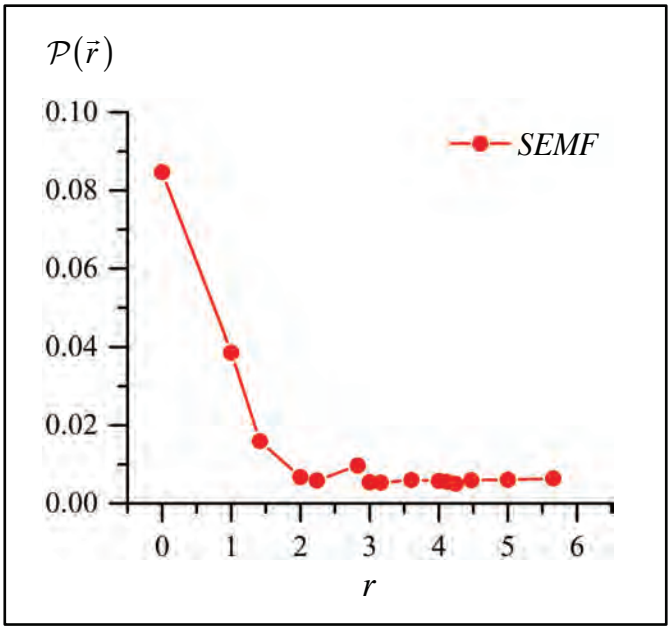


Figure 2 : Fonction de corrélation $\mathcal{P}(\vec{r}) = \left\langle \hat{\Delta}_{\vec{0}}^{\dagger} \hat{\Delta}_{\vec{r}} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ des paires locales $\hat{\Delta}_{\vec{r}}^{\dagger} = \hat{c}_{\vec{r}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{r}\downarrow}^{\dagger}$ dans l'état SEMF $\left|\Psi_\Gamma\right\rangle = \hat{P}_\Gamma \left|\Phi^{(HF)}\right\rangle$. Un cluster 8×8 au quart de remplissage $(N=32)$ en régime attractif $U=-2t$ est considéré. Des corrélations d'appariement à longue distance sont observées à partir d'un *unique* déterminant de Slater projeté avant variation. Même si leur amplitude est plus faible que celle issue des simulations AFQMC rapportées dans la référence [Gue99], l'énergie SEMF est en très bon accord : $E_\Gamma / N_{\vec{r}} = -1.44t$ et $E_{AFQMC} / N_{\vec{r}} = -1.454t$.

analytiquement [Lep14] que les approches SEMF se montrent d'autant plus performantes que les symétries délibérément brisées dans la fonction d'onde de référence, puis restaurées par projection, sont nombreuses. En conséquence, le recours à des états HF construits à partir d'états individuels ayant chacun un spin « up » ou « down » bien défini ne peut être considéré comme optimal. De tels vecteurs de base ont été jusqu'à présent utilisés dans les méthodes « PIRG » et de champ moyen résonant, bien que ces approximations puissent également être implémentées avec des fonctions d'onde HF générales au prix d'un effort numérique nettement plus important. En brisant l'invariance de jauge $U(1)$ contrairement aux déterminants de Slater, les états BdG non restreints apparaissent au final comme des candidats particulièrement adaptés aux schémas SEMF. Ils sont aussi en mesure de pouvoir immédiatement conduire à des corrélations supraconductrices ou superfluides qui nécessiteraient sinon la superposition d'un nombre important d'états HF pour être reproduites. A ce jour, les applications rapportées se sont toutefois limitées à des combinaisons linéaires de trois états BdG projetés sur un secteur de symétrie, dans le contexte du modèle en couches nucléaires où seule l'invariance par rotation doit être restaurée [Hje02]. De plus, les espaces à un corps considérés correspondraient en physique de la matière condensée à des clusters de taille 6×6 environ qui ne permettent évidemment pas de déceler des corrélations d'appariement à longue distance et/ou des modes de grande longueur d'onde tels que des « stripes » ou des spirales.

Nous détaillons dorénavant un schéma hybride de reconstruction de l'état fondamental du modèle de Hubbard répulsif par développement sur une base non orthonormée de fonctions d'onde HF *et* BdG variationnellement optimisées après restauration des symétries.

En notant N_a le nombre d'états de chaque type $a \in \{HF,\ BdG\}$, l'état fondamental est ainsi approximé par la superposition

$$\left|\Psi_\Gamma\right\rangle = \sum_{a\in\{HF,\,BdG\}} \sum_{i=1}^{N_a} x^{(a_i)} \hat{P}_\Gamma \left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle, \tag{47}$$

où $\left|\Phi^{(HF_1)}\right\rangle$, $\left|\Phi^{(HF_2)}\right\rangle$, $\cdots$ et $\left|\Phi^{(BdG_1)}\right\rangle$, $\left|\Phi^{(BdG_2)}\right\rangle$, $\cdots$ désignent les différents états HF et BdG découlant de transformations de Thouless à partir des deux états de référence $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$ et $\left|\Phi^{(BdG_0)}\right\rangle$, respectivement. Dans la suite, nous traiterons de manière unifiée les deux types de fonctions d'onde en introduisant également des opérateurs de quasiparticules $\left\{\hat{\gamma}_n^{(HF_i)}\right\}$ pour chaque déterminant de Slater $\left|\Phi^{(HF_i)}\right\rangle$ au travers de la relation Eq. (1) :

$$\hat{\gamma}_n^{(HF_i)} = \begin{cases} \hat{c}^\dagger_{\phi_n^{(i)}},\ n \in \{1,\cdots,N\} \\ \hat{c}_{\bar{\phi}_\nu^{(i)}},\ n = N+\nu \in \{N+1,\cdots,d\} \end{cases} \tag{48}$$

Ici $\left\{\left|\phi_1^{(i)}\right\rangle,\cdots,\left|\phi_N^{(i)}\right\rangle\right\}$ est la famille orthonormée des états individuels occupés et $\left\{\left|\bar{\phi}_1^{(i)}\right\rangle,\cdots,\left|\bar{\phi}_{d-N}^{(i)}\right\rangle\right\}$ celle des états vides, de sorte que l'on a bien $\hat{\gamma}_n^{(HF_i)}\left|\Phi^{(HF_i)}\right\rangle = 0$ pour tout $n = 1,\cdots,d$. Les deux kets associés à ces quasiparticules HF dans l'espace à un corps étendu $\mathcal{H}_{ex}^{(1)}$ sont donc donnés par $\left|\gamma_n^{(HF_i)}\right\rangle = \begin{pmatrix} \left|\phi_n^{(i)}\right\rangle \\ 0 \end{pmatrix}$, $\left|\bar{\gamma}_n^{(HF_i)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \left|\phi_n^{(i)*}\right\rangle \end{pmatrix}$ pour $n = 1,\cdots,d$ et $\left|\gamma_n^{(HF_i)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \left|\bar{\phi}_{n-N}^{(i)*}\right\rangle \end{pmatrix}$, $\left|\bar{\gamma}_n^{(HF_i)}\right\rangle = \begin{pmatrix} \left|\bar{\phi}_{n-N}^{(i)}\right\rangle \\ 0 \end{pmatrix}$ pour $n = N+1,\cdots,d$. Ils forment une base orthonormée de $\mathcal{H}_{ex}^{(1)}$ et définissent ainsi une transformation unitaire de Bogoliubov ne mélangeant pas les opérateurs de création et d'annihilation de fermions. Dans un souci d'homogénéisation de la présentation, les quasiparticules des fonctions d'onde BdG seront dorénavant notés $\left\{\hat{\gamma}_n^{(BdG_i)}\right\}$. Dès lors, les paramétrisations de Thouless Eqs (2), (21) peuvent être réunies en écrivant

$$\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle = \mathcal{K}^{(a_i)} \exp\left(\hat{Z}^{(a_i)}\right)\left|\Phi^{(a_0)}\right\rangle,\ \hat{Z}^{(a_i)} = \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{d}\sum_{n=1}^{d} Z_{mn}^{(a_i)} \hat{\gamma}_m^{(a_0)\dagger}\hat{\gamma}_n^{(a_0)\dagger}, \tag{49}$$

où $\mathcal{K}^{(a_i)} = \left\langle\Phi^{(a_0)}\middle|\Phi^{(a_i)}\right\rangle$ et où la matrice $Z^{(a_i)}$ des amplitudes $Z_{mn}^{(a_i)}$ de transformation est antisymétrique, ses seules entrées non nulles correspondant aux canaux particule-trou et trou-particule dans le cas d'un déterminant de Slater (c'est-à-dire $m \le N,\ n \ge N+1$ et $m \ge N+1,\ n \le N$). Les quasiparticules $\left\{\hat{\gamma}_n^{(a_i)}\right\}$ sont en outre aisément reconstruites à partir des paramètres de Thouless au travers de superpositions linéaires des opérateurs $\hat{\tilde{\gamma}}_m^{(a_i)} = \exp\left(\hat{Z}^{(a_i)}\right)\hat{\gamma}_m^{(a_0)}\exp\left(-\hat{Z}^{(a_i)}\right)$ issus de la transformation des quasiparticules de référence. Ces opérateurs vérifient en effet la relation $\hat{\tilde{\gamma}}_m^{(a_i)}\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle = 0$ caractéristique des quasiparticules

de l'état HF ou BdG $\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle$ mais ils ne satisfont pas aux relations d'anticommutation canoniques également requises : selon la formule de Glauber, $\hat{\tilde{\gamma}}_m^{(a_i)} = \hat{\gamma}_m^{(a_0)} + \sum_{n=1}^{d} \hat{\gamma}_n^{(a_0)\dagger} Z_{nm}^{(a_i)}$ et donc $\left[\hat{\tilde{\gamma}}_m^{(a_i)}, \hat{\tilde{\gamma}}_n^{(a_i)\dagger}\right]_+ = \left(1_{d\times d} + Z^{(a_i)\,T} Z^{(a_i)\,*}\right)_{mn} \hat{1}$. En revanche, avec $\hat{\gamma}_m^{(a_i)} = \sum_{n=1}^{d} X_{mn} \hat{\tilde{\gamma}}_n^{(a_i)}$, l'algèbre habituelle des opérateurs de fermions est retrouvée sous réserve de choisir la matrice X telle que $X\left(1_{d\times d} + Z^{(a_i)\,T} Z^{(a_i)\,*}\right) X^{\dagger} = 1_{d\times d}$. Or, en faisant appel à la décomposition de Cholesky, il existe une matrice triangulaire inférieure L telle que $1_{d\times d} + Z^{(a_i)\,T} Z^{(a_i)\,*} = LL^{\dagger}$ et on peut donc poser $X = L^{-1}$. Au final, les fonctions d'onde entrant dans l'approximation Eq. (47) sont donc définies par des quasiparticules HF ou BdG dont les états $\left\{\left|\gamma_l^{(a_i)}\right\rangle\right\}$ sont exprimés dans la base orthonormée de référence $\left\{\left|\gamma_m^{(a_0)}\right\rangle, \left|\overline{\gamma}_m^{(a_0)}\right\rangle\right\}$ selon

$$\left|\gamma_l^{(a_i)}\right\rangle = \sum_{m=1}^{d} \left(L^{-1}\right)_{lm} \left[\left|\gamma_m^{(a_0)}\right\rangle + \sum_{n=1}^{d} \left|\overline{\gamma}_n^{(a_0)}\right\rangle Z_{nm}^{(a_i)}\right] \tag{50}$$

L'approche SEMF se doit ainsi de déterminer les amplitudes $\left\{x^{(a_i)}\right\}$ et les matrices $Z^{(a_i)}$ des transformations de Thouless pour minimiser l'énergie moyenne $\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma} = \left\langle \Psi_\Gamma \middle| \hat{H} \middle| \Psi_\Gamma \right\rangle$ dans l'ansatz variationnel $\left|\Psi_\Gamma\right\rangle$ Eq. (47) supposé normé. En raison de l'invariance de l'Hamiltonien sous les opérations de symétrie $\hat{T}_g$, nous soulignerons que $\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ est plus efficacement obtenu au travers de la relation

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma} = \sum_{a,b\in\{HF,BdG\}} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} x^{(a_i)\,*} \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \hat{H}\hat{P}_\Gamma \middle| \Phi^{(b_j)} \right\rangle x^{(b_j)}, \tag{51}$$

où les propriétés $\hat{P}_\Gamma^{\dagger} = \hat{P}_\Gamma$ et $\hat{P}_\Gamma^2 = \hat{P}_\Gamma$ du projecteur Eq. (40) sur les nombres quantiques Γ ont également été utilisées. Mais, conformément aux résultats précédents Eq. (45), la restauration des labels Γ à partir d'un état factorisé $\left|\Phi^{(b_j)}\right\rangle$ conduit à une nouvelle superposition linéaire de vides $\left|\Phi_g^{(b_j)}\right\rangle = \hat{T}_g \left|\Phi^{(b_j)}\right\rangle$ générés par les transformations de symétrie. En définitive, $\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ se réduit donc à une fonctionnelle d'éléments de matrice de l'Hamiltonien entre états cohérents HF ou BdG :

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma} = \sum_{a,b\in\{HF,BdG\}} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_{g} \lambda_{\Gamma,g}\; x^{(a_i)\,*} \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \hat{H} \middle| \Phi_g^{(b_j)} \right\rangle x^{(b_j)}. \tag{52}$$

Son optimisation sera détaillée à la section III-c sous la contrainte de normalisation de l'état SEMF $\left|\Psi_\Gamma\right\rangle$ qui s'explicite, en suivant la même démarche que pour l'énergie, selon :

$$\left\langle \Psi_\Gamma \middle| \Psi_\Gamma \right\rangle = \sum_{a,b\in\{HF,BdG\}} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_{g} \lambda_{\Gamma,g}\; x^{(a_i)\,*} \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \Phi_g^{(b_j)} \right\rangle x^{(b_j)} = 1. \tag{53}$$

III.b) Le théorème de Wick généralisé

Ce théorème joue un rôle clé dans les traitements théoriques des systèmes de fermions en interaction faisant appel à des déterminants de Slater ou des fonctions d'onde BdG. Dans sa version originale [Wic50], il permet de ramener la valeur moyenne de tout opérateur dans un vide de particules ou de quasiparticules à une fonctionnelle des contractions élémentaires normales $\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}\rangle$ et anormales $\langle \hat{c}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}\rangle$. Nous montrons dans cette section que le résultat demeure en réalité valable, avec la même fonctionnelle, pour les éléments de matrice entre deux états factorisés non orthogonaux et normalisés pour avoir un recouvrement égal à l'unité. La preuve de cette extension du théorème de Wick a en fait été déjà donnée pour deux vides HF [Löw55, Bla85] ou BdG [Oni66, Rin80]. Elle repose sur le même principe que celle habituellement présentée pour les valeurs moyennes et qui s'avère assez fastidieuse. Dans le cas hybride d'un élément de matrice entre un déterminant de Slater et une fonction d'onde BdG, le théorème de Wick est souvent utilisé [Car11, Sor11] mais, à notre connaissance, son applicabilité n'a pas été justifiée et aucune expression générale des contractions binaires n'est disponible. Nous proposons ici une démonstration simplifiée, valable quelle que soit la nature HF ou BdG de chacun des deux vides, en s'inspirant des travaux de R. Balian & E. Brezin à propos des transformations de Bogoliubov non unitaires [Ba69] et de ceux de M. Gaudin concernant le théorème de Wick à température finie pour un système fermionique sans interaction [Gau60].

Soit $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$ deux états non orthogonaux, chacun étant un déterminant de Slater ou un vide de Bogoliubov. Nous visons donc à déterminer l'élément de matrice, entre ces deux fonctions d'onde, d'un produit d'opérateurs dont les facteurs sont des combinaisons linéaires *arbitraires* des opérateurs de création $\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}$ et d'annihilation $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}$ d'un fermion. En d'autres termes, il s'agit d'exprimer :

$$\langle\Phi'|\hat{O}_1\cdots\hat{O}_k|\Phi\rangle = \langle\Phi'|\Phi\rangle Tr\left[\hat{O}_1\cdots\hat{O}_k|\Phi\rangle\langle\tilde{\Phi}'|\right], \tag{54}$$

où $\langle\tilde{\Phi}'| = \langle\Phi'|/\langle\Phi'|\Phi\rangle$ et $\hat{O}_i = \sum_{\vec{r}\sigma}\left(\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}Y^*_{\vec{r}\sigma,i} + \hat{c}_{\vec{r}\sigma}X^*_{\vec{r}\sigma,i}\right)$ pour tout $i = 1,\cdots,k$.

Notons $\{\hat{\gamma}_n\}$ et $\{\hat{\gamma}'_n\}$ $(n=1,\cdots,d)$ les opérateurs de quasiparticules HF ou BdG dont $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$ sont les vides respectifs, les bases orthonormées correspondantes de l'espace à un corps étendu étant désignées par $\{|\gamma_n\rangle,|\overline{\gamma}_n\rangle\}$ et $\{|\gamma'_n\rangle,|\overline{\gamma}'_n\rangle\}$. Au travers des développements Eqs (12), (13), les matrices $d\times d$ définies par les recouvrements $\mathbb{F}_{mn} = \langle\gamma'_m|\gamma_n\rangle$ et $\mathbb{G}_{mn} = \langle\gamma'_m|\overline{\gamma}_n\rangle$ permettent de relier les deux familles de quasiparticules :

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}'_m &= \sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\varpi,\vec{r}\sigma}\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\gamma'_m\rangle = \sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\sum_{n=1}^{d}\left(\hat{\gamma}_n\langle\gamma_n|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle + \hat{\gamma}^\dagger_n\langle\overline{\gamma}_n|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle\right)\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\gamma'_m\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{d}\left(\mathbb{F}^*_{mn}\hat{\gamma}_n + \mathbb{G}^*_{mn}\hat{\gamma}^\dagger_n\right)\end{aligned} \tag{55}$$

Notons que cette relation peut aussi s'obtenir directement en décomposant $|\gamma'_m\rangle$ dans la base $\{|\gamma_n\rangle,|\overline{\gamma}_n\rangle\}$ et en utilisant la linéarité des opérateurs $\hat{\gamma}'_m$, $\hat{\gamma}_n$, $\hat{\gamma}^\dagger_n$ vis à vis des vecteurs $|\gamma'_m\rangle$, $|\gamma_n\rangle$, $|\overline{\gamma}_n\rangle$, respectivement. Ainsi, les matrices $\mathbb{F}^t,\mathbb{G}^t$ sont analogues aux matrices U',V' de la transformation de Bogoliubov Eq. (9) définissant $|\Phi'\rangle$ lorsque le vide des opérateurs originaux de fermions $\{\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\}$ est remplacé par celui $|\Phi\rangle$ des quasiparticules $\{\hat{\gamma}_n\}$.

Nous montrons maintenant que la matrice $\mathbb{F}$ est nécessairement inversible en conséquence de la non-orthogonalité des états $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$. Dans le cas de deux déterminants de Slater, $\mathbb{F}$ se réduit à une matrice diagonale par blocs : l'un f de taille $N\times N$ contient les produits scalaires entre états à un corps occupés dans les deux fonctions d'onde et l'autre $\overline{f}$ de dimension $(d-N)\times(d-N)$ comprend les recouvrements entre les états non peuplés. Par ailleurs, $\langle\Phi'|\Phi\rangle$ s'obtient aisément à partir de la relation d'anticommutation canonique $\left[\hat{c}_{\phi'_m},\hat{c}^\dagger_{\phi_n}\right]_+ = \langle\phi'_m|\phi_n\rangle\hat{1}$ pour deux états individuels quelconques $|\phi'_m\rangle$ et $|\phi_n\rangle$ qui sont respectivement peuplés dans les déterminants $|\Phi'\rangle$ et $|\Phi\rangle$: $\langle\Phi'|\Phi\rangle = \det f$. Mais, chacun des deux états HF peut alternativement être obtenu, à un facteur de phase près, en partant du réseau rempli : il suffit en effet d'y détruire les fermions occupant les états à un corps $|\overline{\phi}'_\mu\rangle$ pour $|\Phi'\rangle$ et $|\overline{\phi}_\nu\rangle$ pour $|\Phi\rangle$ qui doivent effectivement être vides dans ces déterminants. Toujours à l'aide de l'anticommutateur $\left[\hat{c}^\dagger_{\overline{\phi}'_\mu},\hat{c}_{\overline{\phi}_\nu}\right]_+ = \langle\overline{\phi}'_\mu|\overline{\phi}_\nu\rangle\hat{1}$, il vient cette fois $\langle\Phi'|\Phi\rangle = e^{i\theta}\det\overline{f}^*$ où la phase globale $e^{i\theta}$ est déterminée à partir des composantes $\{\phi'_{\bar{r}\sigma,n}\}$ et $\{\phi_{\bar{r}\sigma,n}\}$. Finalement, nous avons donc

$$\left|\langle\Phi'|\Phi\rangle\right|^2 = \left|\det\mathbb{F}\right|. \tag{56}$$

Cette relation demeure en réalité valable avec deux vides de Bogoliubov [Oni66] ou dans le cas hybride d'une fonction d'onde HF et d'un état BdG. Sans nuire à la généralité du raisonnement et pour simplifier la discussion, nous supposerons donc provisoirement que $|\Phi'\rangle$ est un état cohérent de paires. En faisant alors appel à la décomposition de Bloch-Messiah-Zumino Eq. (15) des matrices $\mathbb{F}^t,\mathbb{G}^t$ de la transformation de Bogoliubov Eq. (55), nous pouvons réitérer le raisonnement de la section (I-b) pour écrire l'état $|\Phi'\rangle$ sous une forme du type BCS, soit $|\Phi'\rangle = e^{i\theta}\prod_{\alpha=1}^{d/2}\left(f_\alpha + g_\alpha\hat{\Gamma}^\dagger_\alpha\hat{\Gamma}^\dagger_{\tilde{\alpha}}\right)|\Phi\rangle$. Ici, les opérateurs $\hat{\Gamma}^\dagger_\alpha$ et $\hat{\Gamma}^\dagger_{\tilde{\alpha}}$ sont cependant des combinaisons linéaires des quasiparticules $\hat{\gamma}^\dagger_n$ (qui jouent le rôle des opérateurs de création $\hat{c}^\dagger_{\bar{r}\sigma}$ dans le cas usuel d'une transformation de Bogoliubov effectuée à partir du vide de fermions) ; $e^{i\theta}$ est de nouveau un facteur de phase et les réels positifs f_α,g_α définissent la forme canonique des matrices $\mathbb{F}^T,\mathbb{G}^T$. Ainsi, $\left|\langle\Phi'|\Phi\rangle\right| = \prod_{\alpha=1}^{d/2} f_\alpha$ et l'on retrouve bien la relation d'Onishi [Oni66] précédente Eq. (56) puisque $\left|\det\mathbb{F}\right| = \prod_{\alpha=1}^{d/2} f_\alpha^2$ en raison la factorisation de Bloch-Messiah-Zumino de la matrice $\mathbb{F}^t$. Au final, que les états factorisés $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$ soient du type HF ou BdG, leur non orthogonalité garantit à la matrice $\mathbb{F}$ d'être inversible.

Nous pouvons donc dorénavant introduire une transformation $\hat{\mathcal{T}}$ non unitaire de l'espace de Fock en posant :

$$\hat{\mathcal{T}} = \exp\left(\sum_{m=1}^{d}\sum_{n=m+1}^{d}\left(\mathbb{F}^{-1}\mathbb{G}\right)_{mn}\hat{\gamma}_m\hat{\gamma}_n\right) \tag{57}$$

Signalons que la matrice $\mathbb{F}^{-1}\mathbb{G}$ utilisée est antisymétrique en conséquence de l'algèbre fermionique des jeux $\{\hat{\gamma}_n\}$ et $\{\hat{\gamma}'_n\}$ de quasiparticules ainsi que des relations linéaires Eq. (55) entre eux : $\left[\hat{\gamma}'^{\dagger}_m,\hat{\gamma}'^{\dagger}_n\right]_+ = \left(\mathbb{F}\mathbb{G}^T + \mathbb{G}\mathbb{F}^T\right)_{mn}\hat{1} = 0$ et donc $\mathbb{F}^{-1}\mathbb{G} = -\mathbb{G}^T\left(\mathbb{F}^T\right)^{-1} = -\left(\mathbb{F}^{-1}\mathbb{G}\right)^T$.

En outre, si $\hat{\mathcal{T}}$ laisse invariants les opérateurs d'annihilation des quasiparticules de l'état $|\mathbf{\Phi}\rangle$, ceux de création sont transformés en des combinaisons linéaires de leurs homologues pour l'autre fonction d'onde $|\mathbf{\Phi}'\rangle$ et nous noterons donc $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_m$ ces combinaisons :

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}_m\hat{\mathcal{T}} = \hat{\gamma}_m \\ \hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_m = \hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}^{\dagger}_m\hat{\mathcal{T}} = \hat{\gamma}^{\dagger}_m - \frac{1}{2}\sum_{n,p=1}^{d}\left(\mathbb{F}^{-1}\mathbb{G}\right)_{np}\left[\hat{\gamma}_n\hat{\gamma}_p,\hat{\gamma}^{\dagger}_m\right] = \hat{\gamma}^{\dagger}_m + \sum_{n=1}^{d}\left(\mathbb{F}^{-1}\mathbb{G}\right)_{mn}\hat{\gamma}_n = \sum_{n=1}^{d}\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{mn}\hat{\gamma}'^{\dagger}_n \end{cases} \tag{58}$$

Il est important de noter que les opérateurs ainsi définis satisfont par construction aux relations d'anticommutation canoniques bien que n'étant pas reliés par la conjugaison hermitique :

$$\left[\hat{\gamma}_m,\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_n\right]_+ = \hat{\mathcal{T}}^{-1}\left[\hat{\gamma}_m,\hat{\gamma}^{\dagger}_n\right]_+\hat{\mathcal{T}} = \delta_{m,n}\hat{1} \tag{59}$$

La transformation $\hat{\mathcal{T}}$ induit aussi une résolution de l'identité non triviale dans l'espace de Fock. Considérons en effet la base orthonormée formée des états $|n_1\cdots n_d\rangle$ issus du vide HF ou BdG $|\mathbf{\Phi}\rangle$ en créant une ou plusieurs de ses quasiparticules :

$$|n_1\cdots n_d\rangle = \left(\hat{\gamma}^{\dagger}_1\right)^{n_1}\cdots\left(\hat{\gamma}^{\dagger}_d\right)^{n_d}|\mathbf{\Phi}\rangle, \tag{60}$$

les nombres d'occupation n_l $(l = 1,\cdots,d)$ étant bien sûr 0 ou 1. En appliquant la transformation inverse $\hat{\mathcal{T}}^{-1}$ sur ces vecteurs, les kets $|n_1\cdots n_d\rangle_R$ obtenus ne sont plus orthonormés et correspondent maintenant à la création de quasiparticules $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_m$ sur l'état $|\mathbf{\Phi}\rangle$:

$$|n_1\cdots n_d\rangle_R = \hat{\mathcal{T}}^{-1}|n_1\cdots n_d\rangle = \left(\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}^{\dagger}_1\hat{\mathcal{T}}\right)^{n_1}\cdots\left(\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}^{\dagger}_d\hat{\mathcal{T}}\right)^{n_d}\hat{\mathcal{T}}^{-1}|\mathbf{\Phi}\rangle = \left(\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_1\right)^{n_1}\cdots\left(\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_d\right)^{n_d}|\mathbf{\Phi}\rangle, \tag{61}$$

où nous avons utilisé l'invariance sous $\hat{\mathcal{T}}$ ou $\hat{\mathcal{T}}^{-1}$ du vide $|\mathbf{\Phi}\rangle$ pour les opérateurs $\hat{\gamma}_n$. Les états Eq. (61) sont également des vecteurs propres droits des opérateurs non hermitiques $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l\hat{\gamma}_l$ résultant de la transformation des nombres $\hat{n}_l = \hat{\gamma}^{\dagger}_l\hat{\gamma}_l$ de quasiparticules associées à $|\mathbf{\Phi}\rangle$:

$$\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l\hat{\gamma}_l|n_1\cdots n_d\rangle_R = \hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}^{\dagger}_l\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}_l\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}|n_1\cdots n_d\rangle = n_l|n_1\cdots n_d\rangle_R \tag{62}$$

La base adjointe, formée des vecteurs propres gauches ${}_L\langle n_1\cdots n_d|$, s'obtient immédiatement selon les mêmes développements mais en transformant par $\hat{\mathcal{T}}$ les vecteurs duals de la représentation Eq. (60) en nombres d'occupation :

$${}_L\langle n_1\cdots n_d| = \langle n_1\cdots n_d|\hat{\mathcal{T}} = \langle\mathbf{\Phi}|\hat{\mathcal{T}}\left(\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}_d\hat{\mathcal{T}}\right)^{n_d}\cdots\left(\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{\gamma}_1\hat{\mathcal{T}}\right)^{n_1} = \langle\tilde{\mathbf{\Phi}}'|\left(\hat{\gamma}_d\right)^{n_d}\cdots\left(\hat{\gamma}_1\right)^{n_1} \tag{63}$$

$${}_L\langle n_1\cdots n_d|\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l\hat{\gamma}_l = \langle n_1\cdots n_d|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{n}_l\hat{\mathcal{T}} = {}_L\langle n_1\cdots n_d|n_l \tag{64}$$

Ce sont donc ici des quasiparticules $\hat{\gamma}^{\dagger}_m$ qui sont créées sur l'autre vide $|\tilde{\mathbf{\Phi}}'\rangle$. Pour parvenir à un tel résultat, il convient toutefois que $\hat{\mathcal{T}}$ connecte les deux états cohérents HF ou BdG considérés : $\langle\mathbf{\Phi}|\hat{\mathcal{T}} = \langle\tilde{\mathbf{\Phi}}'|$. La preuve consiste simplement à remarquer que $\langle\tilde{\mathbf{\Phi}}'|\hat{\mathcal{T}}^{-1}\hat{n}_l = \langle\tilde{\mathbf{\Phi}}'|\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l\hat{\gamma}_l\hat{\mathcal{T}}^{-1} = 0$, $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l$ Eq. (58) étant en effet une combinaison linéaire des

opérateurs $\hat{\gamma}'^{\dagger}_{m}$ dont $\langle\tilde{\Phi}'| = \langle\Phi'|/\langle\Phi'|\Phi\rangle$ est le vide. Par conséquent, les vecteurs $\langle\tilde{\Phi}'|\hat{\mathcal{T}}^{-1}$ et $\langle\Phi|$ sont nécessairement colinéaires en correspondant tous les deux à la configuration où tous les nombres d'occupation $\{n_l\}$ sont nuls. Or $\langle\tilde{\Phi}'|\hat{\mathcal{T}}^{-1}|\Phi\rangle = \langle\tilde{\Phi}'|\Phi\rangle = 1$ et nous avons bien $\langle\tilde{\Phi}'|\hat{\mathcal{T}}^{-1} = \langle\Phi|$. Ce résultat s'identifie ainsi au théorème de Thouless dans sa forme la plus générale. Il demeure donc valable quelle que soit la nature HF ou BdG des deux vides non-orthogonaux mis en relation. Nous pouvons finalement synthétiser les résultats obtenus au travers des relations de fermeture et de biorthogonalité satisfaites par les vecteurs Eqs. (61), (63) issus de la transformation de Thouless de la représentation en nombres d'occupation:

$$\left\{\begin{array}{l} \displaystyle\sum_{\{n_1\cdots n_d\}} |n_1\cdots n_d\rangle_R\,{}_L\langle n_1\cdots n_d| = \hat{\mathcal{T}}^{-1}\sum_{\{n_1\cdots n_d\}} |n_1\cdots n_d\rangle\langle n_1\cdots n_d|\,\hat{\mathcal{T}} = \hat{1} \\ {}_L\langle n_1\cdots n_d|n'_1\cdots n'_d\rangle_R = \langle n_1\cdots n_d|\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{T}}^{-1}|n'_1\cdots n'_d\rangle = \delta_{n_1,n'_1}\cdots\delta_{n_d,n'_d} \end{array}\right. \tag{65}$$

Dès lors, la dyade $|\Phi\rangle\langle\tilde{\Phi}'|$, nécessaire pour estimer les éléments de matrice Eq. (54), peut être aisément extraite en éliminant toutes les configurations comportant au moins une excitation de quasiparticules. Grâce aux développements algébriques précédents, un tel objectif est atteint via un opérateur gaussien non hermitique

$$\hat{\mathcal{D}} = \frac{1}{\mathcal{Z}}\exp\left(-\sum_{l=1}^{d}\vartheta_l\;\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_{l}\hat{\gamma}_l\right), \tag{66}$$

où les réels $\{\vartheta_l\}$ sont arbitraires et où $\mathcal{Z}$ assure la normalisation. Physiquement, $\hat{\mathcal{D}}$ résulte simplement de la transformation de Thouless $\hat{\mathcal{T}}$ de l'opérateur densité décrivant l'état d'équilibre thermodynamique dans l'ensemble grand-canonique d'un gaz parfait de quasiparticules d'états $\{|\gamma_l\rangle\}$. Dans cette interprétation, les paramètres ϑ_l sont donc reliés aux énergies individuelles ε_l de ces quasiparticules, à la température β^{-1} et au potentiel chimique μ selon $\vartheta_l = \beta(\varepsilon_l - \mu)$. L'opérateur gaussien $\hat{\mathcal{D}}$ est par ailleurs diagonal dans la représentation Eq. (65) des vecteurs propres droits et gauches des opérateurs $\{\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_{l}\hat{\gamma}_l\}$:

$$\hat{\mathcal{D}} = \sum_{\{n_1\cdots n_d\}} |n_1\cdots n_d\rangle_R\,\frac{e^{-\vartheta_1 n_1}}{1+e^{-\vartheta_1}}\cdots\frac{e^{-\vartheta_d n_d}}{1+e^{-\vartheta_d}}\,{}_L\langle n_1\cdots n_d|, \tag{67}$$

Il en résulte que dans la limite $\vartheta_1 \to +\infty,\cdots,\vartheta_d \to +\infty$ (correspondant à une température nulle et un potentiel chimique $\mu < \min_l \varepsilon_l$ pour le gaz parfait sous jacent), seule la configuration $n_1 = 0,\cdots,n_d = 0$ subsiste et $\hat{\mathcal{D}}$ se réduit donc à la dyade $|0\cdots0\rangle_R\,{}_L\langle 0\cdots0| = |\Phi\rangle\langle\tilde{\Phi}'|$. Au final, nous pouvons ainsi ramener tout élément de matrice entre deux états non orthogonaux, chacun de type HF ou BdG, à une valeur moyenne dans l'ansatz gaussien Eq. (66) :

$$\langle\Phi'|\hat{O}_1\cdots\hat{O}_k|\Phi\rangle = \langle\Phi'|\Phi\rangle\lim_{\{\vartheta_l\to\infty\}}\langle\hat{O}_1\cdots\hat{O}_k\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}, \tag{68}$$

où $\langle\cdots\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} = Tr(\cdots\hat{\mathcal{D}})$ désigne logiquement la valeur moyenne dans un mélange statistique représenté par l'opérateur densité $\hat{\mathcal{D}}$.

Dans le cas de deux fonctions d'onde HF identiques, la transformation de Thouless se réduit à l'identité et $\hat{\mathcal{D}}$ décrit l'état d'équilibre d'un gaz de Fermi sans interaction à

température finie. Il s'agit du cas précisément considéré par M. Gaudin dans sa démonstration du théorème de Wick, les facteurs $\hat{O}_i$ étant de plus limités à des opérateurs élémentaires de création ou d'annihilation d'un fermion. Dans la situation plus générale que nous traitons ici, le raisonnement utilisé peut toutefois être repris en termes des opérateurs de quasiparticules $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_m$ et $\hat{\gamma}_n$ qui vérifient l'algèbre habituelle des fermions (cf Eq. (59)). L'idée principale consiste alors à déplacer progressivement le premier facteur pour l'amener en dernière position grâce aux relations d'anticommutation des opérateurs de fermions. Dans la mesure où $\left[\hat{O}_1,\hat{O}_j\right]_+$ est systématiquement un multiple de l'identité, il vient ainsi :

$$\begin{aligned}\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k &= \left[\hat{O}_1,\hat{O}_2\right]_+\hat{O}_3\cdots\hat{O}_k - \hat{O}_2\hat{O}_1\hat{O}_3\cdots\hat{O}_k \\ &= \left[\hat{O}_1,\hat{O}_2\right]_+\hat{O}_3\cdots\hat{O}_k - \left[\hat{O}_1,\hat{O}_3\right]_+\hat{O}_2\hat{O}_4\cdots\hat{O}_k + \hat{O}_2\hat{O}_3\hat{O}_1\hat{O}_4\cdots\hat{O}_k \\ &\vdots \\ &= (-1)^{k-1}\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\hat{O}_1 + \sum_{j=2}^{k}(-1)^j\left[\hat{O}_1,\hat{O}_j\right]_+\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k,\end{aligned} \tag{69}$$

cette dernière relation se vérifiant immédiatement par récurrence. Or, en se restreignant *provisoirement* à un premier opérateur $\hat{O}_1 = \hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l$ ou $\hat{O}_1 = \hat{\gamma}_l$, les produits $\hat{O}_1\hat{\mathcal{D}}$ et $\hat{\mathcal{D}}\hat{O}_1$ sont égaux à un facteur près :

$$\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l\hat{\mathcal{D}} = e^{\vartheta_l}\hat{\mathcal{D}}\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l,\ \hat{\gamma}_l\hat{\mathcal{D}} = e^{-\vartheta_l}\hat{\mathcal{D}}\hat{\gamma}_l \tag{70}$$

Il suffit en effet d'intégrer les équations $\partial\left(\hat{\mathcal{D}}^{-1}\hat{O}_1\hat{\mathcal{D}}\right)/\partial\vartheta_l = \hat{\mathcal{D}}^{-1}\left[\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l\hat{\gamma}_l,\hat{O}_1\right]\hat{\mathcal{D}} = \pm\left(\hat{\mathcal{D}}^{-1}\hat{O}_1\hat{\mathcal{D}}\right)$ directement issues de la forme gaussienne de $\hat{\mathcal{D}}$ ainsi que des relations d'anticommutation canoniques des opérateurs $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l$ et $\hat{\gamma}_l$, les signes $(+)$ et $(-)$ se référant respectivement à $\hat{O}_1 = \hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l$ et $\hat{O}_1 = \hat{\gamma}_l$. Dans ces conditions, l'invariance cyclique de la trace permet de relier les deux valeurs moyennes $\left\langle\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ et $\left\langle\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\hat{O}_1\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ du développement général Eq. (69) :

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\hat{O}_1\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} &= Tr\left(\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\hat{O}_1\hat{\mathcal{D}}\right) = e^{\pm\vartheta_l}Tr\left(\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\hat{\mathcal{D}}\hat{O}_1\right) \\ &= e^{\pm\vartheta_l}Tr\left(\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\hat{\mathcal{D}}\right) = e^{\pm\vartheta_l}\left\langle\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\end{aligned} \tag{71}$$

Pour un nombre pair $k = 2s$ de facteurs $\hat{O}_i$, le calcul de la valeur moyenne de leur produit avec l'opérateur densité gaussien $\hat{\mathcal{D}}$, éventuellement non hermitique, se détermine donc au travers d'une procédure récursive définie par la relation

$$\left\langle\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{2s}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} = \sum_{j=2}^{2s}(-1)^j\frac{\left[\hat{O}_1,\hat{O}_j\right]_+}{1+e^{\pm\vartheta_l}}\left\langle\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}. \tag{72}$$

Avec seulement deux facteurs, nous obtenons de plus les contractions $\left\langle\hat{O}_1\hat{O}_2\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$:

$$\left\langle\hat{O}_1\hat{O}_2\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} = \frac{\left[\hat{O}_1,\hat{O}_2\right]_+}{1+e^{\pm\vartheta_l}}. \tag{73}$$

Rappelons qu'à ce stade $\hat{O}_1$ est limité aux opérateurs $\hat{\tilde{\gamma}}'^{\dagger}_l$ (signe +) et $\hat{\gamma}_l$ (signe -), $\hat{O}_2$ étant en revanche une combinaison linéaire quelconque des opérateurs de fermions élémentaires. Le développement Eq. (72) peut ainsi être écrit sous une forme manifestement linéaire dans les opérateurs $\hat{O}_1$ jusqu'alors considérés :

$$\left\langle \hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{2s}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} = \sum_{j=2}^{2s}(-1)^j \left\langle \hat{O}_1\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} \left\langle \hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} \tag{74}$$

La généralisation à un facteur $\hat{O}_1$ quelconque est donc immédiate dès lors qu'il peut se décomposer linéairement en termes des opérateurs de quasiparticules $\{\hat{\gamma}_l\}$ et $\{\hat{\bar{\gamma}}'^{\dagger}_l\}$. Pour cela, les kets de l'espace $\mathcal{H}^{(1)}_{ex}$ à un corps étendu $\{|\gamma_l\rangle\}$ et $\left\{|\bar{\bar{\gamma}}'_l\rangle = \sum_{m=1}^{d}\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{lm}|\bar{\gamma}'_m\rangle\right\}$ (cf. Eq. (58)), dont ces opérateurs dépendent linéairement, doivent former une base. Ils définissent deux sous-espaces non-orthogonaux et leur nombre total $2d$ est égal à la dimension de $\mathcal{H}^{(1)}_{ex}$. Il suffit donc de s'assurer qu'ils ne sont pas liés. Or, si $\sum_{m=1}^{d}\left(\lambda_m|\gamma_m\rangle + \lambda'_m|\bar{\bar{\gamma}}'_m\rangle\right) = 0$ où λ_m et λ'_m sont des scalaires, on a nécessairement :

$$\begin{cases} \sum_{m=1}^{d}\left(\lambda_m\langle\gamma'_l|\gamma_m\rangle + \lambda'_m\langle\gamma'_l|\bar{\bar{\gamma}}'_m\rangle\right) = \sum_{m=1}^{d}\mathbb{F}_{lm}\lambda_m = 0 \\ \sum_{m=1}^{d}\left(\lambda_m\langle\bar{\gamma}_l|\gamma_m\rangle + \lambda'_m\langle\bar{\gamma}_l|\bar{\bar{\gamma}}'_m\rangle\right) = \sum_{m,n=1}^{d}\lambda'_m\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{mn}\langle\bar{\gamma}_l|\bar{\gamma}'_n\rangle = 0 \end{cases} \tag{75}$$

La matrice $\mathbb{F}$ étant inversible, les coefficients λ_m sont directement nuls. En revenant aux amplitudes $\{U_{\vec{r}\sigma,l}, V_{\vec{r}\sigma,l}\}$ et $\{U'_{\vec{r}\sigma,m}, V'_{\vec{r}\sigma,m}\}$ des transformations de Bogoliubov définissant, respectivement, les deux états cohérents considérés $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$, il apparaît de plus que les recouvrements $\langle\bar{\gamma}_l|\bar{\gamma}'_n\rangle$ sont donnés par la matrice transposée de $\mathbb{F}$:

$$\langle\bar{\gamma}_l|\bar{\gamma}'_n\rangle = \langle U_l|U'_n\rangle + \langle V_l|V'_n\rangle = \langle U'^{*}_n|U^{*}_l\rangle + \langle V'^{*}_n|V^{*}_l\rangle = \langle\gamma'_n|\gamma_l\rangle = \mathbb{F}_{nl}. \tag{76}$$

Par conséquent, $\sum_{m,n=1}^{d}\lambda'_m\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{mn}\langle\bar{\gamma}_l|\bar{\gamma}'_n\rangle = \lambda'_l = 0$ et l'ensemble $\left\{|\gamma_l\rangle, |\bar{\bar{\gamma}}'_l\rangle\right\}$ est donc complet. Ces développements montrent simultanément que la base adjointe est constituée des vecteurs $\left\{\langle\tilde{\gamma}'_l| = \sum_{m=1}^{d}\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{lm}\langle\gamma'_m|\right\}$ et $\{\langle\bar{\gamma}_l|\}$ de l'espace dual, qui sont aussi reliés linéairement aux opérateurs de quasiparticules $\{\hat{\gamma}_l\}$ et $\{\hat{\bar{\gamma}}'^{\dagger}_l\}$. En définitive, nous pouvons donc écrire dans l'espace à un corps étendu la relation de fermeture

$$\sum_{l=1}^{d}\left(|\gamma_l\rangle\langle\tilde{\gamma}'_l| + |\bar{\bar{\gamma}}'_l\rangle\langle\bar{\gamma}_l|\right) = 1. \tag{77}$$

En attachant les deux vecteurs habituels $|O_i\rangle = \begin{pmatrix} |Y^{*}_i\rangle \\ |X^{*}_i\rangle \end{pmatrix}$ et $|\bar{O}_i\rangle = \begin{pmatrix} |X_i\rangle \\ |Y_i\rangle \end{pmatrix}$ à chaque opérateur $\hat{O}_i = \sum_{\vec{r}\sigma}\left(\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}Y^{*}_{\vec{r}\sigma,i} + \hat{c}_{\vec{r}\sigma}X^{*}_{\vec{r}\sigma,i}\right)$, cette résolution de l'identité induit les développements suivants issus de la décomposition du ket $|O_i\rangle$ ou du bra $\langle\bar{O}_i|$:

$$\hat{O}_i = \sum_{l=1}^{d}\left(\hat{\gamma}_l\langle\tilde{\gamma}'_l|O_i\rangle + \hat{\bar{\gamma}}'^{\dagger}_l\langle\bar{\gamma}_l|O_i\rangle\right) = \sum_{l=1}^{d}\left(\langle\bar{O}_i|\gamma_l\rangle\hat{\bar{\gamma}}'^{\dagger}_l + \langle\bar{O}_i|\bar{\bar{\gamma}}'_l\rangle\hat{\gamma}_l\right) \tag{78}$$

Par conséquent, un premier facteur $\hat{O}_1$ quelconque peut toujours se ramener à une combinaison linéaire des opérateurs de quasiparticules $\hat{\tilde{\gamma}}_l'^{\dagger}$ et $\hat{\gamma}_l$. La relation Eq. (74), donnant une expression récursive de la valeur moyenne $\left\langle \hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{2s}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ dans un opérateur densité gaussien $\hat{\mathcal{D}}$, est donc valable en général et correspond au théorème de Wick. Elle requiert seulement la connaissance des contractions binaires $\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ qui sont, en outre, obtenues en combinant les décompositions Eq. (78), les contractions élémentaires $\left\langle \hat{\tilde{\gamma}}_l'^{\dagger}\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$, $\left\langle \hat{\gamma}_l\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ déterminées auparavant Eq. (73) ainsi que les relations d'anticommutation canoniques Eq. (59) pour l'ensemble $\left\{\hat{\gamma}_l,\hat{\tilde{\gamma}}_l'^{\dagger}\right\}$. Par exemple, en écrivant $\hat{O}_i$ et $\hat{O}_j$ respectivement en termes du ket $\left|O_i\right\rangle$ et du bra $\left\langle\overline{O}_j\right|$, nous avons :

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} &= \sum_{l=1}^{d}\frac{\left[\hat{\gamma}_l,\hat{O}_j\right]_+}{1+e^{-\vartheta_l}}\left\langle\tilde{\gamma}_l'\middle|O_i\right\rangle+\sum_{l=1}^{d}\frac{\left[\hat{\tilde{\gamma}}_l'^{\dagger},\hat{O}_j\right]_+}{1+e^{\vartheta_l}}\left\langle\overline{\gamma}_l\middle|O_i\right\rangle \\ &= \sum_{l=1}^{d}\frac{\left\langle\overline{O}_j\middle|\gamma_l\right\rangle\left\langle\tilde{\gamma}_l'\middle|O_i\right\rangle}{1+e^{-\vartheta_l}}+\sum_{l=1}^{d}\frac{\left\langle\overline{O}_j\middle|\overline{\tilde{\gamma}}_l'\right\rangle\left\langle\overline{\gamma}_l\middle|O_i\right\rangle}{1+e^{\vartheta_l}}\end{aligned} \tag{79}$$

De façon équivalente, avec le bra $\left\langle\overline{O}_i\right|$ et le ket $\left|O_j\right\rangle$, il vient :

$$\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} = \sum_{l=1}^{d}\frac{\left\langle\overline{O}_i\middle|\gamma_l\right\rangle\left\langle\tilde{\gamma}_l'\middle|O_j\right\rangle}{1+e^{\vartheta_l}}+\sum_{l=1}^{d}\frac{\left\langle\overline{O}_i\middle|\overline{\tilde{\gamma}}_l'\right\rangle\left\langle\overline{\gamma}_l\middle|O_j\right\rangle}{1+e^{-\vartheta_l}} \tag{80}$$

Compte-tenu de la relation de fermeture Eq. (77) dans l'espace à un corps étendu, ces deux expressions Eqs. (79), (80) sont bien identiques. Elles ont par ailleurs une limite parfaitement définie quand $\left\{\vartheta_l\to\infty\right\}$ où l'opérateur $\hat{\mathcal{D}}$ s'identifie à la dyade $\left|\Phi\right\rangle\left\langle\tilde{\Phi}'\right|$ et permet d'accéder aux éléments de matrice entre les deux vides HF ou BdG. Quels que soient les facteurs $\hat{O}_i$ considérés, les contractions $\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ se déduisent aussi de celles entre deux opérateurs élémentaires de fermions qui définissent la matrice densité à un corps généralisée $\mathcal{R}$:

$$\mathcal{R}=\begin{pmatrix}\rho & \kappa\\ \tilde{\kappa} & \tilde{\rho}\end{pmatrix} \text{ où } \begin{cases}\rho_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'}=\left\langle\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}'\sigma'},\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\\ \tilde{\rho}_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'}=\left\langle\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'},\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\end{cases} \text{ et } \begin{cases}\kappa_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'}=\left\langle\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'},\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\\ \tilde{\kappa}_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'}=\left\langle\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}'\sigma'},\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\end{cases} \tag{81}$$

En d'autres termes, $\left\langle\varpi,\vec{r}\sigma\middle|\mathcal{R}\middle|\varpi',\vec{r}'\sigma'\right\rangle=\left\langle\hat{c}^{\dagger}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'},\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ et donc

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} &= \sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\sum_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}\left\langle\overline{O}_j\middle|\varpi,\vec{r}\sigma\right\rangle\left\langle\hat{c}^{\dagger}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'},\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\left\langle\varpi',\vec{r}'\sigma'\middle|O_i\right\rangle=\left\langle\overline{O}_j\middle|\mathcal{R}\middle|O_i\right\rangle \\ &= \sum_{\varpi,\vec{r}\sigma}\sum_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}\left\langle\overline{O}_i\middle|\varpi,\vec{r}\sigma\right\rangle\left\langle\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\left\langle\varpi',\vec{r}'\sigma'\middle|O_j\right\rangle=\left\langle\overline{O}_i\middle|1-\mathcal{R}\middle|O_j\right\rangle.\end{aligned} \tag{82}$$

Au regard des résultats Eqs. (79), (80) issus de la démonstration du théorème de Wick, $\mathcal{R}$ est donc donné, dans la limite $\left\{\vartheta_l\to\infty\right\}$ de température nulle, par

$$\begin{cases}\mathcal{R}=\sum_{l=1}^{d}\left|\gamma_l\right\rangle\left\langle\tilde{\gamma}_l'\right|=\sum_{l,m=1}^{d}\left|\gamma_l\right\rangle\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{lm}\left\langle\gamma_m'\right|\\ 1-\mathcal{R}=\sum_{l=1}^{d}\left|\overline{\tilde{\gamma}}_l'\right\rangle\left\langle\overline{\gamma}_l\right|=\sum_{l,m=1}^{d}\left|\overline{\gamma}_l'\right\rangle\left(\mathbb{F}^{-1}\right)_{ml}\left\langle\overline{\gamma}_m\right|\end{cases} \tag{83}$$

Au final, $\left\langle \hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{2s}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$ est ainsi une fonctionnelle $\mathcal{O}[\mathcal{R}]$ de la matrice densité réduite $\mathcal{R}$ qui résulte de l'application itérée de l'algorithme récursif Eq. (74) pour estimer les valeurs moyennes de $2s-2$, puis $2s-4,...,4$ facteurs. En fait, $\mathcal{O}[\mathcal{R}]$ peut être directement obtenue en remarquant que cette relation de récurrence est exactement celle du développement d'un pfaffien, c'est-à-dire de la racine carrée du déterminant d'une matrice antisymétrique [Cay52, Baj08]. Introduisons en effet une telle matrice $\mathbb{C}$ de dimension $2s\times 2s$ avec des entrées triangulaires supérieures données par les contractions binaires des facteurs $\hat{O}_i$ du produit considéré : $\mathbb{C}_{i,j}=\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}$, $i<j\in\{1,\cdots,2s\}$. Le pfaffien $\mathrm{Pf}(\mathbb{C})$ peut alors être retrouvé selon une procédure similaire à celle du calcul d'un déterminant, c'est-à-dire en le développant, par exemple, selon la première ligne [Baj08]:

$$\mathrm{Pf}(\mathbb{C})=\sum_{j=2}^{2s}(-1)^j\,\mathbb{C}_{1,j}\mathrm{Pf}\left(\mathbb{C}^{(1,j)}\right), \tag{84}$$

où $\mathbb{C}^{(1,j)}$ est la sous-matrice obtenue en supprimant la ligne 1 et la colonne j. Nous obtenons ainsi immédiatement l'identité $\mathcal{O}[\mathcal{R}]=\mathrm{Pf}(\mathbb{C})$ par récurrence : pour deux facteurs, la définition de la matrice $\mathbb{C}$ et du pfaffien induisent bien $\left\langle \hat{O}_1\hat{O}_2\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}=\mathbb{C}_{12}=\mathrm{Pf}\begin{pmatrix}0 & \mathbb{C}_{12}\\ -\mathbb{C}_{12} & 0\end{pmatrix}$; en supposant maintenant le résultat valable pour $2s-2$ facteurs, nous pouvons donc écrire $\left\langle \hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}=\mathrm{Pf}\left(\mathbb{C}^{(1,j)}\right)$ de sorte que les relations Eqs. (74), (84) achèvent la preuve en conduisant à $\left\langle \hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{2s}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}=\mathrm{Pf}(\mathbb{C})$. A notre connaissance, cette connexion entre le théorème de Wick et les pfaffiens a été initialement mise en lumière par E. Lieb [Lie68] à la suite des travaux de M. Gaudin. Elle permet, via la forme explicite du pfaffien d'une matrice en termes de ses éléments, de synthétiser les résultats établis sous la forme

$$\begin{cases}\left\langle \hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{2s}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}=\mathcal{O}[\mathcal{R}]=\mathrm{Pf}(\mathbb{C})=\sum_{\pi}\varepsilon_\pi\mathbb{C}_{\pi(1),\pi(2)}\cdots\mathbb{C}_{\pi(2s-1),\pi(2s)}\\ \mathbb{C}_{ij}=\left\langle \hat{O}_i\hat{O}_j\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}=\left\langle \overline{O}_j\middle|\mathcal{R}\middle|O_i\right\rangle=\left\langle \overline{O}_i\middle|1-\mathcal{R}\middle|O_j\right\rangle\end{cases}. \tag{85}$$

Ici la somme s'effectue sur les $(2s-1)!!$ permutations π de l'ensemble $\{1,2,\cdots,2s\}$ satisfaisant les contraintes $\pi(2r-1)<\pi(2r+1)$ $(r=1,\cdots,s-1)$ et $\pi(2r-1)<\pi(2r)$ $(r=1,\cdots,s)$, ε_π désignant leur signature. Hormis les aspects formels, la reformulation du théorème de Wick comme un pfaffien est particulièrement adaptée aux implémentations numériques pour un nombre important de facteurs $\hat{O}_i$ en raison de méthodes numériques efficaces pour évaluer $\mathrm{Pf}(\mathbb{C})$ via la détermination d'une forme tridiagonale antisymétrique de la matrice $\mathbb{C}$ [Wim12].

Enfin, le cas de produits $\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k$ avec un nombre k impair de facteurs, que nous n'avons pas jusqu'alors traité, est en fait trivial en conduisant à un élément de matrice systématiquement nul. L'expression Eq. (61) du vecteur $\left|n_1\cdots n_d\right\rangle_R$ ainsi que les relations d'anticommutation canoniques Eq. (59) satisfaites par les opérateurs $\hat{\gamma}_l'^{\dagger}$ et $\hat{\gamma}_l$ montrent en effet que ces opérateurs augmentent et diminuent d'une unité le nombre d'occupation n_l, respectivement. Un nombre impair de facteurs $\hat{O}_i$ ne peut donc conserver le nombre total

d'excitations $n_1+\cdots+n_d$, alors que l'ansatz gaussien $\hat{\mathcal{D}}$ le préserve. Par conséquent, $Tr\left[\hat{O}_1\cdots\hat{O}_k\hat{\mathcal{D}}\right]=\sum_{\{n_1\cdots n_d\}}{}_L\left\langle n_1\cdots n_d\right|\hat{\mathcal{D}}\hat{O}_1\cdots\hat{O}_k\left|n_1\cdots n_d\right\rangle_R$ est nécessairement nul.

Tous les raisonnements précédents ont été menés pour mettre en exergue l'énoncé le plus général du théorème de Wick qui se réfère à une valeur moyenne dans un opérateur densité $\hat{\mathcal{D}}$ gaussien, éventuellement non hermitique. Traditionnellement, $\hat{\mathcal{D}}$ est écrit comme l'exponentielle d'une forme quadratique $\hat{\mathcal{K}}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger & \hat{c}\end{pmatrix}\mathcal{K}\begin{pmatrix}\hat{c}\\ \hat{c}^\dagger\end{pmatrix}$ dans les opérateurs de fermions $\hat{c}^\dagger_{\bar{r}\sigma}$ et $\hat{c}_{\bar{r}\sigma}$ avec $\mathcal{K}=\begin{pmatrix}A & B\\ B' & -A^t\end{pmatrix}$, B et B' étant deux matrices antisymétriques. Une expression similaire à celle Eq. (66) que nous avons utilisée est alors systématiquement retrouvée en définissant les opérateurs de quasiparticules $\hat{\tilde{\gamma}}'^\dagger_l$ et $\hat{\gamma}_l$ au travers des vecteurs propres gauches et droits de la matrice $\mathcal{K}$. La démonstration de M. Gaudin [Gau60] du théorème de Wick, que nous avons adaptée en suivant les grandes lignes présentées par R. Balian & E. Brezin [Bal69], est donc générale et alternative aux développements basés sur les algèbres de Grassmann [Cor06]. Signalons que les opérateurs gaussiens non hermitiques sont au cœur des échantillonnages AFQMC à température finie. Ils apparaissent également dans la restauration des symétries de l'Hamiltonien à partir d'une approximation HF ou BdG de l'état d'équilibre statistique dans l'ensemble grand-canonique. La validité du théorème de Wick pour ces opérateurs ouvre en conséquence la possibilité de généraliser l'approche de champ moyen enchevêtré par les symétries pour appréhender les propriétés du modèle de Hubbard à température finie. Dans le travail présenté ici, nous nous concentrerons toutefois sur l'état fondamental et dans ce contexte, les éléments de matrice d'intérêt $\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\left|\Phi\right\rangle$ peuvent aussi être obtenus sans recourir à une limite de température nulle. En effet, après la décomposition Eq. (78) du premier facteur $\hat{O}_1$ en termes des opérateurs $\hat{\tilde{\gamma}}'^\dagger_l$ et $\hat{\gamma}_l$, seules les contributions en $\hat{\gamma}_l$ subsistent puisque $\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{\tilde{\gamma}}'^\dagger_l=0$. Pour chacune d'entre elles, il suffit de faire appel au développement Eq. (69) afin d'amener $\hat{\gamma}_l$ en dernière position où l'on a alors $\hat{\gamma}_l\left|\Phi\right\rangle=0$. L'expression récursive Eq. (74) du théorème de Wick est donc directement retrouvée, avec bien sûr la même expression $\mathbb{C}_{1j}=\left\langle\overline{O}_j\right|\mathcal{R}\left|O_1\right\rangle$ des contractions binaires $\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{O}_1\hat{O}_j\left|\Phi\right\rangle$:

$$\begin{aligned}\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{O}_1\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\left|\Phi\right\rangle&=\sum_{l=1}^{d}\left\langle\tilde{\gamma}'_l\right|O_1\left\rangle\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{\gamma}_l\hat{O}_2\cdots\hat{O}_k\left|\Phi\right\rangle\right.\\&=\sum_{l=1}^{d}\sum_{j=2}^{k}(-1)^j\left[\hat{\gamma}_l,\hat{O}_j\right]_+\left\langle\tilde{\gamma}'_l\right|O_1\left\rangle\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k\left|\Phi\right\rangle\right.\\&=\sum_{l=1}^{d}\sum_{j=2}^{k}(-1)^j\left\langle\overline{O}_j\right|\gamma_l\left\rangle\left\langle\tilde{\gamma}'_l\right|O_1\left\rangle\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k\left|\Phi\right\rangle\right.\\&=\sum_{j=2}^{k}(-1)^j\,\mathbb{C}_{1j}\left\langle\tilde{\Phi}'\right|\hat{O}_2\cdots\hat{O}_{j-1}\hat{O}_{j+1}\cdots\hat{O}_k\left|\Phi\right\rangle\end{aligned}\tag{86}$$

Pour un nombre impair de facteurs, l'application répétée de cette identité conduit à une combinaison linéaires d'éléments de matrice impliquant un seul opérateur $\hat{O}_j$ et qui sont tous nuls en raison à nouveau des relations $\left\langle \tilde{\Phi}' \right| \hat{\tilde{\gamma}}_l'^{\dagger} = 0$, $\hat{\gamma}_l \left| \Phi \right\rangle = 0$.

Nous conclurons cette section en montrant que le théorème de Wick peut aussi permettre d'accéder aux recouvrements $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle$ qui sont nécessaires pour déterminer les éléments de matrice Eq. (54) entre deux fonctions d'onde HF ou BdG. Avec au moins un des deux états $\left| \Phi \right\rangle$, $\left| \Phi' \right\rangle$ de type BdG, il convient de souligner que seul le module du recouvrement $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle$ a été jusqu'alors déterminé au travers de la formule de Onishi Eq. (56). Dans toute approche reposant sur une superposition de telles fonctions d'onde, la phase de $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle$ joue évidemment un rôle crucial et une procédure pour la déterminer a été proposée via le spectre de la matrice non hermitique $\mathbb{F}$ [Nee82]. Cette méthode demeure toutefois numériquement coûteuse et elle n'a en conséquence été concrètement utilisée que pour des problèmes caractérisés par des espaces à un corps de petite dimension [Sch04]. En réalité, les superpositions d'états BdG n'ont essentiellement été envisagées en physique nucléaire qu'au travers de la restauration du nombre de particules et/ou des nombres quantiques de moment cinétique total à partir d'un unique vide. Dans ce cas, les produits scalaires $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle$ requis font intervenir deux fonctions d'onde BdG reliées par une transformation de jauge et/ou une rotation si bien que des arguments de continuité vis à vis des paramètres de ces opérations sont alors traditionnellement invoqués [Har82]. Dans le cadre du modèle de Hubbard, la nécessité de restaurer les symétries ponctuelles du réseau et la symétrie discrète de translation interdit d'envisager une procédure similaire. L'utilisation alternative de pfaffiens, pour directement accéder au recouvrement entre deux états BdG, a été initiée en 2009 par L. M. Robledo au travers d'un calcul à l'aide de variables de Grassmann [Rob09], repris par la suite via une démarche similaire à celle que nous suivrons [Ber12].

L'idée repose sur le théorème de Wick, formulé en terme de pfaffien Eq. (85), après avoir remarqué que tous les développements effectués pour sa démonstration demeurent valables si les valeurs moyennes sont prises dans le vide $\left| \right\rangle$ de fermions. Or, quelle que soit la nature HF ou BdG de chacune des deux fonctions d'onde $\left| \Phi \right\rangle$ et $\left| \Phi' \right\rangle$, elles s'écrivent comme un produit de facteurs s'exprimant linéairement vis-à-vis des opérateurs de création $\hat{c}_{\bar{r}\sigma}^{\dagger}$ et d'annihilation $\hat{c}_{\bar{r}\sigma}$. Leur recouvrement $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle$ s'identifie, par conséquent, à la valeur moyenne dans le vide $\left| \right\rangle$ de tels produits et il peut donc bien être déterminé par le théorème de Wick. Considérons tout d'abord, dans un but pédagogique, le cas de deux déterminants de Slater $\left| \Phi \right\rangle = \hat{c}_{\phi_1}^{\dagger} \cdots \hat{c}_{\phi_N}^{\dagger} \left| \right\rangle$ et $\left| \Phi' \right\rangle = \hat{c}_{\phi_1'}^{\dagger} \cdots \hat{c}_{\phi_N'}^{\dagger} \left| \right\rangle$ dont le produit scalaire est par ailleurs aisément obtenu par un calcul direct : $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle = \det\left(\phi'^{\dagger} \phi \right)$ avec ϕ et ϕ' les tableaux rectangulaires de dimension $d \times N$ définis par les composantes $\left\{ \phi_{\bar{r}\sigma,n} \right\}$ et $\left\{ \phi'_{\bar{r}\sigma,n} \right\}$ des états individuels peuplés de $\left| \Phi \right\rangle$ et $\left| \Phi' \right\rangle$, respectivement. En remarquant que $\left\langle \Phi' \right| = (-1)^{N(N-1)/2} \left\langle \right| \hat{c}_{\phi_1'} \cdots \hat{c}_{\phi_N'}$, le théorème de Wick conduit à $\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle = (-1)^{N(N-1)/2} \left\langle \right| \hat{c}_{\phi_1'} \cdots \hat{c}_{\phi_N'} \hat{c}_{\phi_1}^{\dagger} \cdots \hat{c}_{\phi_N}^{\dagger} \left| \right\rangle = (-1)^{N(N-1)/2} \mathrm{Pf}(\mathbb{C})$ où $\mathbb{C}$ est la matrice antisymétrisée des contractions binaires. Il s'agit donc ici d'une matrice $2N \times 2N$ dont les éléments sont donnés par

$$\begin{cases} \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{c}_{\phi'_i}\hat{c}_{\phi'_j}|\ \rangle = 0,\ 1 \le i < j \le N \\ \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{c}_{\phi'_i}\hat{c}^{\dagger}_{\phi_{j-N}}|\ \rangle = \langle \phi'_i | \phi_{j-N} \rangle = \left(\phi'^{\dagger}\phi\right)_{i,j-N},\ 1 \le i \le N \text{ et } N+1 \le j \le 2N \\ \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{c}^{\dagger}_{\phi_{i-N}}\hat{c}^{\dagger}_{\phi_{j-N}}|\ \rangle = 0,\ N+1 \le i < j \le 2N \end{cases} \tag{87}$$

En d'autres termes, $\mathrm{Pf}(\mathbb{C}) = \mathrm{Pf}\begin{pmatrix} 0_{N\times N} & \phi'^{\dagger}\phi \\ -\phi^{t}\phi'^{*} & 0_{N\times N} \end{pmatrix} = (-1)^{N(N-1)/2}\det\left(\phi'^{\dagger}\phi\right)$ compte-tenu des propriétés du pfaffien [Baj58] et nous retrouvons donc l'expression attendue du recouvrement $\langle \Phi' | \Phi \rangle$ entre deux vides HF. Le calcul est en tout point similaire pour deux états BdG normés et qui s'expriment donc en termes de leurs quasiparticules respectives $\{\hat{\gamma}_n\}$ et $\{\hat{\gamma}'_n\}$ et sous la forme Eq. (19) :

$$|\Phi\rangle = \frac{\det(C)}{v_1 \cdots v_{d/2}}\hat{\gamma}_1 \cdots \hat{\gamma}_d|\ \rangle,\ |\Phi'\rangle = \frac{\det(C')}{v'_1 \cdots v'_{d/2}}\hat{\gamma}'_1 \cdots \hat{\gamma}'_d|\ \rangle \tag{88}$$

où C (resp. C') est la matrice de la décomposition de Bloch-Messiah-Zumino Eq. (15) des amplitudes $\{U_{\vec{r}\sigma,n}, V_{\vec{r}\sigma,n}\}$ $\left(\text{resp.}\{U'_{\vec{r}\sigma,n}, V'_{\vec{r}\sigma,n}\}\right)$ de la transformation de Bogoliubov associée à $|\Phi\rangle$ $\left(\text{resp.}|\Phi'\rangle\right)$ et où les réels $\{v_\alpha\}$ $\left(\text{resp.}\{v'_\alpha\}\right)$ définissent la forme canonique de la matrice V (resp. V'). Le théorème de Wick permet alors d'exprimer la valeur moyenne $\langle\ |\hat{\gamma}'^{\dagger}_1 \cdots \hat{\gamma}'^{\dagger}_d \hat{\gamma}_1 \cdots \hat{\gamma}_d|\ \rangle$ du produit de tous les opérateurs de quasiparticules en termes des contractions de deux d'entre elles, soit :

$$\begin{cases} \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{\gamma}'^{\dagger}_i \hat{\gamma}'^{\dagger}_j|\ \rangle = \sum_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'} V'_{\vec{r}'\sigma',i} U'_{\vec{r}\sigma,j} \langle\ |\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}|\ \rangle = \left(V'^{t}U'\right)_{ij},\ 1 \le i < j \le d \\ \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{\gamma}'^{\dagger}_i \hat{\gamma}_{j-d}|\ \rangle = \left(V'^{t}V^{*}\right)_{i,j-d},\ 1 \le i \le d \text{ et } d+1 \le j \le 2d \\ \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{\gamma}_{i-d}\hat{\gamma}_{j-d}|\ \rangle = \left(U^{\dagger}V^{*}\right)_{i-d,j-d},\ d+1 \le i < j \le 2d \end{cases} \tag{89}$$

En notant que l'unitarité des transformations de Bogoliubov implique l'antisymétrie des matrices $V'^{t}U'$ et $U^{\dagger}V^{*}$, le recouvrement de deux états BdG est finalement donné par

$$\langle \Phi' | \Phi \rangle = (-1)^{d(d-1)/2}\frac{\det\left(C'^{*}\right)\det(C)}{v'_1 v_1 \cdots v'_{d/2} v_{d/2}}\mathrm{Pf}\begin{pmatrix} V'^{T}U' & V'^{T}V^{*} \\ -V^{\dagger}V' & U^{\dagger}V^{*} \end{pmatrix}. \tag{90}$$

Nous renvoyons aux références [Ber12] et [Rob09] pour vérifier que cette expression se réduit bien à la formule d'Onishi Eq. (56) pour le carré du module du produit scalaire entre les deux fonctions d'onde. Enfin, dans le cas hybride d'un vide $|\Phi\rangle$ de Bogoliubov Eq. (19) et d'un déterminant de Slater $|\Phi'\rangle = \hat{c}^{\dagger}_{\phi'_1} \cdots \hat{c}^{\dagger}_{\phi'_N}|\ \rangle$, nous devons cette fois évaluer $\langle\ |\hat{c}_{\phi'_1} \cdots \hat{c}_{\phi'_N}\hat{\gamma}_1 \cdots \hat{\gamma}_d|\ \rangle$, c'est-à-dire les contractions

$$\begin{cases} \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{c}_{\phi'_i}\hat{c}_{\phi'_j}|\ \rangle = 0,\ 1 \le i < j \le N \\ \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{c}_{\phi'_i}\hat{\gamma}_{j-N}|\ \rangle = \sum_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'} \phi'^{*}_{\vec{r}'\sigma',i} V^{*}_{\vec{r}\sigma,j-N} \langle\ |\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}|\ \rangle = \left(\phi'^{\dagger}V^{*}\right)_{i,j-N},\ 1 \le i \le N \text{ et } N+1 \le j \le N+d \\ \mathbb{C}_{ij} = \langle\ |\hat{\gamma}_{i-d}\hat{\gamma}_{j-N}|\ \rangle = \left(U^{\dagger}V^{*}\right)_{i-N,j-N} = 0,\ N+1 \le i < j \le N+d \end{cases} \tag{91}$$

Il en résulte que le recouvrement est maintenant donné par le pfaffien d'une matrice carrée de dimension $N+d$:

$$\left\langle \Phi' \middle| \Phi \right\rangle = (-1)^{N(N-1)/2} \frac{\det(C)}{v_1 \cdots v_{d/2}} \mathrm{Pf} \begin{pmatrix} 0_{N\times N} & \phi'^{\dagger} V^* \\ -V^{\dagger}\phi'^* & U^{\dagger} V^* \end{pmatrix} \tag{92}$$

III.c) Les équations auto-cohérentes SEMF

Il s'agit maintenant de déterminer les conditions auxquelles doivent satisfaire plusieurs fonctions d'onde HF ou BdG $\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle$ pour que leur combinaison linéaire $\left|\Psi_\Gamma\right\rangle$, après restauration des symétries, rende stationnaire l'énergie moyenne $\left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ Eq. (52) le long d'un chemin respectant la condition de normalisation $\left\langle \Psi_\Gamma \middle| \Psi_\Gamma \right\rangle = 1$ Eq. (53) dans l'espace des amplitudes de superposition $x^{(a_i)}$ et de Thouless $Z_{mn}^{(a_i)}$. Les développements menés précédemment à la section III-a ont montré qu'une telle optimisation fait appel aux recouvrements $\mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)} = \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \Phi_g^{(b_j)} \right\rangle$ et aux éléments de matrice de l'Hamiltonien entre les vides $\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle$ considérés et ceux $\left|\Phi_g^{(b_j)}\right\rangle = \hat{T}_g \left|\Phi^{(b_j)}\right\rangle$ issus de la transformation par toutes les opérations de symétrie $\hat{T}_g$ d'un état factorisé $\left|\Phi^{(b_j)}\right\rangle$ du sous-espace. Nous pouvons alors appliquer le théorème de Wick généralisé pour exprimer ces éléments de matrice au travers d'une fonctionnelle $\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]$ de la matrice densité à un corps de transition Eq. (83)

$$\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} = \sum_{m,n=1}^{d} \left|\gamma_{m,g}^{(b_j)}\right\rangle \left(\mathbb{F}_g^{(a_i,b_j)\,-1}\right)_{mn} \left\langle \gamma_n^{(a_i)} \right|. \tag{93}$$

Ici $\mathbb{F}_g^{(a_i,b_j)}$ est la matrice des produits scalaires $\left\langle \gamma_m^{(a_i)} \middle| \gamma_{n,g}^{(b_j)} \right\rangle$ entre les états des quasiparticules HF ou BdG $\left|\gamma_m^{(a_i)}\right\rangle$ et $\left|\gamma_{n,g}^{(b_j)}\right\rangle = \mathcal{T}_g \left|\gamma_n^{(b_j)}\right\rangle$, $\mathcal{T}_g$ étant la représentation de l'opération de symétrie dans l'espace à un corps étendu (cf. Eq. (44)). Via l'introduction d'un paramètre de Lagrange E_Γ pour garantir à l'ansatz SEMF $\left|\Psi_\Gamma\right\rangle$ d'être normé, le problème se ramène donc maintenant à la minimisation de la fonction auxiliaire $\mathcal{F}_\Gamma = \left\langle \hat{H} \right\rangle_{\Psi_\Gamma} - E_\Gamma \left\langle \Psi_\Gamma \middle| \Psi_\Gamma \right\rangle$ donnée par

$$\mathcal{F}_\Gamma = \sum_{a,b\in\{HF,BdG\}} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_g \lambda_{\Gamma,g}\, x^{(a_i)\,*} \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)} \left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right] - E_\Gamma \right) x^{(b_j)}. \tag{94}$$

Sa stationnarité par rapport aux amplitudes de superposition $x^{(a_i)\,*}$ conduit immédiatement à une équation aux valeurs propres généralisée, le multiplicateur E_Γ s'identifiant à l'énergie variationnelle :

$$\begin{gathered} \sum_{b\in\{HF,BdG\}} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)} \left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right] - E_\Gamma \right) x^{(b_j)} = 0 \\ \Updownarrow \\ \sum_{b\in\{HF,BdG\}} \sum_{j=1}^{N_b} \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \hat{H}\hat{P}_\Gamma \middle| \Phi^{(b_j)} \right\rangle x^{(b_j)} = E_\Gamma \sum_{b\in\{HF,BdG\}} \sum_{j=1}^{N_b} \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \hat{P}_\Gamma \middle| \Phi^{(b_j)} \right\rangle x^{(b_j)} \end{gathered} \tag{95}$$

La détermination du gradient de $\mathcal{F}_\Gamma$ par rapport aux amplitudes de la paramétrisation de Thouless $\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle = \mathcal{K}^{(a_i)} \exp\left(\frac{1}{2}\sum_{m,n=1}^{d} Z_{mn}^{(a_i)} \hat{\gamma}_m^{(a_0)\dagger} \hat{\gamma}_n^{(a_0)\dagger}\right)\left|\Phi^{(a_0)}\right\rangle$ des vides HF ou BdG à partir d'un état de référence $\left|\Phi^{(a_0)}\right\rangle$ est en revanche plus délicate. Considérons tout d'abord le recouvrement $\mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)}$ pour lequel on obtient directement

$$\frac{\partial \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)}}{\partial Z_{mn}^{(a_i)*}} = \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)}\left(\frac{\partial \ln \mathcal{K}^{(a_i)*}}{\partial Z_{mn}^{(a_i)*}} + \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}}\right), \tag{96}$$

où nous avons introduit la dyade normalisée $\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)} = \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)\,-1}\left|\Phi_g^{(b_j)}\right\rangle\left\langle\Phi^{(a_i)}\right|$. Par ailleurs, rappelons que la fonctionnelle d'énergie $\mathcal{E}$ donnée par le théorème de Wick est universelle au sens où elle est obtenue pour tout opérateur densité gaussien $\hat{\mathcal{D}}$, normé et éventuellement non hermitique : $Tr\left(\hat{H}\hat{\mathcal{D}}\right) = \mathcal{E}[\mathcal{R}]$ avec $\mathcal{R}$ la matrice des contractions élémentaires $\left\langle \hat{c}^\dagger_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}} = \left\langle \varpi',\vec{r}'\sigma'\middle|\mathcal{R}\middle|\varpi,\vec{r}\sigma\right\rangle$. L'approximation de champ moyen la plus générale pour un système de fermions en interaction repose alors sur une description effective à un corps en termes d'un Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}[\mathcal{R}]$ défini au travers des dérivées de $\mathcal{E}[\mathcal{R}]$ par rapport à ces contractions :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}[\mathcal{R}] &= \sum_{\substack{\varpi,\vec{r}\sigma \\ \varpi',\vec{r}'\sigma'}} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial\left\langle \hat{c}^\dagger_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}}\ \hat{c}^\dagger_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger & \hat{c}\end{pmatrix}\mathcal{H}[\mathcal{R}]\begin{pmatrix}\hat{c}\\ \hat{c}^\dagger\end{pmatrix},\ \mathcal{H}[\mathcal{R}] = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \tilde{\Delta} & -h^T\end{pmatrix},\end{aligned} \tag{97}$$

où tous les éléments de $\mathcal{R}$ sont ici traités comme des variables indépendantes. h est l'Hamiltonien de Hartree-Fock et $\Delta,\tilde{\Delta}$ sont les champs (antisymétriques) d'appariement. Pour le modèle de Hubbard, ils sont respectivement donnés par

$$h = -t\sum_{\langle \vec{r},\vec{r}'\rangle\sigma}\left|\vec{r}\sigma\right\rangle\left\langle\vec{r}'\sigma\right| + U\sum_{\vec{r}\sigma}\left(\left|\vec{r}\sigma\right\rangle\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\bar{\sigma}}\hat{c}_{\vec{r}\bar{\sigma}}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\left\langle\vec{r}\sigma\right| - \left|\vec{r}\bar{\sigma}\right\rangle\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\bar{\sigma}}\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\left\langle\vec{r}\sigma\right|\right), \tag{98}$$

$$\Delta = U\sum_{\vec{r}\sigma}\left|\vec{r}\bar{\sigma}\right\rangle\left\langle \hat{c}_{\vec{r}\bar{\sigma}}\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\left\langle\vec{r}\sigma\right|, \tag{99}$$

$$\tilde{\Delta} = U\sum_{\vec{r}\sigma}\left|\vec{r}\bar{\sigma}\right\rangle\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\bar{\sigma}}\right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}}\left\langle\vec{r}\sigma\right|. \tag{100}$$

Dans le cas qui nous intéresse ici, le champ moyen apparaît donc naturellement dans les taux de variation de l'énergie $\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]$ avec les amplitudes de Thouless en conséquence de la règle de dérivation en chaîne :

$$\frac{\partial \mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]}{\partial Z_{mn}^{(a_i)*}} = \frac{1}{2}Tr\left(\mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]\frac{\partial \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}}{\partial Z_{mn}^{(a_i)*}}\right) \tag{101}$$

La dernière étape repose ainsi sur la détermination du gradient de la matrice densité de transition par rapport aux paramètres de transformation de la fonction d'onde de référence :

$$\begin{aligned}\left\langle \varpi',\vec{r}'\sigma' \right| \frac{\partial \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}}{\partial Z_{mn}^{(a_i)\,*}} \left| \varpi,\vec{r}\sigma \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial Z_{mn}^{(a_i)\,*}} \frac{\left\langle \Phi^{(a_0)} \middle| \exp\left(\sum_{k<l=1}^{d} Z_{kl}^{(a_i)\,*} \hat{\gamma}_l^{(a_0)} \hat{\gamma}_k^{(a_0)} \right) \hat{c}_{\varpi\vec{r}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\varpi'\vec{r}'\sigma'} \middle| \Phi^{(b_j)} \right\rangle}{\left\langle \Phi^{(a_0)} \middle| \exp\left(\sum_{k<l=1}^{d} Z_{kl}^{(a_i)\,*} \hat{\gamma}_l^{(a_0)} \hat{\gamma}_k^{(a_0)} \right) \middle| \Phi^{(b_j)} \right\rangle} \\ &= \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} - \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} \left\langle \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} \\ &= \left\langle \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} - \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} \left\langle \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}}, \end{aligned} \tag{102}$$

où nous avons de nouveau fait appel au théorème de Wick. Finalement, les contractions faisant intervenir les quasiparticules de référence dans les relations Eqs. (96), (102) s'expriment aisément à l'aide de $\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}$ via le développement Eq. (12) de ces opérateurs en termes de $\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger}$ ou $\hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}$:

$$\begin{cases} \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} = \sum\limits_{\substack{\varpi,\vec{r}\sigma \\ \varpi',\vec{r}'\sigma'}} \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| \varpi,\vec{r}\sigma \right\rangle \left\langle \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} \left\langle \varpi',\vec{r}'\sigma' \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle = \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle \\ \left\langle \hat{\gamma}_m^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} = \sum\limits_{\varpi',\vec{r}\sigma'} \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| \varpi',\vec{r}'\sigma' \right\rangle \left\langle \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} = \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| 1 - \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \varpi,\vec{r}\sigma \right\rangle \\ \left\langle \hat{\gamma}_n^{(a_0)} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} = \sum\limits_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \left\langle \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}} \left\langle \varpi',\vec{r}'\sigma' \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle = \left\langle \varpi,\vec{r}\sigma \middle| \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle \end{cases} \tag{103}$$

En notant $\mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)}$ la matrice $\left(1-\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right)\mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}$, il en résulte

$$\frac{\partial \mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]}{\partial Z_{mn}^{(a_i)\,*}} = \frac{1}{2}\left(\left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| \mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle - \left\langle \overline{\gamma}_n^{(a_0)} \middle| \mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_m^{(a_0)} \right\rangle \right) \tag{104}$$

Cette expression peut toutefois se simplifier en se rappelant que les deux vecteurs de l'espace à un corps étendu associés à tout opérateur de quasiparticule sont reliés par la conjugaison complexe et l'échange de leurs composantes « hautes » et « basses », physiquement attachées aux canaux « particule » et « trou » respectivement. Un tel échange est réalisé par la matrice $\Xi = \begin{pmatrix} 0_{d\times d} & 1_{d\times d} \\ 1_{d\times d} & 0_{d\times d} \end{pmatrix}$ et il vient donc :

$$\left\langle \overline{\gamma}_n^{(a_0)} \middle| \mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_m^{(a_0)} \right\rangle = \left\langle \gamma_m^{(a_0)\,*} \middle| \mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)\,T} \middle| \overline{\gamma}_n^{(a_0)\,*} \right\rangle = \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| \Xi \mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)\,T} \Xi \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle \tag{105}$$

Mais compte-tenu de l'expression générale Eq. (83) de la matrice $1-\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}$ dans laquelle sont encodées les contractions $\left\langle \hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'} \hat{c}_{\varpi,\vec{r}\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{D}}_g^{(a_i,b_j)}}$, nous avons :

$$\begin{cases} \Xi \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)\,T} = \sum\limits_{m,n=1}^{d} \Xi \left| \gamma_n^{(a_i)\,*} \right\rangle \left(\mathbb{F}_g^{(a_i,b_j)\,-1} \right)_{mn} \left\langle \gamma_{m,g}^{(b_j)\,*} \right| = \sum\limits_{m,n=1}^{d} \left| \overline{\gamma}_n^{(a_i)} \right\rangle \left(\mathbb{F}_g^{(a_i,b_j)\,-1} \right)_{mn} \left\langle \overline{\gamma}_{m,g}^{(b_j)} \right| \Xi = \left(1-\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right)\Xi \\ \left(1-\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)\,T}\right)\Xi = \sum\limits_{m,n=1}^{d} \left| \overline{\gamma}_{m,g}^{(b_j)\,*} \right\rangle \left(\mathbb{F}_g^{(a_i,b_j)\,-1} \right)_{mn} \left\langle \overline{\gamma}_n^{(a_i)\,*} \right| \Xi = \Xi \sum\limits_{m,n=1}^{d} \left| \gamma_{m,g}^{(b_j)} \right\rangle \left(\mathbb{F}_g^{(a_i,b_j)\,-1} \right)_{mn} \left\langle \gamma_n^{(a_i)} \right| = \Xi \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} \end{cases} \tag{106}$$

Ces propriétés, combinées à l'identité $\Xi\mathcal{H}^T\Xi = -\mathcal{H}$ reflétant la structure de l'Hamiltonien de champ moyen Eq. (97), induisent la relation $\Xi\mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)\,T}\Xi = -\mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)}$ au travers de laquelle le gradient Eq. (101) de la fonctionnelle d'énergie $\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right]$ par rapport aux amplitudes $Z_{mn}^{(a_i)\,*}$ se réduit finalement au seul produit scalaire $\left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \middle| \mathcal{M}_g^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle$. Nous sommes ainsi en mesure de rassembler les développements qui viennent d'être menés pour accéder à la condition de stationnarité de l'énergie SEMF Eq. (94) au regard des transformations de Thouless utilisées pour générer les fonctions d'onde HF et BdG du sous-espace variationnel considéré :

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\Gamma}{\partial Z_{mn}^{(a_i)\,*}} = \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_0)} \right| \sum_{b\in\{HF,BdG\}} \sum_{j=1}^{N_b} x^{(a_i)\,*} \mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} x^{(b_j)} \left| \gamma_n^{(a_0)} \right\rangle = 0\,, \tag{107}$$

avec

$$\mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} = \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)} \left[\left(1 - \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right) \mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right] \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} + \left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right] - E_\Gamma\right) \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} \right]. \tag{108}$$

Notons que les dérivées logarithmiques des facteurs $\mathcal{K}^{(a_i)\,*} = \left\langle \Phi^{(a_i)} \middle| \Phi^{(a_0)} \right\rangle$, présentes dans le gradient Eq. (96) des recouvrements, n'interviennent pas en réalité dans le résultat final en conséquence de l'équation aux valeurs propres généralisées Eq. (95). Nous conclurons la présente section en précisant les relations auto-consistantes vérifiées par les vides HF et BdG indépendamment de la paramétrisation de Thouless. Dans ce but, remarquons que les conditions Eq. (107) sont valables pour des états de référence arbitraires $\left|\Phi^{(HF_0)}\right\rangle$ et $\left|\Phi^{(BdG_0)}\right\rangle$ non orthogonaux aux fonctions d'onde recherchées $\left|\Phi^{(HF_1)}\right\rangle$, $\left|\Phi^{(HF_2)}\right\rangle$,$\cdots$ et $\left|\Phi^{(BdG_1)}\right\rangle$, $\left|\Phi^{(BdG_2)}\right\rangle$,$\cdots$, respectivement. On peut donc aussi les appliquer en choisissant pour $\left|\Phi^{(a_0)}\right\rangle$ l'un quelconque $\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle$ des vecteurs d'une solution auxquelles elles conduisent. En se plaçant alors au point $Z_{mn}^{(a_i)} = 0$ dans l'espace des paramètres de Thouless pour cet état, nous avons donc

$$\left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_i)} \right| \sum_{b\in\{HF,BdG\}} \sum_{j=1}^{N_b} x^{(a_i)\,*} \mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} x^{(b_j)} \left| \gamma_n^{(a_i)} \right\rangle = 0 \tag{109}$$

Or, l'expression Eq. (93) de la matrice densité de transition montre que $\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} \left| \overline{\gamma}_n^{(a_i)} \right\rangle = 0$ et $\left\langle \gamma_m^{(a_i)} \middle| \mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)} = \left\langle \gamma_m^{(a_i)} \right|$. Par conséquent :

$$\left\langle \gamma_m^{(a_i)} \middle| \mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} \middle| \overline{\gamma}_n^{(a_i)} \right\rangle = \left\langle \overline{\gamma}_m^{(a_i)} \middle| \mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} \middle| \overline{\gamma}_n^{(a_i)} \right\rangle = 0\,, \tag{110}$$

$$\left\langle \gamma_m^{(a_i)} \middle| \mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} \middle| \gamma_n^{(a_i)} \right\rangle = \left\langle \gamma_m^{(a_i)} \middle| \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g^{(a_i,b_j)} \left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a_i,b_j)}\right] - E_\Gamma\right) \middle| \gamma_n^{(a_i)} \right\rangle \tag{111}$$

L'ensemble $\left\{ \left|\gamma_n^{(a_i)}\right\rangle, \left|\overline{\gamma}_n^{(a_i)}\right\rangle \right\}$ formant une base orthonormée de l'espace à un corps étendu, il en résulte

$$\sum_{b\in\{HF,BdG\}} \sum_{j=1}^{N_b} x^{(a_i)\,*} \mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)} x^{(b_j)} = 0, \tag{112}$$

où l'équation aux valeurs propres Eq. (95) a de nouveau été utilisée pour montrer que les éléments de matrice de l'opérateur Eq. (112) entre les vecteurs $\left\{\left|\gamma_n^{(a_i)}\right\rangle\right\}$ sont identiquement nuls.

III.d) Implémentation numérique

La paramétrisation de Thouless des déterminants de Slater et des vides de Bogoliubov offre l'opportunité de ramener l'optimisation du sous-espace $\left\{\hat{P}_\Gamma\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle\right\}$, dans lequel l'état fondamental est supposé se développer, à la minimisation de la fonction $\mathcal{F}_\Gamma$ Eq. (94) des amplitudes $Z_{mn}^{(a_i)}$ associées aux transformations des fonctions d'onde de référence. Notons que $\mathcal{F}_\Gamma$ dépend également des coefficients de superposition $x^{(a_i)}$ des différents états HF et BdG projetés, mais ces paramètres variationnels sont directement obtenus avec l'énergie E_Γ au travers de la résolution de l'équation aux valeurs propres généralisée Eq. (95). Dans la suite, nous désignerons par $\vec{Z}$ le vecteur contenant les parties réelles et imaginaires des amplitudes de Thouless $Z_{mn}^{(a_i)}$ et par $\vec{G}$ le gradient de $\mathcal{F}_\Gamma$ par rapport à ces quantités :

Les méthodes déterministes d'optimisation [Noc06] reposent alors sur la construction d'une suite $\left\{\vec{Z}^{(k)}\right\}$, avec la relation de récurrence

$$\vec{Z}^{(k+1)} = \vec{Z}^{(k)} + t_k \vec{d}^{(k)}, \tag{113}$$

où t_k est un réel strictement positif et $\vec{d}^{(k)}$ une direction de descente, c'est-à-dire une direction dans laquelle la fonction $\mathcal{F}_\Gamma$ diminue au moins localement : $\vec{G}^{(k)} \cdot \vec{d}^{(k)} < 0$ où $\vec{G}^{(k)}$ est le gradient de $\mathcal{F}_\Gamma$ en $\vec{Z}^{(k)}$. Dans la pratique, $\vec{d}^{(k)}$ est tout d'abord déterminé et le pas de descente t_k est issu d'une recherche linéaire au cours de laquelle la fonction $\mathcal{F}_\Gamma\left(\vec{Z}^{(k)} + t\vec{d}^{(k)}\right)$ est approximativement minimisée. La construction du vecteur $\vec{d}^{(k)}$ résulte en outre d'un modèle pour $\mathcal{F}_\Gamma$ dans le voisinage du point courant $\vec{Z}^{(k)}$. Par exemple, en se limitant à un développement de Taylor au 1er ordre, $\vec{d}^{(k)}$ se réduit à l'opposé du gradient et on parle de méthode de la plus grande pente. Un tel choix n'est toutefois optimal que pour un pas infinitésimal et la convergence s'avère en pratique excessivement lente avec une progression en « zig-zag » . L'algorithme du gradient conjugué [Noc06] corrige essentiellement cette pathologie en gardant la mémoire des itérations précédentes via

$$\begin{cases} \vec{d}^{(k)} = -\vec{G}^{(k)} + c^{(k)}\vec{d}^{(k-1)} \\ \vec{d}^{(0)} = -\vec{G}^{(0)} \end{cases}, \tag{114}$$

où de multiples choix ont été proposés pour le paramètre $c^{(k)}$. Traditionnellement, celui de Polak & Ribière, légèrement modifié par J. Nocedal, est préconisé en se montrant concrètement plus efficace. On a alors, en notant $\Delta\vec{G}^{(k)} = \vec{G}^{(k)} - \vec{G}^{(k-1)}$ la variation du gradient entre deux itérations successives,

$$c^{(k)} = \max\left(0, \frac{\vec{G}^{(k)} \cdot \Delta\vec{G}^{(k)}}{\vec{G}^{(k-1)} \cdot \vec{G}^{(k-1)}}\right). \tag{115}$$

Enfin, les méthodes de type Newton se fondent sur une approximation quadratique de la fonction $\mathcal{F}_\Gamma$ à minimiser autour des paramètres $\vec{Z}^{(k)}$. Idéalement, la direction de descente y est obtenue selon la relation $\vec{d}^{(k)} = -\left[\mathscr{H}^{(k)}\right]^{-1}\vec{G}^{(k)}$, où $\mathscr{H}^{(k)}$ est la matrice hessienne en $\vec{Z}^{(k)}$ dont les éléments se déduisent des dérivées secondes $\partial^2\mathcal{F}_\Gamma \big/ \partial Z_{lm}^{(a_i)*}\,\partial Z_{np}^{(b_j)*}$ et $\partial^2\mathcal{F}_\Gamma \big/ \partial Z_{lm}^{(a_i)*}\,\partial Z_{np}^{(b_j)}$. Le calcul de cette matrice, et son inversion, sont extrêmement coûteux numériquement, ce qui conduit à adopter plutôt des algorithmes « quasi-Newton » [Noc06] pour lesquels

$$\vec{d}^{(k)} = -\mathscr{B}^{(k)}\vec{G}^{(k)}. \tag{116}$$

Ici, la matrice $\mathscr{B}^{(k)}$ constitue une approximation à l'inverse de la hessienne qui est mise à jour à chaque itération. La formule de récurrence la plus employée dans ce contexte a été proposée par Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) et elle offre actuellement un des meilleurs compromis entre temps de calcul, précision et stabilité :

$$\mathscr{B}^{(k)} = \left(1 - \frac{\Delta\vec{G}^{(k)} \otimes \Delta\vec{Z}^{(k)}}{\Delta\vec{G}^{(k)} \cdot \Delta\vec{Z}^{(k)}}\right)^T \mathscr{B}^{(k-1)} \left(1 - \frac{\Delta\vec{G}^{(k)} \otimes \Delta\vec{Z}^{(k)}}{\Delta\vec{G}^{(k)} \cdot \Delta\vec{Z}^{(k)}}\right) + \frac{\Delta\vec{Z}^{(k)} \otimes \Delta\vec{Z}^{(k)}}{\Delta\vec{G}^{(k)} \cdot \Delta\vec{Z}^{(k)}}, \tag{117}$$

avec comme précédemment $\Delta\vec{G}^{(k)} = \vec{G}^{(k)} - \vec{G}^{(k-1)}$ et de même $\Delta\vec{Z}^{(k)} = \vec{Z}^{(k)} - \vec{Z}^{(k-1)}$.

Dans le cadre de l'approximation SEMF pour le modèle de Hubbard, nous avons généralement retenu la méthode du gradient conjugué dont l'implémentation se réduit à des calculs de produits scalaires entre vecteurs gradients. Lorsque le nombre de paramètres $Z_{mn}^{(a_i)}$ de transformation à déterminer n'est pas trop important, l'optimisation BFGS a cependant été préférée car sa convergence est en général plus rapide et les opérations matricielles à réaliser pour la mise à jour Eqs. (117), (118) ne sont alors pas rédhibitoires. Signalons enfin que l'évaluation numérique de la fonction $\mathcal{F}_\Gamma$, tout comme celle des matrices $\mathcal{L}_\Gamma^{(a_i,b_j)}$ Eq. (108) qui permettent d'accéder aux dérivées Eq. (107) par rapport aux amplitudes de Thouless, a été entièrement parallélisée. Concrètement, les simulations pour un cluster de 64 sites nécessitent environ 48 heures de temps CPU sur une station de travail à 56 cœurs alors qu'une semaine est requise dans le cas de 128 sites (ces durées incluent cependant le calcul des fonctions de corrélation d'intérêt).

III.e) Remarque : l'approximation SEMF à un seul vide HF ou BdG

Dans ce paragraphe, nous considérons donc une unique fonction d'onde factorisée $|\Phi\rangle$ et nous supprimerons en conséquence les labels supérieurs (a_i) ou (a_i,b_j) jusqu'à présent employés. La matrice densité à un corps généralisée $\mathcal{R}$, qui rassemble les contractions normales $\langle \hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{r}'\sigma'} \rangle_\Phi$ et anormales $\langle \hat{c}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}'\sigma'} \rangle_\Phi$, s'identifie donc simplement au projecteur sur les états $\{|\gamma_n\rangle\}$ des quasiparticules HF ou BdG dont $|\Phi\rangle$ est le vide : $\mathcal{R} = \sum_{n=1}^{d} |\gamma_n\rangle\langle\gamma_n|$. En l'absence de restauration des symétries, la relation générale Eq. (112) se réduit à $(1-\mathcal{R})\mathcal{H}[\mathcal{R}]\mathcal{R} = 0$ et $\mathcal{R}\mathcal{H}[\mathcal{R}](1-\mathcal{R}) = 0$ puisque $\mathcal{H}$ est alors hermitique. L'équation $[\mathcal{H}[\mathcal{R}],\mathcal{R}] = 0$ caractéristique des approximations de champ moyen est donc immédiatement retrouvée. Elle est traditionnellement obtenue en rendant stationnaire la fonctionnelle

d'énergie $\mathcal{E}[\mathcal{R}]=\langle\hat{H}\rangle_\Phi$ sous la contrainte $\mathcal{R}^2=\mathcal{R}$. En introduisant ainsi la fonction $\mathcal{F}=\mathcal{E}[\mathcal{R}]-Tr\left[\Lambda\left(\mathcal{R}^2-\mathcal{R}\right)\right]$ où Λ est une matrice hermitique de multiplicateurs de Lagrange, nous obtenons $2\mathcal{H}=\mathcal{R}\Lambda+\Lambda\mathcal{R}-\Lambda$ et donc $2\mathcal{H}\mathcal{R}=2\mathcal{R}\mathcal{H}=\mathcal{R}\Lambda\mathcal{R}$.

Avec la projection avant variation sur un secteur de symétrie Γ, l'ansatz variationel Eq. (47) se réduit à $|\Psi_\Gamma\rangle=x\hat{P}_\Gamma|\Phi\rangle$ où $x=\langle\Phi|\hat{P}_\Gamma|\Phi\rangle^{-1/2}$ assure la normalisation. Dans la mesure où le théorème de Wick garantit aux valeurs moyennes $\langle\Phi|\hat{H}\hat{P}_\Gamma|\Phi\rangle$ et $\langle\Phi|\hat{P}_\Gamma|\Phi\rangle$ de ne s'exprimer qu'à l'aide de $\mathcal{R}$, le raisonnement ci-dessus demeure valable. Par conséquent, la stationnarité de l'énergie projetée $E_\Gamma=\langle\hat{H}\rangle_{\Psi_\Gamma}$ s'exprime toujours selon une équation de type champ moyen, mais avec un Hamiltonien effectif $\mathcal{H}_\Gamma$ correspondant à son gradient par rapport aux contractions des opérateurs élémentaires de fermions :

$$[\mathcal{H}_\Gamma,\mathcal{R}]=0\,,\ \frac{1}{2}\langle\varpi,\vec{r}\sigma|\mathcal{H}_\Gamma|\varpi',\vec{r}'\sigma'\rangle=\frac{\partial E_\Gamma}{\partial\langle\hat{c}^\dagger_{\varpi,\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\varpi',\vec{r}'\sigma'}\rangle_\Phi} \tag{118}$$

Avec un seul état HF ou BdG, la méthode SEMF peut donc être mise en œuvre au travers des algorithmes traditionnellement employés pour les traitements usuels de champ moyen. Par exemple, on peut procéder par diagonalisation répétée de $\mathcal{H}_\Gamma$. Soulignons toutefois que E_Γ ne s'exprime pas en termes des valeurs propres de cette matrice, ce qui complique la procédure de construction de l'état factorisé choisi pour itérer la procédure [Jim12].

Pour déterminer l'expression de l'Hamiltonien $\mathcal{H}_\Gamma$, nous expliciterons tout d'abord l'énergie projetée selon les mêmes lignes que pour une combinaison linéaire d'états HF/BdG, c'est-à-dire en écrivant

$$E_\Gamma=\frac{\sum_g\lambda_{\Gamma,g}\mathcal{N}_g\mathcal{E}[\mathcal{R}_g]}{\sum_g\lambda_{\Gamma,g}\mathcal{N}_g} \tag{119}$$

Ici, $\mathcal{N}_g=\langle\Phi|\Phi_g\rangle$ est le recouvrement entre le vide $|\Phi\rangle$ et son transformé $|\Phi_g\rangle=\hat{T}_g|\Phi\rangle$ par une opération de symétrie $\hat{T}_g$ de matrice $\mathcal{T}_g$ dans l'espace à un corps étendu ; $\mathcal{R}_g$ correspond à la matrice densité de transition entre ces deux états. On vérifie sans difficulté, à l'aide de l'expression générale Eq. (93), qu'elle jouit des propriétés $\mathcal{R}_g\mathcal{T}_g\mathcal{R}=\mathcal{T}_g\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}_g\mathcal{R}=\mathcal{R}_g$. Nous en déduisons $\mathcal{T}_g\mathcal{R}=\mathcal{R}_g\left(\mathcal{T}_g\mathcal{R}-\mathcal{R}+1\right)$ et donc

$$\mathcal{R}_g=\mathcal{T}_g\mathcal{R}\mathcal{A}_g^{-1},\ \mathcal{A}_g=\left(\mathcal{T}_g-1\right)\mathcal{R}+1\,. \tag{120}$$

De même, $\mathcal{R}\mathcal{R}_g=\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}\mathcal{T}_g^\dagger\mathcal{R}_g=\mathcal{T}_g^\dagger\mathcal{R}_g$ en utilisant l'unitarité des transformations de symétrie. Il en résulte $\left(1+\mathcal{R}\mathcal{T}_g-\mathcal{R}\right)\mathcal{T}_g^\dagger\mathcal{R}_g=\mathcal{R}$, c'est-à-dire aussi

$$\mathcal{R}_g=\mathcal{T}_g\mathcal{B}_g^{-1}\mathcal{R},\ \mathcal{B}_g=1+\mathcal{R}\left(\mathcal{T}_g-1\right). \tag{121}$$

Afin de simplifier les notations dans les développements suivants, nous désignerons ici simplement par $|1\rangle,\cdots,|2d\rangle$ les différents états $|\varpi,\vec{r}\sigma\rangle$ qui génèrent l'espace à un corps étendu. Pour tout élément $\mathcal{R}_{ij}$ de la matrice densité réduite $\mathcal{R}$ du vide $|\Phi\rangle$ dans cette base, nous avons alors $\frac{\partial\mathcal{E}[\mathcal{R}_g]}{\partial\mathcal{R}_{ij}}=\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{2d}\mathcal{H}_{kl}\frac{\partial(\mathcal{R}_g)_{lk}}{\partial\mathcal{R}_{ij}}$ où le gradient de $\mathcal{R}_g$ résulte simplement de la

relation Eq. (120) ainsi que de la règle de différentiation $d\left(\mathcal{A}_g^{-1}\right)=-\mathcal{A}_g^{-1}d\mathcal{A}_g\mathcal{A}_g^{-1}$ de l'inverse d'une matrice:

$$\frac{\partial\left(\mathcal{R}_g\right)_{lk}}{\partial\mathcal{R}_{ij}}=\left[\mathcal{T}_g\left(1-\mathcal{R}\mathcal{A}_g^{-1}\left(\mathcal{T}_g-1\right)\right)\right]_{li}\left(\mathcal{A}_g^{-1}\right)_{jk} \tag{122}$$

Or, $1-\mathcal{R}\mathcal{A}_g^{-1}\left(\mathcal{T}_g-1\right)=1-\mathcal{B}_g^{-1}\mathcal{R}\left(\mathcal{T}_g-1\right)=1-\mathcal{B}_g^{-1}\left(\mathcal{B}_g-1\right)=\mathcal{B}_g^{-1}$ en combinant les propriétés précédentes et nous sommes donc conduits à

$$\frac{\partial\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g\right]}{\partial\mathcal{R}_{ij}}=\frac{1}{2}\left(\mathcal{A}_g^{-1}\mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g\right]\mathcal{T}_g\mathcal{B}_g^{-1}\right)_{ji} \tag{123}$$

Pour obtenir l'Hamiltonien $\mathcal{H}_\Gamma$ de champ moyen avec restauration des symétries avant variation, il ne reste finalement plus qu'à évaluer la dérivée du recouvrement $\mathcal{N}_g=\left\langle\Phi\middle|\Phi_g\right\rangle$ par rapport à un élément $\mathcal{R}_{ij}$. Nous montrerons dans un premier temps que $\mathcal{N}_g^2$ s'exprime simplement en termes de la matrice $\mathcal{A}_g$ introduite ci-dessus Eq. (120). En effet, toutes les transformations de symétrie considérées sont représentées dans l'espace à un corps par une matrice T_g unitaire qui est donc diagonalisable dans une base orthonormée avec des valeurs propres de module unité. Par conséquent, elle peut être mise sous une forme exponentielle, soit $T_g=\exp\left(iX_g\right)$ où X_g est hermitique. L'opérateur correspondant dans l'espace de Fock est évidemment donné par $\hat{T}_g=e^{i\hat{X}_g}$ avec $\hat{X}_g=\sum_{\vec{r}\sigma,\vec{r}'\sigma'}\left\langle\vec{r}\sigma\middle|X_g\middle|\vec{r}'\sigma'\right\rangle\hat{c}_{\vec{r}\sigma}^\dagger\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}$, indépendamment du caractère discret ou continu de la symétrie considérée. Dans ce dernier cas, soulignons que le théorème de Stone permet d'exprimer $\hat{X}_g$ au travers d'une combinaison linéaire des générateurs du groupe de symétrie avec les paramètres de transformation comme coefficients. Or pour tout réel λ, l'opérateur $e^{i\lambda\hat{X}_g}$ transforme le vide $\left|\Phi\right\rangle$ en un autre que nous noterons $\left|\Phi_g(\lambda)\right\rangle$. En introduisant la matrice densité à un corps de transition $\mathcal{R}_g(\lambda)$ entre ces deux états HF ou BdG, il vient immédiatement :

$$\frac{d}{d\lambda}\ln\left\langle\Phi\middle|\Phi_g(\lambda)\right\rangle=i\frac{\left\langle\Phi\middle|\hat{X}_g\middle|\Phi_g(\lambda)\right\rangle}{\left\langle\Phi\middle|\Phi_g(\lambda)\right\rangle}=\frac{i}{2}\left(Tr\left(X_g\right)+Tr\left[\mathcal{X}_g\mathcal{R}_g(\lambda)\right]\right), \tag{124}$$

où $\mathcal{X}_g=\begin{pmatrix}X_g & 0_{d\times d}\\ 0_{d\times d} & -X_g^*\end{pmatrix}$ si bien que $\hat{X}_g=\frac{1}{2}Tr\left(X_g\right)\hat{1}+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{2d}\left(\mathcal{X}_g\right)_{ij}\hat{c}_i^\dagger\hat{c}_j$. Notons que $\mathcal{X}_g$ génère aussi la matrice associée à la transformation $e^{i\lambda\hat{X}_g}$ dans l'espace à un corps étendu qui est explicitement donnée par $e^{i\lambda\mathcal{X}_g}$ (cf Eq. (44)). Les raisonnements ayant conduit à l'identité Eq. (119) demeurent de plus valables en remplaçant $\left|\Phi_g\right\rangle$ par l'état $\left|\Phi_g(\lambda)\right\rangle$ et donc $\mathcal{R}_g(\lambda)=e^{i\lambda\mathcal{X}_g}\mathcal{R}\left(\mathcal{A}_g(\lambda)\right)^{-1}$ avec $\mathcal{A}_g(\lambda)=\left(e^{i\lambda\mathcal{X}_g}-1\right)\mathcal{R}+1$. La relation précédente Eq. (124) prend ainsi la forme d'une équation différentielle

$$\frac{d}{d\lambda}\ln\left\langle\Phi\middle|\Phi_g(\lambda)\right\rangle^2=iTr\left(X_g\right)+Tr\left[\frac{d\mathcal{A}_g(\lambda)}{d\lambda}\left(\mathcal{A}_g(\lambda)\right)^{-1}\right]=iTr\left(X_g\right)+\frac{d}{d\lambda}\det\left(\mathcal{A}_g(\lambda)\right). \tag{125}$$

Son intégration entre $\lambda = 0$ et $\lambda = 1$ conduit à

$$\mathcal{N}_g^2 = e^{iTr(X_g)} \det\left(A_g\right). \tag{126}$$

Dès lors, on accède directement au gradient du recouvrement par rapport aux éléments $\mathcal{R}_{ij}$ de la matrice densité du vide :

$$\frac{1}{\mathcal{N}_g}\frac{\partial \mathcal{N}_g}{\partial \mathcal{R}_{ij}} = \frac{1}{2} Tr\left(\frac{\partial A_g}{\partial \mathcal{R}_{ij}} \mathcal{A}_g^{-1}\right) = \frac{1}{2}\left[\mathcal{A}_g^{-1}\left(\mathcal{T}_g - 1\right)\right]_{ji} \tag{127}$$

En regroupant ce résultat avec les dérivées Eq. (123) de la fonctionnelle d'énergie du théorème de Wick, nous sommes finalement en mesure d'établir l'expression de l'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}_\Gamma$ Eq. (117) régissant l'approche SEMF à un seul état HF ou BdG :

$$\mathcal{H}_\Gamma = \frac{\sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g \left[\mathcal{A}_g^{-1} \mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g\right] \mathcal{T}_g \mathcal{B}_g^{-1} + \mathcal{A}_g^{-1}\left(\mathcal{T}_g - 1\right)\left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g\right] - E_\Gamma\right)\right]}{\sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g}. \tag{128}$$

Précisons que cette expression a été initialement établie en physique nucléaire dans le cadre d'une approximation BdG avec restauration du nombre de particules [She00].

Nous vérifierons en conclusion la cohérence avec les résultats obtenus à la section III-c en montrant que, pour une unique fonction d'onde projetée avant variation, l'équation auto-consistante Eq. (112) issue de la paramétrisation de Thouless découle en réalité de la relation de type champ moyen $\left[\mathcal{H}_\Gamma, \mathcal{R}\right] = 0$. En effet, celle-ci équivaut à $\left(1 - \mathcal{R}\right)\mathcal{H}_\Gamma \mathcal{R} = 0$ et d'après la définition Eq. (120) de la matrice $\mathcal{A}_g$:

$$\left(1 - \mathcal{R}\right)\mathcal{A}_g^{-1} = \left(\mathcal{A}_g - \mathcal{T}_g \mathcal{R}\right)\mathcal{A}_g^{-1} = \left(\mathcal{A}_g - \mathcal{R}_g \mathcal{A}_g\right)\mathcal{A}_g^{-1} = 1 - \mathcal{R}_g \tag{129}$$

De plus, les propriétés $\mathcal{R}_g \mathcal{T}_g \mathcal{R} = \mathcal{T}_g \mathcal{R}$ et $\mathcal{R}_g \mathcal{R} = \mathcal{R}_g$ déjà utilisées auparavant impliquent $\left(1 - \mathcal{R}_g\right)\left(\mathcal{T}_g - 1\right)\mathcal{R} = \mathcal{R}_g - \mathcal{R}$ et on retrouve donc bien

$$\left(1 - \mathcal{R}\right)\mathcal{H}_\Gamma \mathcal{R} = x^2 \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g \left[\left(1 - \mathcal{R}_g\right)\mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g\right]\mathcal{R}_g + \mathcal{R}_g\left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g\right] - E_\Gamma\right)\right] = x^2 \mathcal{L}_\Gamma = 0\,, \tag{130}$$

où nous avons également utilisé l'expression Eq. (121) de $\mathcal{R}_g$ à l'aide de $\mathcal{B}_g$ ainsi que celle Eq. (119) de l'énergie projetée.

Références

[Aim07a] T. Aimi and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn*. **76**, 084709 (2007).

[Aim07b] T. Aimi and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn*. **76**, 113708 (2007).

[Ass98] F.F. Assaad, *High performance computing in science and engineering '98*, edited by E. Krause and W. Jäger, Springer-Verlag, New-York /Berlin (1998).

[Baj08] M. Bajdich, L. Mitas, L. K. Wagner and K. E. Schmidt, *Phys. Rev. B* **77**, 115112 (2008).

[Bal69] R. Balian and E. Brézin, *Il Nuovo Cimento B* **64**, 37 (1969).

[Ber12] G. F. Bertsch and L. M. Robledo, *Phys. Rev. Lett*. **108**, 042505 (2012).

[Bla85] J.-P. Blaizot and G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, The MIT Press, Cambridge, MA (1985).

[Blo62] C. Bloch and A. Messiah, *Nucl. Phys*. **39**, 95 (1962).

[Car11] J. Carlson, S. Gandolfi, K. E. Schmidt and S. Zhang, *Phys. Rev. A* **84**, 061602(R) (2011).

[Cau05] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves and A. P. Zuker, *Rev. Mod. Phys*. **77**, 427 (2005).

[Cay52] A. Cayley, *Cambridge and Dublin Math. Journal* **7**, 40 (1852); reprinted in *The Collected Mathematical Papers of Arthur Cayley,* **2**, 19, Cambridge University Press, Cambridge, (1889).

[Cha10] C. C. Chang and S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **104**,116402 (2010).

[Cor04] J. F. Corney and P. D. Drummond, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 260401(2004).

[Cor06] J. F. Corney and P. D. Drummond, *J. Phys. A* **39**, 269 (2006).

[Cor08] P. Corboz, M. Troyer, A. Kleine, I.P. McCulloch, U. Schollwöck and F.F. Assaad, *Phys. Rev. B* **77**, 085108 (2008).

[Dag92] E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, D. Poilblanc and J. Riera, *Phys. Rev. B* **45**, 10741 (1992).

[Fuk88] H. Fukutome, *Prog. Theor. Phys.* **80**, 417 (1988).

[Gau60] M. Gaudin, *Nucl. Phys.* **15**, 89 (1960).

[Gue99] M. Guerrero, G. Ortiz and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **59**, 1706 (1999).

[Ham64] M. Hamermesh, *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison Wesley (1964).

[Har82] K. Hara, A. Hayashi and P. Ring, *Nucl. Phys. A* **385**, 14 (1982).

[Hir83a] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **28**, 4059(R) (1983).

[Hir83b] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett*. **51**, 1900 (1983).

[Hir85] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).

[Hje02] T. Hjelt, K.W. Schmid and A. Faessler, *Nucl. Phys. A* **697**,164 (2002).

[Hon96] M. Honma, T. Mizusaki and T. Otsuka, *Phys. Rev. Lett.* **77,** 3315 (1996).

[Jim12] C. A. Jiménez-Hoyos, T. M. Henderson, T. Tsuchimochi and G. Scuseria, *J. Chem. Phys*. **136**, 164109 (2012).

[Jui07] O. Juillet*, New J. Phys*. **9**, 163 (2007).

[Jui13] O. Juillet and R. Frésard, *Phys. Rev. B* **87**, 115136 (2013).

[Kas01] T. Kashima and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn*. **70**, 2287 (2001).

[Koj09] M. Kojo and K. Hirose, *Phys. Rev. A* **80**, 042515 (2009).

[Lep14] A. Leprévost, O. Juillet and R. Frésard, *Ann. Phys. (Berlin)* **526**, 430 (2014).

[Lie68] E. H. Lieb, *J. Combinatorial Theory* **5**, 313 (1968).

[Lie89] E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett*. **62**, 1201 (1989).

[Löw55] P.-O. Löwdin, *Phys. Rev.* **97**, 1490 (1955).

[Mis14] T. Misawa and M. Imada, *Phys. Rev. B* **90**, 115137 (2014).

[Miz04] T. Mizusaki and M. Imada, *Phys. Rev. B* **69**, 125110 (2004).

[Miz06] T. Mizusaki and M. Imada, *Phys. Rev. B* **74**, 014421 (2006).

[Mor90] A. Moreo and E. Dagoto, *Phys. Rev. B* **41**, 9488 (1990).

[Nee82] K. Neergard and E. Wüst, *Nucl. Phys. A* **402**, 311 (1982).

[Noc06] J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical optimization*, Springer-Verlag, New-York/Berlin (2006).

[Oni66] N. Onishi and S. Yoshida, *Nucl. Phys*. **80**, 367 (1966).

[Ort07] G. Ortiz and J. Dukelsky, *Condensed Matter Theories* **21**, 133, edited by H. Akay, A. Osaka, H. Toki and F. Bary Malik, Nova Science Publishers (2007).

[Öst91] S. Östlund and G. Mele, *Phys*. *Rev*. *B* **44**, 12413 (1991).

[Par91] A. Parola, S. Sorella, M. Parrinello and E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **43**, 6190 (1991).

[Pen56] O. Penrose and L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956).

[Pil05] N. Pillet, N. Sandulescu, N. Van Giai and J.-F. Berger, *Phys. Rev. C* **71**, 044306 (2005).

[Rin80] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag, New-York/Berlin (2003).

[Rob09] L. M. Robledo, *Phys. Rev. C* **79**, 021302 (2009).

[Rod12] R. Rodríguez-Guzmán, K. W. Schmid, C. A. Jiménez-Hoyos and G. E. Scuseria, *Phys. Rev. B* **85**, 245130 (2012).

[Rod13] R. Rodríguez-Guzmán, C. A. Jiménez-Hoyos, R. Schutski and G. E. Scuseria, *Phys. Rev. B* **87**, 235129 (2013).

[Rod14] R. Rodríguez-Guzmán, C. A. Jiménez-Hoyos and G. E. Scuseria, *Phys. Rev. B* **90**, 195110 (2014).

[Sch04] K. W. Schmid, *Prog. Part. Nucl. Phys*. **52**, 565 (2004).

[She00] J. A. Sheikh and P. Ring, *Nucl. Phys. A* **665**, 71 (2000).

[She99] C. D. Sherrill and H. F. Schaefer, *Advances in Quantum Chemistry* **34**, 142, edited by P. O. Löwdin, Academic Press, New York (1999).

[Shi13] H. Shi and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **88**, 125132 (2013).

[Shi14] H. Shi, C. A. Jiménez-Hoyos, R. Rodríguez-Guzmán, G. E. Scuseria and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **89**, 125129 (2014).

[Sor11] S. Sorella, *Phys. Rev. B* **84**, 241110(R) (2011).

[Tho62] D. J. Thouless, *Nucl. Phys.* **21**, 225 (1960).

[Tom09] N. Tomita and S. Watanabe, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 116401 (2009).

[Tro05] M. Troyer and U. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 170201 (2005).

[Var88] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* , World Scientific, Singapor (1988).

[Vil66] F. Villars, *Varenna Lectures* **36**, 1, edited by C. Bloch, Academic Press, New-York (1966).

[Whi89] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar, *Phys. Rev. B* **40**, 506 (1989).

[Wic50] G. C. Wick, *Phys. Rev.* **80**, 268 (1950).

[Wim12] M. Wimmer, *ACM Trans. Math. Software* **38**, 30 (2012).

[Yan13] T. Yanagisawa, M. Miyazaki and K. Yamagi, *J. Mod. Phys.* **4**, 33 (2013).

[Yan62] C. N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).

[Yok13] H. Yokohama, M. Ogata, Y. Tanaka, K. Kobayashi and H. Tsuchiura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 014707 (2013).

[Zha90a] W. Zhang, D. H. Feng and R. Gilmore, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 867 (1990).

[Zha90b] S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 120 (1990).

[Zha95] S. Zhang, J. Carlson and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3652 (1995).

[Zha97a] S. Zhang, J. Carlson and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **55**, 7464 (1997).

[Zha97b] S. Zhang, J. Carlson and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4486 (1997).

[Zum62] B. Zumino, *J. Math. Phys.* **3**, 1055 (1962).

Chapitre 3

Application aux échelles de Hubbard à quatre montants dopées en trous

Cette dernière partie se propose d'appliquer l'approximation de champ moyen enchevêtré par les symétries au modèle de Hubbard répulsif sur de larges cellules rectangulaires. Nous nous focalisons plus précisément sur une géométrie d'échelle à quatre montants qui constitue un pas supplémentaire dans la progression vers un réseau carré depuis la chaîne exactement soluble et l'échelle à deux montants que le groupe de renormalisation de la matrice densité [Whi92, Whi93] a largement contribué à élucider [Noa95, Noa96, Noa97]. Avec des conditions aux bords périodiques selon les barreaux, la configuration s'apparente en outre à un tube de plaquettes à quatre sites qui présente aussi l'avantage d'une possible émulation quantique avec des fermions froids optiquement piégés, selon un protocole que nous explicitons. Les simulations à symétries restaurées sont essentiellement menées avec un ansatz formé par la superposition d'un état HF et d'une fonction d'onde BdG, simultanément optimisés et projetés avant variation sur les nombres quantiques attendus pour l'état fondamental. Du régime d'interaction intermédiaire $U/t = 4$ à celui de fort couplage $U/t = 12$ et pour des dopages δ inférieurs à $1/4$, les solutions SEMF ainsi obtenues sont caractérisées au travers des corrélations magnétiques, de densité et d'appariement dans le canal d'onde d qu'elles exhibent. Par exemple, des inhomogénéités sous forme de rubans de charge périodiquement disposés se manifestent par une modulation spatiale de la fonction de corrélation densité-densité, détectée par un pic dans l'espace réciproque. Le principe est similaire pour une onde de densité de spin, avec les corrélations spin-spin. Il convient toutefois de s'assurer au préalable de la colinéarité des spins par l'intermédiaire de l'absence de corrélations dans le secteur de chiralité vectorielle $\hat{\vec{V}}_{\vec{r}} = \hat{\vec{S}}_{\vec{r}} \wedge \left(\hat{\vec{S}}_{\vec{r}+\vec{u}_x} + \hat{\vec{S}}_{\vec{r}+\vec{u}_y} \right)$. Dans le cas contraire où ces vecteurs sont identiques d'un site à l'autre, une phase magnétique de type spirale sera identifiée. Enfin, le caractère supraconducteur/superfluide est signé par un ordre non-diagonal à grande distance dans la fonction de corrélation des paires de Cooper avec la symétrie d. La fiabilité du diagramme des phases proposé est aussi testée au regard d'un enrichissement de l'état d'essai via l'inclusion de plusieurs couples de fonctions d'onde HF/BdG pour tendre vers une reconstruction progressive de l'état fondamental exact. Enfin, dans le but de déceler d'éventuels effets de taille finie, le changement des conditions aux bords dans la direction des montants ainsi qu'une augmentation de leur longueur sont considérés.

Dans un premier temps, nous discutons aussi de la qualité du schéma d'approximation SEMF en comparant ses résultats, pour l'énergie et les fonctions de corrélation précédentes, à ceux des méthodes exactes ou des traitements variationnels basés sur des fonctions d'onde de Gutzwiller. Des clusters 4×4, 6×6 ou 8×8 dans différents régimes d'interaction, demi-remplis ou dopés en trous, sont examinés.

Ces différents points font l'objet de l'article reproduit par la suite et publié [Lep15] dans la revue « *New Journal of Physics* ».

Références

[Lep15] A. Leprévost, O. Juillet and R. Frésard, *New J. Phys.* **17**, 103023 (2015).

[Noa95] S. R. White, R. M. Noack and D. J. Scalapino, *Low Temp. Phys.* **99**, 593 (1995).

[Noa96] R. M. Noack, S. R. White, D. J. Scalapino, *Physica C* **270**, 281 (1996).

[Noa97] R. M. Noack, N. Bulut, D. J. Scalapino and M. G. Zacher, *Phys. Rev. B* **56**, 7162 (1997).

[Whi92] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).

[Whi93] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).

Intertwined orders from symmetry projected wavefunctions of repulsively interacting Fermi gases in optical lattices

A. Leprévost[1], O. Juillet[1] and R. Frésard[2]

[1] *Laboratoire LPC Caen, ENSICAEN, Université de Caen, CNRS/IN2P3, Caen, France.*

[2] *Laboratoire CRISMAT, UMR CNRS-ENSICAEN 6508, Caen, France.*

Unconventional strongly correlated phases of the repulsive Fermi-Hubbard model, which could be emulated by ultracold vapors loaded in optical lattices, are investigated by means of energy minimizations with quantum number projection before variation and without any assumed order parameter. In a tube-like geometry of optical plaquettes to realize the four-leg ladder Hubbard Hamiltonian, we highlight the intertwining of spin-, charge-, and pair-density waves embedded in a uniform *d*-wave superfluid background. As the lattice filling increases, this phase emerges from homogenous states exhibiting spiral magnetism and evolves towards a doped antiferromagnet. A concomitant enhancement of long-ranged *d*-wave pairing correlations is also found. Numerical tests of the approach for two-dimensional clusters are carried out, too.

1. Introduction

Low dimensional interacting quantum matter generally exhibits several phases at low energy that challenges the ability to distinguish between competing orders and their intertwining within one single correlated state [1]. Ultracold atoms provide an ideal playground to capture the essence of this problematic by their potential to properly emulate the fundamental mechanisms of quantum many-body physics [2]. In the fermionic sector, the BCS-to-BEC crossover [3,4] and the question of Stoner's itinerant ferromagnetism in repulsive gases [5,6] have been investigated. By trapping atomic vapors in optical lattices, a mimic of ideal crystalline matter can also be achieved [7]. By now, direct images of Fermi surfaces in the non-interacting limit [8] as well as *s*-wave superfluidity near unitary scattering [9] have been reported. Away from a Feshbach resonance, one is able to engineer almost perfectly the celebrated Hubbard model that has been first considered to describe the magnetism of metallic systems [10]. More generally, it aims to grasp the generic properties of spin-$1/2$ fermions moving on a lattice by hopping between neighboring sites $\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle$ and experiencing a local two-body interaction of strength U. In second-quantized form, the Hamiltonian is given by

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \vec{r},\vec{r}' \rangle \sigma} \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}'\sigma} + U \sum_{\vec{r}} \hat{n}_{\vec{r}\uparrow} \hat{n}_{\vec{r}\downarrow} , \tag{1}$$

with t the hopping integral; The fermionic creation, annihilation and density operators at site $\vec{r}$ with spin label $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$ are $\hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma}$, $\hat{c}_{\vec{r}\sigma}$ and $\hat{n}_{\vec{r}\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{\vec{r}\sigma} \hat{c}_{\vec{r}\sigma}$, respectively. In the attractive regime, spin-polarized systems could exhibit several exotic superfluid phases [11] while the BCS-to-BEC transition has been addressed in the spin-balanced model [12]. Otherwise, the on-site repulsion can stand for a perfectly screened Coulomb interaction and it received a considerable renewed interest in two-dimensional (2D) geometry after Anderson's proposal

[13] in connection to the spectacular properties of the high-T_c cuprates. However, there is still no consensus about the adequacy of the positive-U Hubbard model to capture the interplay between *d*-wave superconductivity, magnetism and inhomogeneous phases of copper oxides. This challenging issue is even more relevant since latest condensed-matter experiments seem to be consistent with an intriguing scenario where spin, density and long-ranged pair correlations develop cooperatively and are spatially modulated [14,15].

The exact answer to the question of whether the 2D repulsive Hubbard model supports such intertwining of multiple orders will probably be provided only through quantum emulators like ultracold atoms. Indeed, exact low energy properties of the Hamiltonian Eq. (1) are only accessible in one dimension [16] and for the infinitely connected Bethe lattice through the dynamical mean-field theory [17]. In other cases, computational methods to recover exact ground-states are generally marred by exponential complexity [18,19]. Nevertheless, diagrammatic quantum Monte-Carlo (QMC) simulations in continuous-time have recently allowed for a determination of the phase diagram at weak coupling for small to intermediate filling [20]. Even if ultracold fermions in optical lattices already enabled to monitor the Mott transition [21] and the development of antiferromagnetic correlations at half-filling [22], the knowledge of the phase diagram at low temperature and up to the strongly repulsive limit remains a long-term goal. In spirit of the compelling example provided by unitary Fermi gases [23], it is highly desirable to introduce theoretical approximate schemes that could guide experiments and benefit from the progressive results of this emulation. In order to embrace the full complexity of the repulsive Hubbard model, we set up in this paper a variational approach where the ground-state is progressively reconstructed from an expansion on symmetry adapted wavefunctions without any a priori input on the relevant correlations. The key features of the method are presented in Section 2. Its reliability against other numerical simulations is discussed in Section 3. Finally, we proceed in Section 4 to a systematic application in a four-leg ladder geometry motivated by recent experimental achievement of optical lattice plaquettes [24]. The obtained quantum phase diagram in the lattice filling-interaction strength plane highlights the intertwining of magnetic, density and pairing channels.

2. Methodology: The symmetry projected Hartree-Fock/Bogoliubov-de Gennes scheme

For weak coupling strength U/t, the determination of correlations that spontaneously emerge from the Hubbard Hamiltonian Eq. (1) can be achieved by identifying the channels in which instabilities develop through self-consistent perturbative or functional renormalization group methods [25,26]. In the strongly correlated regime, the problem could ideally be tackled with Gutzwiller-type wavefunctions $\left|\Psi_g\right\rangle = \hat{P}_G\left|\Phi\right\rangle$ where the operator $\hat{P}_G = \prod_{\vec{r}}\left(\hat{1} - g\hat{n}_{\vec{r}\uparrow}\hat{n}_{\vec{r}\downarrow}\right)$ partially suppresses the double occupancy entailed in a mean-field state $\left|\Phi\right\rangle$ through the real parameter g [27]. Yet, the energy minimization has to be performed in a variational Monte-Carlo framework, rendering unrestricted calculations beyond reach. Hence, the reference wavefunction must be parameterized with a limited number of relevant variables to describe specific phases, such as *d*-wave superfluids [28], spirals [29] or stripes [30]. A step towards unbiased Gutzwiller calculations has been recently achieved [31]. However, orders exhibiting a periodicity larger than a few lattice spacings were forbidden, in contradiction to approximate QMC results [32] revealing long wavelength modes in ground-states.

Alternatively, correlations beyond mean-field can be generated by restoring deliberately broken symmetries through quantum number projection. In fact, the Hamiltonian Eq. (1) is

invariant under local $U(1)$ gauge transformations, lattice translations, spin rotations and discrete symmetries of the lattice. Thus, exact eigenstates are characterized by the number of fermions N, the total pseudo-momentum $\vec{K}$, the total spin S and its *z*-component S_z, as well as an irreducible representation of the lattice symmetry group. All these labels will be collectively denoted by Γ in the following. Their restoration on top of a single Hartree-Fock (HF) wavefunction and before energy minimization recently yielded encouraging results for 2D clusters [33]. In particular, the exact ground-state of the four-site model has been analytically recovered irrespective of the interaction strength [34]. The approach, and its analog with several Slater determinants [35,36], also proved capable to evidence interplay between spin, charge and pair degrees of freedom. Potential superfluid features would nevertheless require a very large number of Hartree-Fock (HF) basis states to be accurately captured, whereas Bogoliubov-de Gennes (BdG) ansätze are well known to be more appropriate. Hence, we focus on a more entangled trial state $\left|\Psi_\Gamma\right\rangle$ obtained through the coherent superposition of symmetry projected HF and BdG wavefunctions:

$$\left|\Psi_\Gamma\right\rangle = \hat{P}_\Gamma\left(x^{(HF)}\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle + x^{(BdG)}\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle\right) \tag{2}$$

Here, $\left|\Phi^{(HF)}\right\rangle = \prod_{n=1}^{N}\hat{c}^\dagger_{\phi_n}\left|\ \right\rangle$ with $\hat{c}^\dagger_{\phi_n} = \sum_{\vec{r}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}\phi_{\vec{r}\sigma,n}$ denotes the most general Slater determinant, that mixes both spin components; $\left|\Phi^{(BdG)}\right\rangle \propto \prod_{n=1}^{2N_{\vec{r}}}\hat{\gamma}_n\left|\ \right\rangle$ with $\hat{\gamma}_n = \sum_{\vec{r}\sigma}\left(\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}V^*_{\vec{r}\sigma,n} + \hat{c}_{\vec{r}\sigma}U^*_{\vec{r}\sigma,n}\right)$ is the most general quasi-particle vacuum for a lattice with $N_{\vec{r}}$ sites. The Peierls-Yoccoz operator $\hat{P}_\Gamma$ [37] ensures the projection on quantum numbers Γ and, according to group theory, may be expressed as a specific linear combination of (unitary) symmetry transformations $\hat{T}_g$:

$$\hat{P}_\Gamma = \sum_g \lambda_{\Gamma,g}\hat{T}_g\ , \tag{3}$$

where the coefficients $\lambda_{\Gamma,g}$ are proportional to the characters of the irreducible representation associated to Γ. Noting that the transformed vectors $\left|\Phi^{(a)}_g\right\rangle = \hat{T}_g\left|\Phi^{(a)}\right\rangle$ (with the label a specifying the HF or BdG part) remain mean-field states, the variational ansatz Eq. (2) appears as a superposition of numerous symmetry-related wavefunctions. The projected energy $E_\Gamma = \left\langle\hat{H}\right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ can also be further calculated according to:

$$E_\Gamma = \frac{\sum_{a,b\in\{HF,BdG\}} x^{(a)*}x^{(b)}\sum_g \lambda_{\Gamma,g}\mathcal{N}^{(a,b)}_g\mathcal{E}\left[\mathcal{R}^{(a,b)}_g\right]}{\sum_{a,b\in\{HF,BdG\}} x^{(a)*}x^{(b)}\sum_g \lambda_{\Gamma,g}\mathcal{N}^{(a,b)}_g} \tag{4}$$

$\mathcal{E}$ stands for the energy functional obtained with Wick's theorem. However, the normal contractions $\left\langle\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}\right\rangle$, $\left\langle\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}'\sigma'}\right\rangle$ now correspond to matrix elements between the non-orthogonal wavefunctions $\left|\Phi^{(a)}\right\rangle$ and $\left|\Phi^{(b)}_g\right\rangle$, divided by their overlap $\mathcal{N}^{(a,b)}_g$ [38,39]. They define the one-body (transition) density matrix elements $\left[\rho^{(a,b)}_g\right]_{\vec{r}'\sigma',\vec{r}\sigma}$, $\left[\tilde{\rho}^{(a,b)}_g\right]_{\vec{r}'\sigma',\vec{r}\sigma}$. Similar features apply to the anomalous contributions $\left\langle\hat{c}_{\vec{r}\sigma}\hat{c}_{\vec{r}'\sigma'}\right\rangle$, $\left\langle\hat{c}^\dagger_{\vec{r}\sigma}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}'\sigma'}\right\rangle$ that identify to the pairing tensors elements $\left[\kappa^{(a,b)}_g\right]_{\vec{r}'\sigma',\vec{r}\sigma}$, $\left[\tilde{\kappa}^{(a,b)}_g\right]_{\vec{r}'\sigma',\vec{r}\sigma}$. Both types of contractions are gathered in the

extended matrix $\mathcal{R}_g^{(a,b)} = \begin{pmatrix} \rho_g^{(a,b)} & \kappa_g^{(a,b)} \\ \tilde{\kappa}_g^{(a,b)} & \tilde{\rho}_g^{(a,b)} \end{pmatrix}$ that can be easily expressed in terms of quasi-particle states, occupied and unoccupied HF wavefunctions [40]. Stationarity of E_Γ Eq. (4) with respect to the amplitudes $x^{(HF)}$ and $x^{(BdG)}$ immediately leads to a generalized eigenvalue equation:

$$\sum_{b\in\{HF,BdG\}} x^{(b)} \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g^{(a,b)} \left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a,b)} \right] - E_\Gamma \right) = 0 \tag{5}$$

On the contrary, the energy minimization with respect to the spin-orbitals $\phi_{\vec{r}\sigma,n}$ and Bogoliubov coefficients $U_{\vec{r}\sigma,n}$, $V_{\vec{r}\sigma,n}$ is much more involved and will be detailed in a forthcoming paper [40]. It leads to a set of self-consistent equations that reads:

$$\sum_{b\in\{HF,BdG\}} x^{(b)} \mathcal{L}_\Gamma^{(a,b)} = 0 \tag{6}$$

where the matrices $\mathcal{L}_\Gamma^{(a,b)}$ are obtained with the help of the HF/BdG mean-field Hamiltonian $\mathcal{H}_{ij}[\mathcal{R}] = \frac{1}{2}\frac{\partial \mathcal{E}[\mathcal{R}]}{\partial \mathcal{R}_{ji}}$ as:

$$\mathcal{L}_\Gamma^{(a,b)} = \sum_g \lambda_{\Gamma,g} \mathcal{N}_g^{(a,b)} \left[\left(1 - \mathcal{R}_g^{(a,b)}\right) \mathcal{H}\left[\mathcal{R}_g^{(a,b)} \right] \mathcal{R}_g^{(a,b)} + \mathcal{R}_g^{(a,b)} \left(\mathcal{E}\left[\mathcal{R}_g^{(a,b)} \right] - E_\Gamma \right) \right] \tag{7}$$

The system of Eqs. (5)-(7) allows to determine the optimal symmetry projected HF/BdG wavefunction through a numerical solution in which the HF and BdG states are parameterized according to the Thouless theorem [38]. No initial assumption on the ground-state is required and the method is thus able to reveal the physics embedded in the Hubbard model Eq. (1) at low energy.

3. Reliability of the HF/BdG approach

We now address the accuracy of the wavefunction Eq. (2) against exact diagonalization (ED) for small clusters or QMC simulations. We focus on autocorrelation functions $\mathcal{M}(\vec{r})$, $\mathcal{C}(\vec{r})$ and $\mathcal{D}(\vec{r})$ in the magnetic, charge and *d*-wave pairing channels, respectively:

$$\mathcal{M}(\vec{r}) = \left\langle \hat{\vec{S}}_{\vec{0}} \cdot \hat{\vec{S}}_{\vec{r}} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}, \ \mathcal{C}(\vec{r}) = \left\langle \delta\hat{n}_{\vec{0}} \delta\hat{n}_{\vec{r}} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}, \ \mathcal{D}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\left\langle \hat{D}_{\vec{0}}^\dagger \hat{D}_{\vec{r}} + \hat{D}_{\vec{0}} \hat{D}_{\vec{r}}^\dagger \right\rangle_{\Psi_\Gamma}. \tag{8}$$

Here, $\hat{\vec{S}}_{\vec{r}} = \frac{1}{2}\sum_{\sigma,\sigma'} \hat{c}_{\vec{r}\sigma}^{+} \vec{\tau}_{\sigma,\sigma'} \hat{c}_{\vec{r}\sigma'}$ is the spin operator at lattice node $\vec{r}$ (with $\vec{\tau}$ the usual Pauli matrices); $\delta\hat{n}_{\vec{r}} = \sum_\sigma \left(\hat{n}_{\vec{r}\sigma} - \left\langle \hat{n}_{\vec{r}\sigma} \right\rangle_{\Psi_\Gamma} \right)$ corresponds to the local density fluctuation; $\hat{D}_{\vec{r}}^\dagger = \sum_{\vec{l}} f(\vec{l}) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{c}_{\vec{r}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{r}+\vec{l}\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{\vec{r}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{r}+\vec{l}\uparrow}^\dagger \right)$ denotes the singlet pair-field in the $d_{x^2-y^2}$ channel where the form factor $f(\vec{l})$ is zero except for neighboring sites in the *x*- and *y*-direction: $f(\pm\vec{u}_x) = 1$ and $f(\pm\vec{u}_y) = -1$.

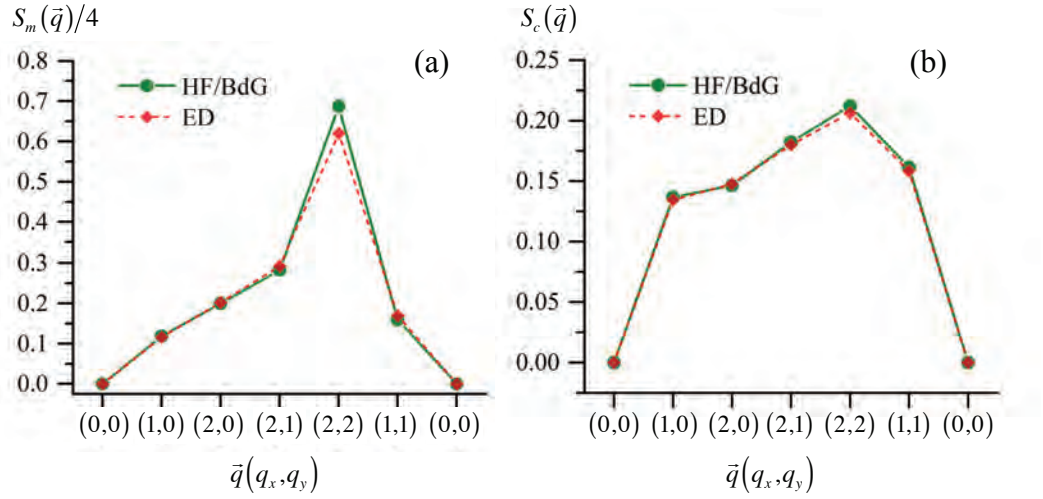


Figure 1. Momentum dependence of (a) magnetic $S_m(\vec{q})$ and (b) charge $S_c(\vec{q})$ structure factors for a 4×4 cluster with $N=14$ atoms and periodic-periodic boundary conditions in the strongly correlated regime $U/t=12$. Wavevectors $\vec{q}$ are expressed in units of $\pi/2$. A symmetry projected HF/BdG pair of states displays excellent agreement with exact diagonalization.

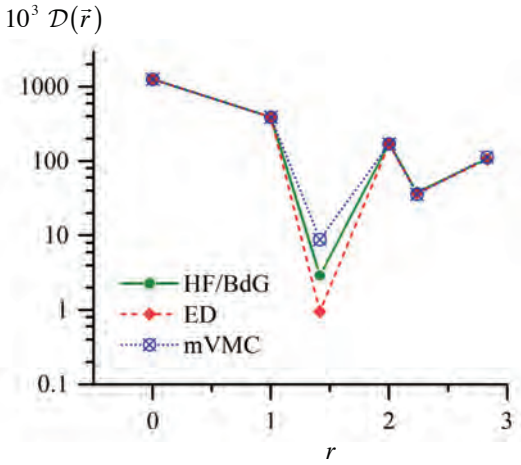


Figure 2. *d*-wave pair correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ against separation distance r for a 4×4 lattice with $N=10$ atoms at strong on-site interaction $U/t=10$. Periodic-periodic boundary conditions are imposed. ED results as well as a recent VMC calculation with a symmetry restored BCS-Gutzwiller wavefunction (mVMC) are extracted from Fig. 8b of Ref. [31]. The HF/BdG ansatz, with quantum number projection before variation, correctly reproduces the shape and magnitude of the exact pairing correlations.

For a 4×4 cluster in the strong coupling regime $U/t=10,12$, the HF/BdG approximation reproduces very accurately the ED data, as shown in Figs. 1-2. The determination of exact ground-states for larger cells is still limited by the NP-hardness of QMC simulations, except for limited parameter spaces where the stochastic sampling is protected from the notorious sign problem. This is the case at half-filling and we present in Fig. 3 a comparison between QMC and HF/BdG spin-spin correlations for a 6×6 cluster at $U/t=4$. No significant difference is found, especially for the largest separation distances that are essential to indicate the development of a magnetic order. In the hole doped regime with

repulsive interactions, a sign-free stochastic sampling of the ground-state is certainly possible [41,42], but it remains generally plagued by systematic errors which origin is not totally elucidated [43]. Nevertheless, it seems that these new QMC algorithms can be accurate for closed-shell fillings and moderate interaction strengths when supplemented by quantum number projection [44,45]. Superfluid correlations in the *d*-wave channel have been investigated in such a framework [45] and we show in Fig. 4 a representative result from Ref. [31] in the intermediate coupling regime $U/t = 4$ on a 8×8 cell. The symmetry-adapted HF/BdG wavefunction essentially yields the same pairing response $\mathcal{D}(\vec{r})$, as shown in Fig. 4.

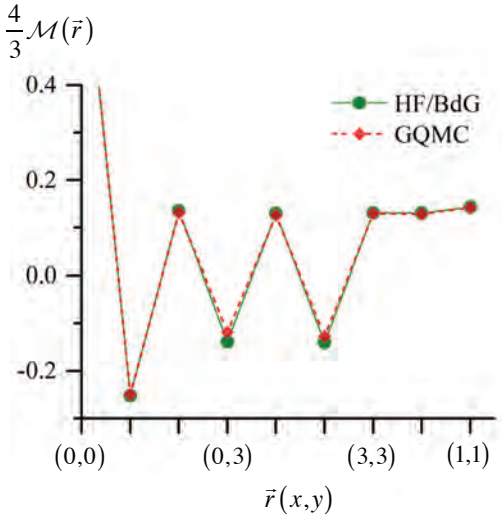


Figure 3. Spin-spin correlations $\mathcal{M}(\vec{r})$ at half-filling for a periodic-periodic 6×6 cluster at $U/t = 4$ as obtained from the symmetry restored HF/BdG approach and compared with QMC calculations incorporating quantum number projection (GQMC, extracted from Fig. 2 of Ref. [43]).

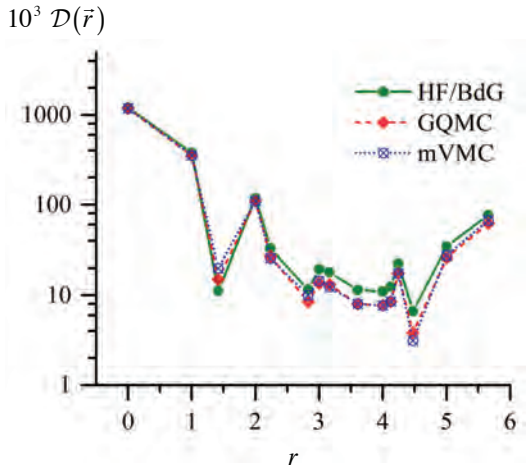


Figure 4. Distance dependence of the *d*-wave pair correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ for a 8×8 cell with $N = 50$ atoms and periodic-periodic boundary conditions at moderate coupling strength $U/t = 4$. Sign-free QMC calculations (GQMC) and VMC results with the BCS-Gutzwiller wavefunction (mVMC), both including symmetry restoration, are extracted from Fig. 10 of Ref. [31]. They are compared to the pairing correlations $\mathcal{D}(\vec{r})$ originating from the symmetry adapted HF/BdG scheme.

Table 1. Variational energies E_Γ from the symmetry projected HF/BdG wavefunction compared to reference energies $E_{ref.}$ obtained either with exact diagonalization (ED), quantum Monte-Carlo (QMC) or variational Monte-Carlo (VMC) results. Periodic-periodic (PP) or periodic-antiperiodic (PA) boundary conditions are specified. The symbol (*) indicates a simulation of the frustrated Hubbard model with an hopping amplitude $t' = -0.3t$ between next-nearest neighbors. Exact diagonalization has been performed with ALPS [46]. QMC data are borrowed from Ref. [31,43]. The VMC calculations correspond to the original (o) [28] or improved (i) [31,49] BCS-Gutzwiller wavefunction.

Lattice	U/t	Boundary	N	E_Γ/t	$E_{ref.}/t$
4×4	4	PP	16	-13.618	-13.622 (ED)
4×4 (*)	8	PP	14	-12.439	-12.503 (ED)
4×4	10	PP	10	-16.876	-16.902 (ED)
4×4	12	PP	14	-9.957	-10.05 (ED)
6×6	4	PP	36	-30.724	$-30.87(2)$ (QMC)
8×8	4	PP	50	-70.13	$-71.417(4)$ (VMC, i) $-72.51(5)$ (QMC)
8×8	10	PA	60	-32.164	-31.2 (VMC, o)
8×8	8	PA	62	-34.736	-36.04 (VMC, i)

Besides, the variational energies E_Γ originating from Eqs. (5)-(7) are summarized in Table 1 for the clusters and on-site interactions previously considered. The agreement is excellent for 4×4 cells with a relative error smaller than 0.5%. The quality of the approximation is quite similar for their doped counterparts, even when a negative next-nearest neighbor hopping t' is introduced to induce frustration. As the size increases, the HF/BdG energy becomes generally less accurate and the deterioration is more pronounced if the cell is doped and/or the coupling U/t is strong. Indeed, while the discrepancy for the half-filled 6×6 cluster at $U/t=4$ does not exceed 0.5%, we only recover an energy E_Γ very close to the one obtained with the Gutzwiller projection on top of an optimized BCS wavefunction [28] for 64-sites cells and up to $U/t=12$.

For the largest clusters, the above contradictory findings, regarding the accuracy of HF/BdG correlation functions and energies, could be reconciled provided that improving the ansatz Eq. (2) only has a noticeable effect on the energy. This scenario has been validated by enlarging the variational subspace through the inclusion of several HF/BdG pairs of states via a modification of the wavefunction Eq. (2) according to:

$$\left|\Psi_\Gamma\right\rangle = \hat{P}_\Gamma\left(\sum_{i=1}^{N_{HF/BdG}}\sum_{a\in\{HF,BdG\}} x^{(a_i)}\left|\Phi^{(a_i)}\right\rangle\right) \tag{9}$$

where $\left|\Phi^{(HF_i)}\right\rangle$, $\left|\Phi^{(BdG_i)}\right\rangle$ denote the *i-th* HF, BdG wavefunction in the basis, respectively. The full energy minimization would then require the simultaneous variation of all HF and BdG states. This scheme is beyond our computational facilities and we therefore limit ourselves to

a sequential process. In this case, HF/BdG pairs are progressively introduced and each of them is optimized while keeping unchanged the previous basis states. The amplitudes $x^{(a_i)}$ are obtained through a generalized eigenvalue problem similar to Eq. (5) and the set of self-consistent equations determining the structure of the current HF/BdG pair now reads:

$$\sum_{j=1}^{i} \sum_{b\in\{HF,BdG\}} x^{(b_j)} \mathcal{L}_{\Gamma}^{(a_i b_j)} = 0 \tag{10}$$

As expected, such superpositions of several HF/BdG wavefunctions notably improve the energy. In the case of a doped 6×6 cluster with $N=24$ atoms and a coupling strength $U/t=8$, the symmetry adapted HF/BdG approximation with one pair of states leads to a variational energy $E_{\Gamma}=-34.93\,t$. The use of fifty HF/BdG pairs allows to reach an energy of $-36.9\,t$ which is comparable to approximate QMC estimates depending on the constraining state chosen to avoid the sign problem [47]. As shown in Fig. 5, such an improvement of the trial wavefunction Eq. (2) induces minimal changes in the spin, charge and *d*-wave pair correlation functions. A similar behavior is also reported in the next section for larger cells at various fillings.

Manifestly, the ansatz Eq. (9) is not the only way to progressively reconstruct the exact ground-state in a subspace spanned by symmetry projected wavefunctions. As of now, such variational strategies were only developed with HF states, which were either stochastically sampled [48] or optimized [35,36]. The inclusion of BdG wavefunctions in the basis through Eq. (9) yields a notable acceleration of the convergence towards the ground-state. For instance, for $N=56$ interacting atoms on a 16×4 cell at $U/t=12$, E_{Γ} is decreased to $-36.018\,t$ with ten HF/BdG pairs while a subspace twice as large is required to reach a similar energy without BdG states [36]. Efficient energy lowering may also be achieved by tuning the numbers of BdG and HF wavefunctions in the basis and the order in which they are introduced as long as the optimization is reduced to a sequential process. As an example, we consider the case of $N=62$ atoms loaded in a 8×8 cell for $U/t=8$ through the ansatz

$$\left|\Psi_{\Gamma}\right\rangle = \hat{P}_{\Gamma}\left(\sum_{i=1}^{N_{BdG}} x^{(BdG_i)}\left|\Phi^{(BdG_i)}\right\rangle + \sum_{i=1}^{N_{HF}} x^{(HF_i)}\left|\Phi^{(HF_i)}\right\rangle\right). \tag{11}$$

While the simple HF/BdG state Eq. (2) gives an energy $E_{\Gamma}=-34.736\,t$ not competitive with extended BCS-Gutzwiller schemes [49], the expansion Eq. (11) allows to reach a similar accuracy with $E_{\Gamma}=-35.961\,t$ (for $N_{BdG}=15$ and $N_{HF}=35$). Fig. 6 reconfirms that the physical content embedded in $\mathcal{M}(\vec{r})$, $\mathcal{C}(\vec{r})$ and $\mathcal{D}(\vec{r})$ is unaffected against the enlargement of the HF/BdG subspace. However, noticeable changes in the values of the order parameters extracted from the long-ranged parts of the considered correlation functions are obtained.

Finally, the present calculations tend to support the HF/BdG approximation with full symmetry restoration before variation as a reliable starting point to capture the essence of correlations entailed in the repulsive Hubbard model, at least in the magnetic, density, and superfluid channels and for moderate size clusters.

4. Results: Quantum phase diagram of ultracold fermions loaded in optical four-leg tubes.

Though the symmetry projected HF/BdG wavefunction Eq. (2) displays a polynomial complexity with the number $N_{\vec{r}}$ of lattice sites, the numerical optimization remains challenging by requiring the simultaneous determination of around $3N_{\vec{r}}^2$ parameters.

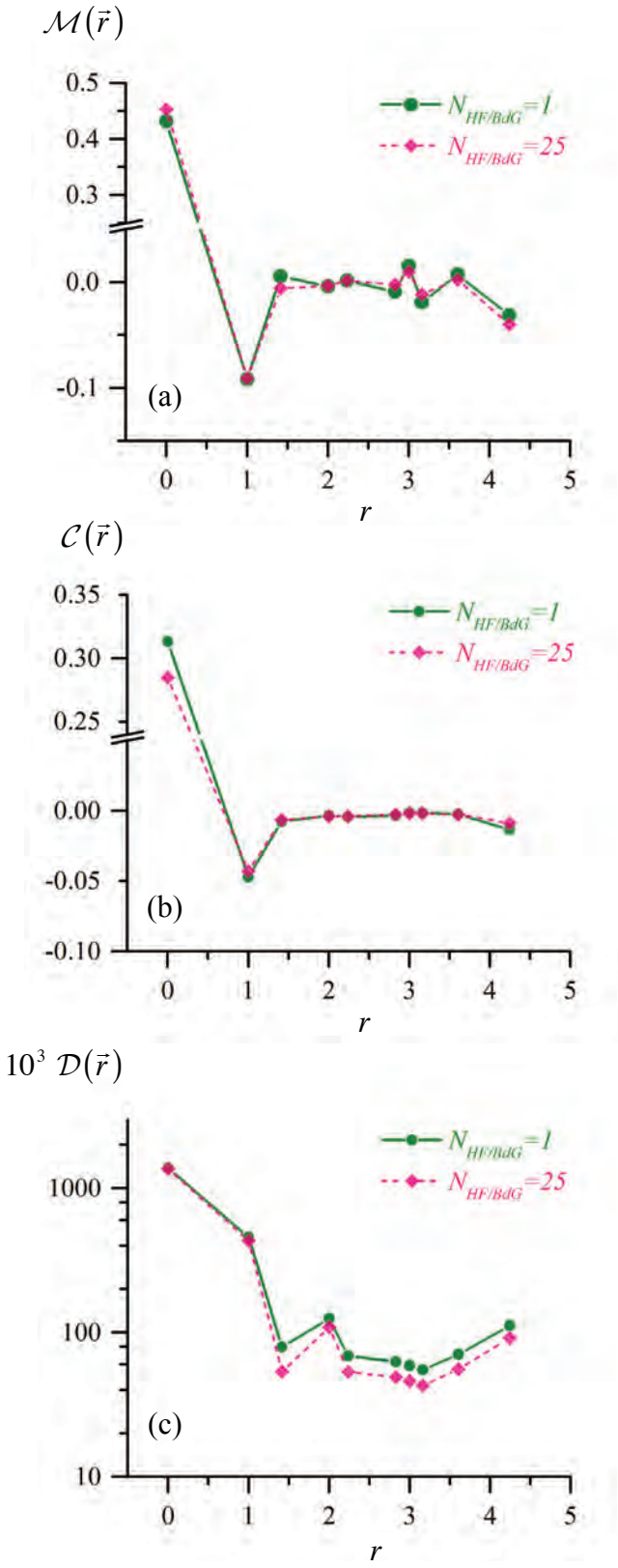


Figure 5. Evolution of (a) spin, (b) density and (c) *d*-wave pairing autocorrelation functions with the number $N_{HF/BdG}$ of symmetry projected HF/BdG wavefunctions spanning the variational subspace. Calculations are performed for $N = 24$ atoms on a 6×6 cluster with an interaction strength $U/t = 8$.

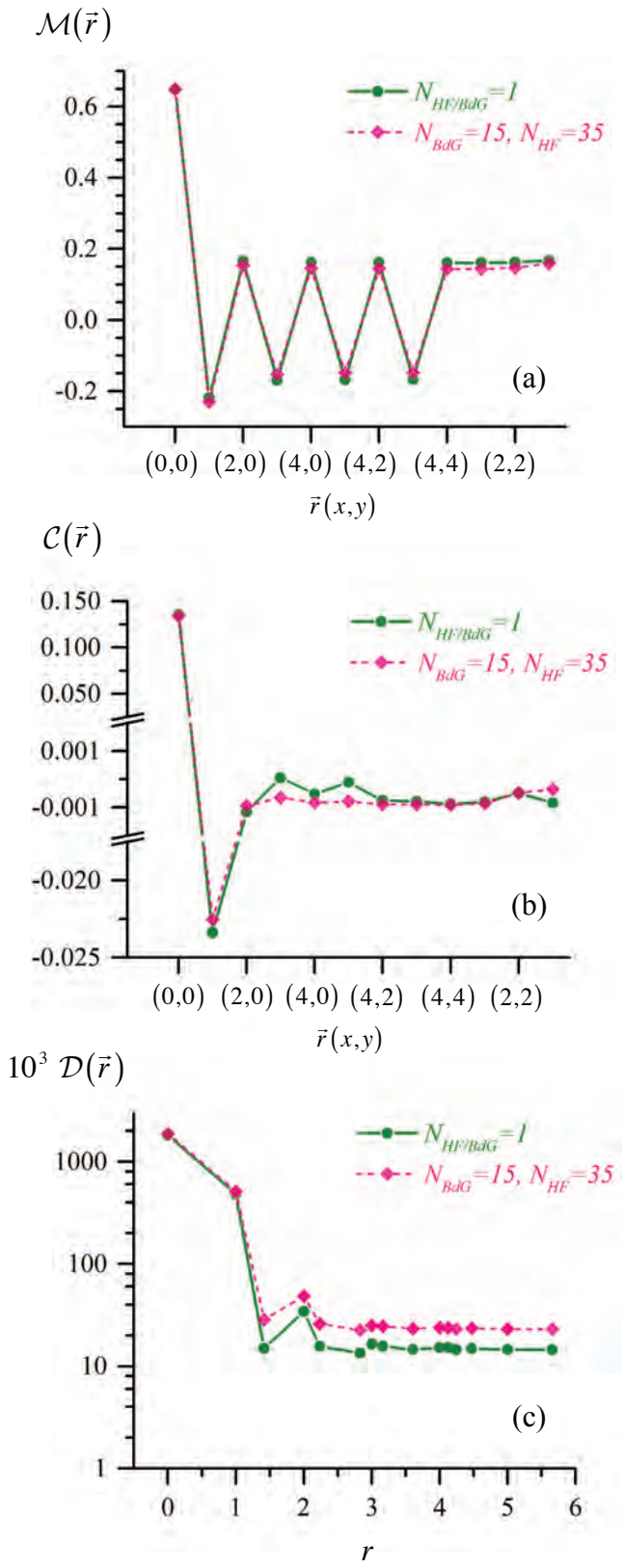


Figure 6. Spatial dependence of (a) spin-spin, (b) density-density and (c) *d*-wave pair-pair correlations obtained from the two different symmetry projected wavefunctions Eq. (2) and Eq. (11). $N = 62$ interacting atoms in the regime $U/t = 8$, and loaded on a 8×8 cell are considered.

Unfortunately, very large square cells are needed to support both the emergence of an off-diagonal long-ranged order linked with superfluidity and the development of long wavelength collective modes expected in the density and magnetic channels [32]. Therefore, we now restrict ourselves to four-leg ladders that are natural steps in the dimensional crossover from the exactly solvable chain to the unknown 2D limit. This geometry can be in fact indirectly emulated with ultracold vapors by loading the atoms in optical tubes of plaquettes created from four wells arranged in a square pattern, as depicted in Fig. 7. A three-dimensional array of such independent clusters has already been realized using an optical superlattice configuration along two orthogonal directions [24]. By tuning the laser potentials parameters to allow for the tunneling between adjacent planes, a collection of uncoupled identical tubes could be obtained. When unfolded, each of them realizes the Hubbard Hamiltonian on a rectangular cell with four legs and periodic boundary conditions along the *y*-direction.

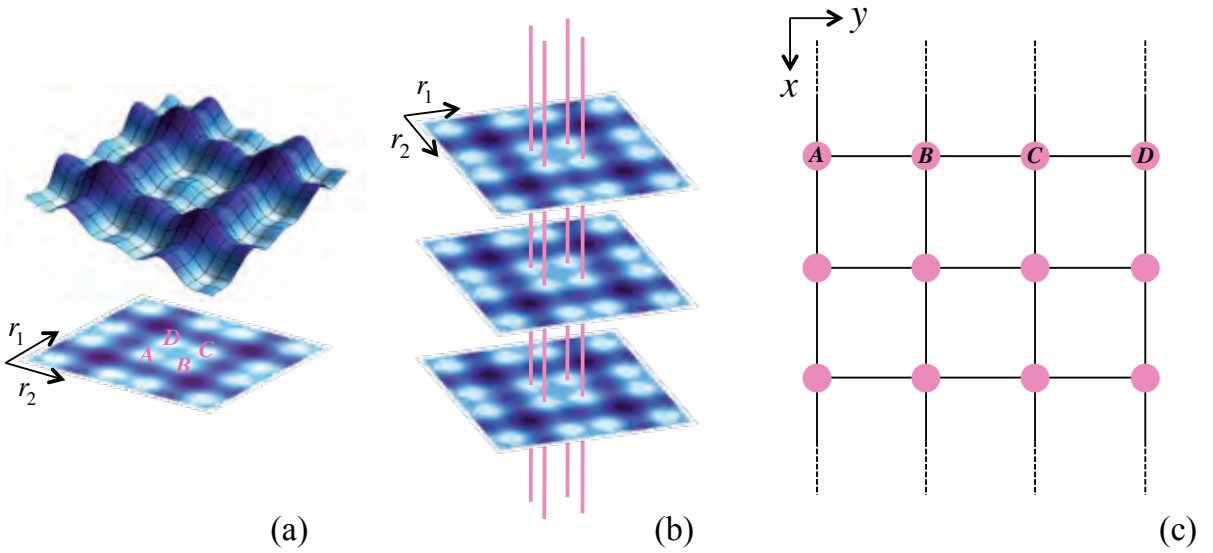


Figure 7. Representation of an optical superlattice configuration emulating the four-leg tube Hubbard model. (a) Scheme of the potential $V(r_1,r_2)=-\sum_{i=1}^{2}\left(V_l\sin^2(kr_i)+V_s\sin^2(2kr_i)\right)$ generated in a horizontal r_1-r_2 plane by two mutually orthogonal pairs of standing-wave laser fields, each with a wavelength ratio of 2. With this setup, a four-site unit cell *ABCD* is created. (b) By superimposing another optical lattice along the vertical direction, independent tubes of plaquettes may be obtained. (c) When using periodic boundary conditions along the *y*-direction in a $x-y$ lattice, the $L\times 4$ rectangular cluster is isomorphic to each optical four-leg ladder displayed in (b).

The variational state Eq. (2), free of symmetry breaking, is now systematically determined to unravel the relevant orders and their potential intertwining in the low-lying energy states. We focus on tubes of length $L\geq 16$ loaded with slightly less than one atom per site, so that they are characterized by their hole doping $\delta=1-n$ with n the lattice filling factor. Coupling strengths ranging from the moderate $U/t=4$ to the strongly $U/t=12$ interacting regime are considered. We stress that all energy minimizations have been independently carried out, thereby allowing for crosschecking the results. Moreover, full periodic boundary conditions on finite-size clusters could bias pairing correlations by disadvantaging the $d_{x^2-y^2}$ channel: The corresponding wavefunction in momentum space would indeed be zero for a non-negligible fraction of wavevectors in the first Brillouin zone. Therefore, antiperiodic

boundary conditions along the legs (*x*-direction) are chosen. Their influence is discussed in the Appendix, where it is more generally shown that a tube length $L=16$ is large enough to ensure a weak sensitivity of the physical content to boundary conditions.

We first address a system of $L=16$ four-sites plaquettes with an on-site interaction $U=12t$ and investigate the hole doping dependence of relevant correlation functions. Each optimization involves the determination of around 10^4 complex parameters that enter the variational wavefunction Eq. (2), consisting of the coherent superposition of more than $7\ 10^4$ symmetry related mean-field states. The resulting magnetic $S_m(\vec{q})$ and density $S_c(\vec{q})$ structure factors are shown in Fig. 8. They are defined according to:

$$S_m(\vec{q})=\frac{4}{3}\sum_{\vec{r}}\exp(i\vec{q}\cdot\vec{r})\,\mathcal{M}(\vec{r}),\ S_c(\vec{q})=\sum_{\vec{r}}\exp(i\vec{q}\cdot\vec{r})\,\mathcal{C}(\vec{r}). \qquad (12)$$

Pairing correlation functions $\mathcal{D}(\vec{r})$ in the *d*-wave channel are displayed in Fig. 9 [50].

Starting with $\delta\approx 16\%$ $(N=54)$, a coexistence of spin and charge density waves is clearly evidenced by a peak in S_m and S_c on top of a broad background. The dominant wavevector $\vec{q}_m=(3\pi/4,\pi)$ in the spin-spin correlations corresponds to an antiferromagnet with a staggered magnetization oscillating in amplitude with a period of $\lambda_m=8$ lattice spacings in the *x*-direction. Similarly, the density-density correlation function reveals inhomogeneities distributed with a period $\lambda_c=4$ along the *x*-axis in the variational ground-state. Note that these orders and their symmetry-related counterparts are necessarily superimposed to respect all invariances of the Hamiltonian. Furthermore, with λ_c even, the relation $\lambda_m=2\lambda_c$ characterizes stripes at the boundaries of antiferromagnetic domains separated by a π phase shift. Their intertwining with *d*-wave superfluidity is eventually proved by highlighting in Fig. 9b a non-zero average of the pairing correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ at large separation distance r. The non-decaying tail observed for $r>4$ is consistent with off-diagonal long-ranged order that signs superfluidity. Besides, the 4-period small oscillations of $\mathcal{D}(\vec{r})$ around its averaged value indicate the existence of pairs at a finite momentum equal to the charge-order wavevector. Such stripes with a *d*-wave superfluidity spatially modulated in phase with the density profile have also been proposed in recent simulations [51,52] of the *t-J* Hamiltonian that approximates the Hubbard model in the limit $U/t\to\infty$. Superfluid domain wall states in four-leg ladders also find support from density-matrix renormalization group calculations [53] of the *t-J* model, despite of a possible contamination by Friedel oscillations stemming from open boundary conditions [54].

Stripe-like states are robust against a decrease of the hole number as shown in Fig. 8 for the 16×4 cluster considered here. However, the shift of the peaks in the structure factors S_m and S_c reflects a doubling of the period when crossing $\delta=1/8$. In addition, pairing correlations at large distance are totally suppressed in the 8 and 4 hole systems corresponding to perfectly filled and half-filled 8-period vertical stripes, respectively (see Fig. 9c). The spin and charge pattern associated to domain walls separated by eight lattice spacings is also realized for $N=58$. As for $N=54$, these stripes are neither filled nor half-filled and again the behavior of $\mathcal{D}(\vec{r})$ at large distance is consistent with the development of a pair-density wave of period λ_c. When moving towards the half-filling limit, antiferromagnetism no longer exhibits amplitude modulation and a uniform density profile is recovered. Finally, a pure *d*-wave off-

diagonal long-ranged order is unambiguously supported as long as such a background is doped with few holes (see Fig. 9b for $N = 62$).

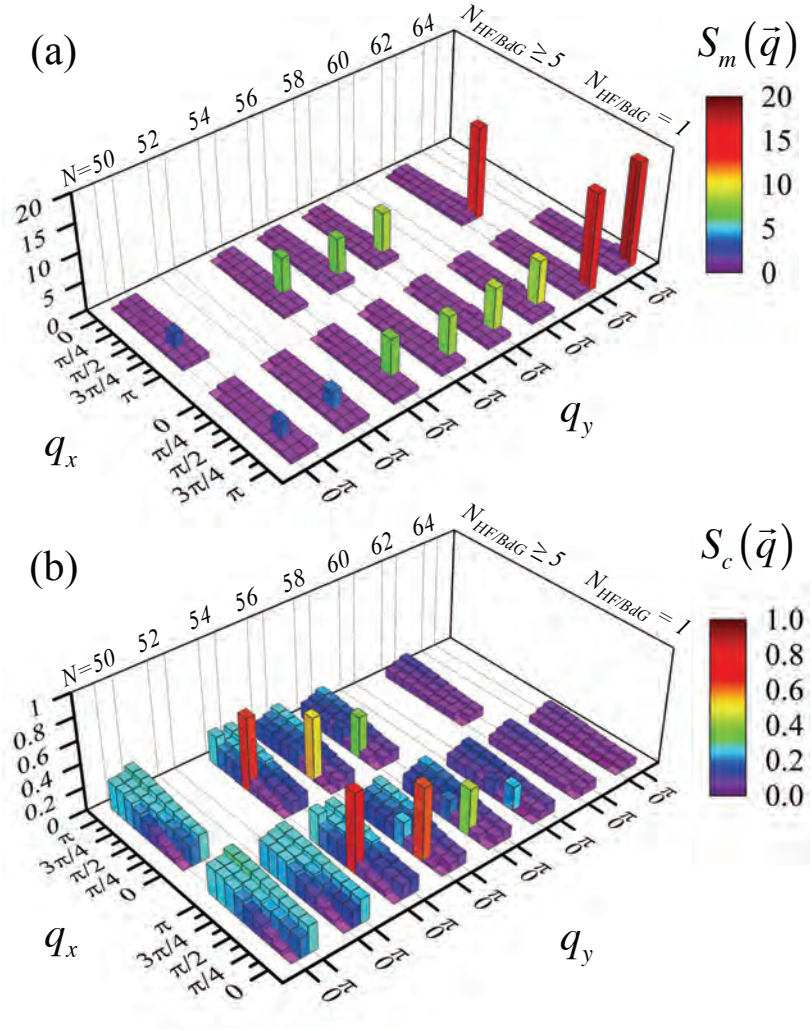


Figure 8. Momentum dependence of (a) magnetic and (b) charge structure factors for hole dopings $\delta < 1/4$ at large interaction strength $U/t = 12$. A rectangular 16×4 cell is considered. Spin and density autocorrelation functions are calculated from the numerical solution of the symmetry projected HF/BdG scheme. All symmetries are restored through projections on the number of atoms N, a zero total pseudo-momentum $\vec{K}$, the spin-singlet subspace and the irreducible representation A_1 of the C_{2v} lattice symmetry group. The latter is physically associated to a many-body wavefunction invariant under horizontal and vertical mirrors. Note that these quantum number projection are also included during the energy minimization, except for the total spin where only its *z*-component and parity are imposed. In both parts (a) and (b), 3D-histograms in the front are obtained with one HF/BdG pair of states, while those in the back result from an enlarged subspace spanned by several sequentially optimized HF/BdG wavefunctions (five couples for $N = 50,\ 54,\ 58,\ 62$ and ten couples for $N = 56$. The cases $N = 52,\ 60,\ 64$ exhibit equivalent features regarding the number of HF/BdG pairs considered. They are not shown here for clarity's sake). Both magnetic and charge correlation functions show little sensitivity to the improvement of the variational state.

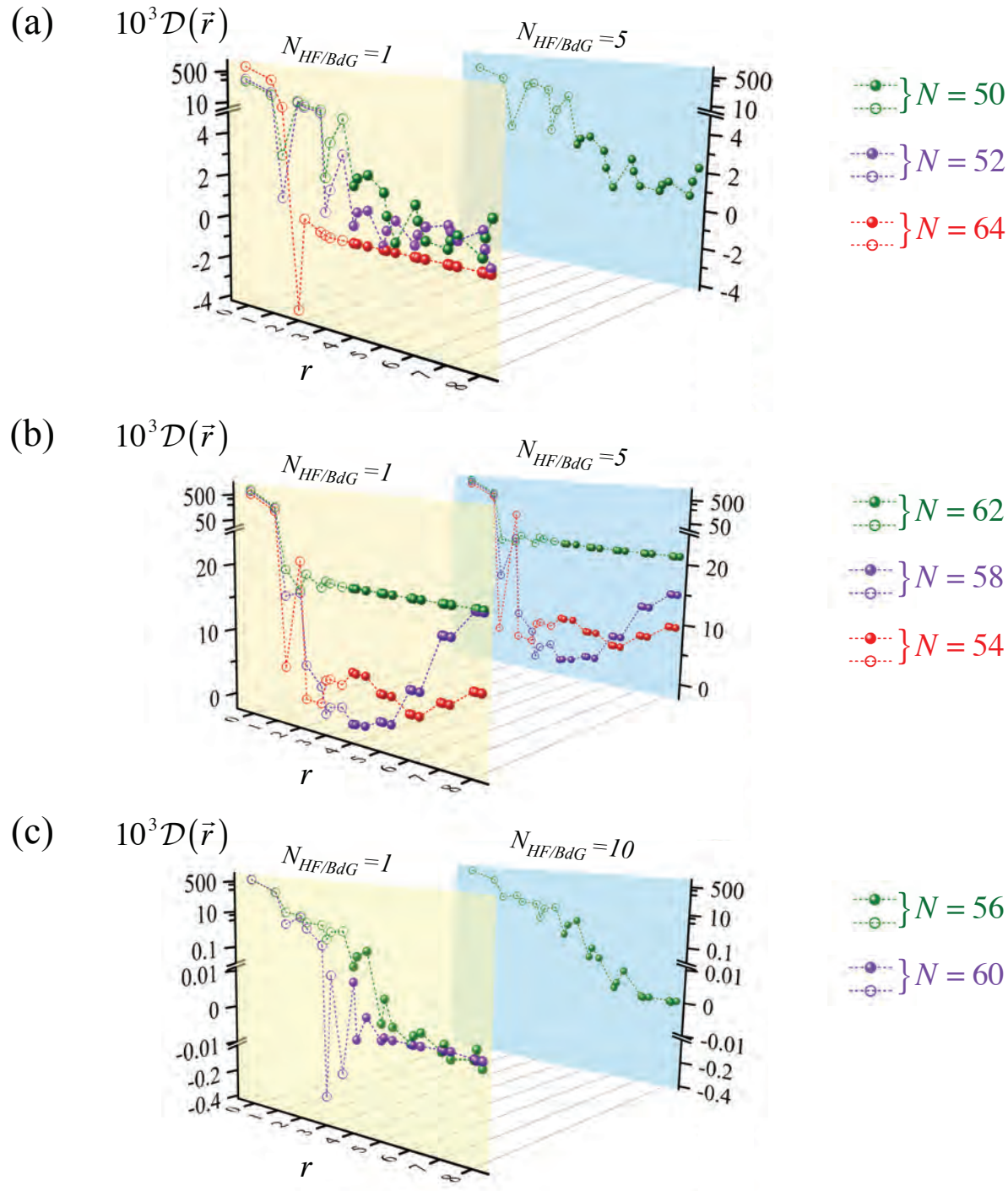


Figure 9. Dependence of the *d*-wave pair correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ against separation distance r for different numbers N of atoms at strong coupling $U/t=12$ [50]. In (b), note the oscillations at $r>4$ in the stripe-like states with a full charge period λ_c for $N=54$ and half a period for $N=58$. The same wavefunctions as for Fig. 8 are used. Short and long-ranged parts of $\mathcal{D}(\vec{r})$ are indicated by open and full symbols, respectively. They are not affected by the improvement of the variational ansatz, as shown in the back of parts (a), (b), and (c). As in Fig. 8, the cases $N=52,\ 60,\ 64$ are omitted for clarity.

Another scenario emerges when considering an increase of the hole doping from $\delta \approx 16\%$. While peaks related to charge-density waves disappear, incommensurate spin-spin correlations persist. At the same time, its associated wavevector leaves the side of the Brillouin zone to its diagonal. The nature of the underlying incommensurate magnetic ordering is not unambiguously revealed by such peaks, as they are compatible with both collinear spins or spirals [29]. One way to test whether spins rotate on the lattice is to detect a non-decaying four-body correlation function between spin chirality vectors $\hat{\vec{V}}_{\vec{r}} = \hat{\vec{S}}_{\vec{r}} \wedge \left(\hat{\vec{S}}_{\vec{r}+\vec{u}_x} + \hat{\vec{S}}_{\vec{r}+\vec{u}_y} \right)$ as a function of separation distance. The calculation of $\mathcal{V}(\vec{r}) = \left\langle \hat{\vec{V}}_{\vec{0}} \cdot \hat{\vec{V}}_{\vec{r}} \right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ at $U = 12t$ for different densities is shown in Fig. 10. The long-ranged $(r > 4)$ part systematically displays an oscillating behavior reflecting significant quantum fluctuations. Two regimes are however clearly distinguished: Spiral correlations averaged over large distances vanish in striped and antiferromagnetic states $(N \geq 54)$, while they are non-zero and positive at larger dopings. This signal remains of small amplitude and thus rather characterizes a spiral ordering component embedded in a spin-density wave (SDW). Note that anyhow, pure spiral ground-states are not expected in the large-U Hubbard model considered here [55]. As shown in Fig. 9a, the *d*-wave pairing correlation function in the SDW/Spiral state displays a complex behavior at large distance, yet free of a rapid decay to zero as was found at half-filling or in the stripes at commensurate dopings. It can be viewed as the precursor of the *d*-wave superfluidity that is better established for larger lattice fillings.

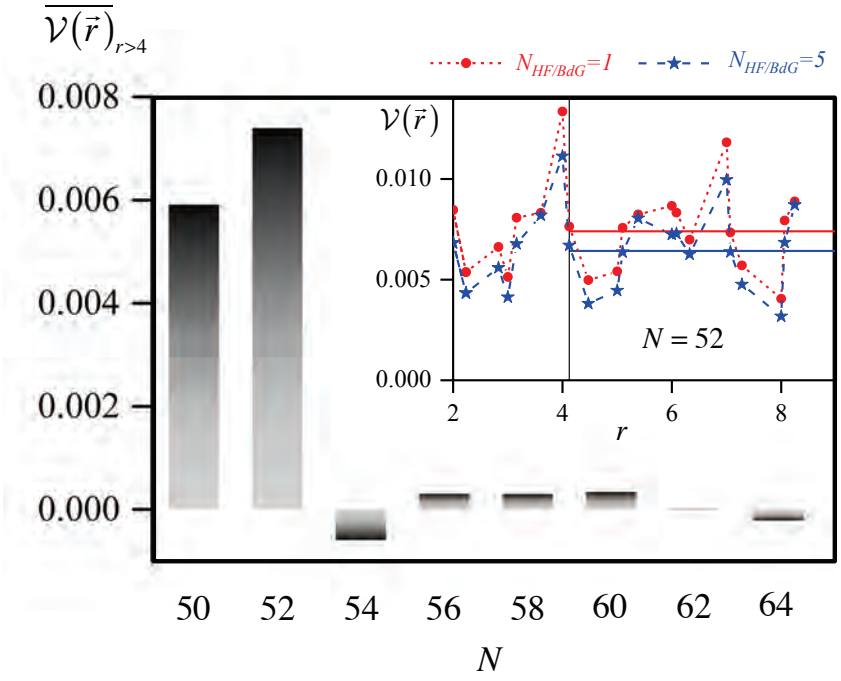
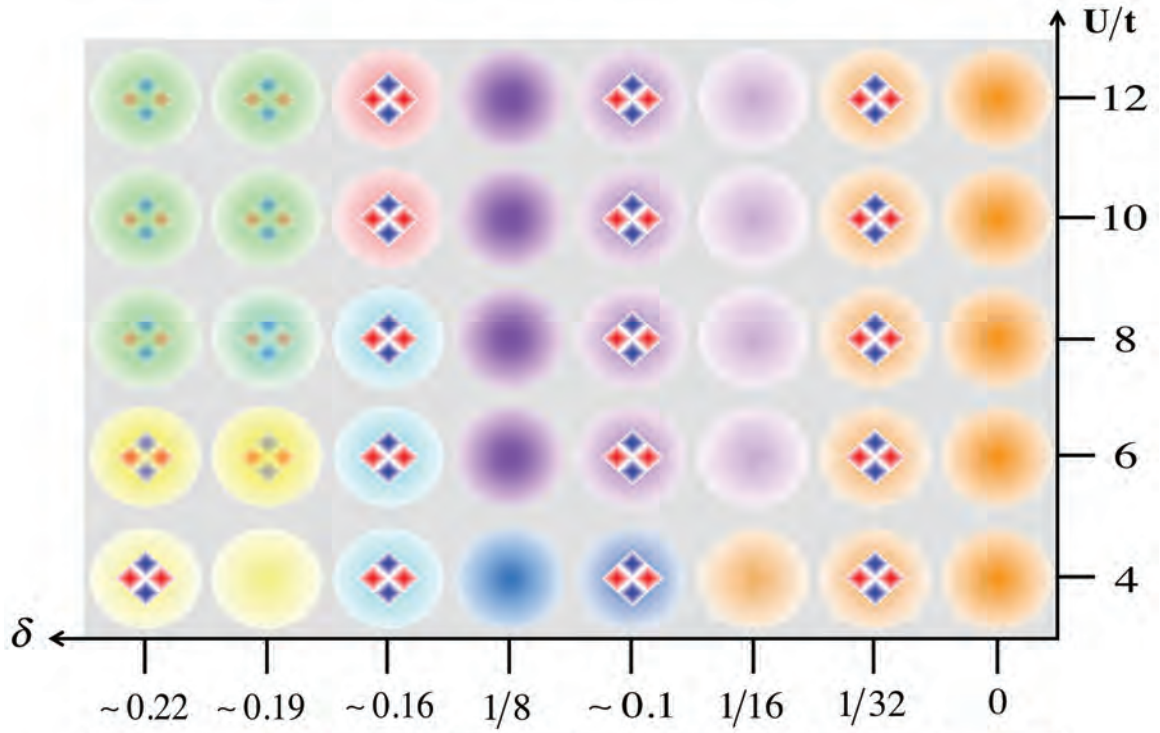


Figure 10. Spiral correlation function $\mathcal{V}(\vec{r})$ averaged over large distances $r > 4$ against the lattice filling for $U/t = 12$. The same wavefunctions as for Fig. 8 are used. However, performing the full spin projection for such a four-body observable is beyond reach. We limit ourselves here to impose the z-component S_z and the spin-parity in addition to the restoration of all other symmetries. The detailed behavior of $\mathcal{V}(\vec{r})$ is shown in the inset for $N = 52$ atoms. Note the small difference between full circles and stars that correspond to one and five HF/BdG pair(s) of states, respectively.

The energy minimization with the symmetry projected HF/BdG wavefunction essentially exhibits all the above features from the intermediate coupling $U/t = 6$ to the strongly correlated regime $U/t = 12$. The results are summarized in the quantum phase diagram shown in Fig. 11 for hole doping δ smaller than $1/4$. Stripe-like states are stabilized in the intermediate doping range and once U/t exceeds a critical value. The latter is suppressed with decreasing δ. A similar feature has also been obtained with inhomogeneous dynamical mean-field [56] and constrained-path QMC approaches [32]. In addition, the change of the charge period from $\lambda_c = 4$ to $\lambda_c = 8$ takes place for $U \geq 10t$ when crossing $\delta = 1/8$. Close to the half-filling limit, only antiferromagnetic correlations persist, while stripes melt for larger doping. Instead, incommensurate antiferromagnetism in the form of coexisting spiral and spin-density waves is found. It develops along the *x*-direction for intermediate interaction strengths $(6 \leq U/t \leq 8)$ and tends towards the diagonal direction at large U/t. Furthermore, the spiral component appears for couplings that increase with the doping. Finally, long-ranged *d*-wave pairing correlations are systematically evidenced, except when all the holes are perfectly trapped into filled or half-filled vertical stripes. These trends are altered at smaller U/t. In particular, for $U/t = 4$, charge inhomogeneities are missing and a clear tendency towards magnetic ordering is obtained for dopings smaller than $\delta < 16\%$, only, in agreement with latest diagrammatic QMC calculations [20]. Eventually, the superfluid signal is rather erratic, though this non-monotonicity proved stable against changes of boundary conditions to investigate the influence of shell effects, commonly invoked at small coupling in the attractive regime [57]. Further details are presented in the Appendix.

The symmetry projected HF/BdG phase diagram Fig. 11 in four-leg ladder geometry confirms the emergence of correlations proposed separately for the hole-doped 2D Hubbard model in the spin, charge and pairing channels. While the scenario of a competition between the resulting orders is usually retained, our findings rather point towards a subtle entanglement of the associated degrees of freedom. It induces the wide variety of strongly correlated states observed in Fig. 11 as a function of the hole doping. Their robustness requires persistence of the observed correlations when refining the grid of available densities by increasing the tube length L. Some representative examples are shown in Fig. 12 and Fig. 13 for different U/t regimes to explore additional parts of the phase diagram originally obtained at $L = 16$. Either close to the half-filling point or on both sides of the $1/8$ hole doping, no qualitatively new features appear in the spin and density autocorrelation functions. Not even is the stripe period changed, when relevant. Besides, long-ranged pair correlations are still evidenced whether they are intertwined with antiferromagnetism or stripes. In the latter case, the increase of L allows to grasp the oscillations of $\mathcal{D}(\vec{r})$ which clearly match the charge period λ_c. It is remarkable that only the quantum number projection on top of mean-field like wavefunctions and before variation remains efficient to generate such unconventional superfluid signal for clusters with a hundred of lattice sites. Indeed, we recall that the standard BdG approach fails to stabilize superfluid states for the repulsive Hubbard model. However, the value of the long-ranged tail in $\mathcal{D}(\vec{r})$ tends to decrease as compared to the length $L = 16$ previously considered. While this feature could indicate the establishment of a quasi-long-ranged order in the *d*-wave pairing channel, the benchmark comparisons presented in Section 3 point towards a deterioration of the symmetry projected HF/BdG approximation to the ground-state when enlarging the cluster. So, one cannot exclude the need to significantly increase the dimension of the HF/BdG subspace to recover the accuracy on correlation functions reached for $L = 16$. Such calculations are not currently feasible and would then reveal a reminiscence of the intrinsic exponential complexity met by unbiased methods.



d-SF	SDW	SDW	SDW Spiral	SDW Spiral	Stripe	Stripe	AF
$\vec{q}_m$	$\left(\frac{3\pi}{4},\pi\right)$	$\left(\frac{7\pi}{8},\pi\right)$	$\left(\frac{3\pi}{4},\pi\right)$	$\left(\frac{3\pi}{4},\frac{\pi}{2}\right)$	$\left(\frac{3\pi}{4},\pi\right)$	$\left(\frac{7\pi}{8},\pi\right)$	(π,π)
$\vec{q}_c$	–	–	–	–	$\left(\frac{\pi}{2},0\right)$	$\left(\frac{\pi}{4},0\right)$	–

Figure 11. Phase diagram arising from the symmetry projected HF/BdG approach for repulsively interacting cold fermions loaded in optical four-leg tubes of length $L=16$. Colors refer to different magnetic (charge) orders revealed by a peak at the wavevector $\vec{q}_m$ ($\vec{q}_c$) in the Fourier transform of the spin (density) autocorrelation function. For each hole doping δ and interaction strength U/t, the *d*-wave superfluidity symbol is made more visible when the pair correlation function exhibits off-diagonal long-ranged order.

5. Conclusion

Summarizing, we have highlighted insights into generic features of repulsively interacting ultracold fermions loaded in optical four-leg ladders through their description by the Hubbard model. First, we have shown that such systems are ideal candidates to realize a whole sequence of magnetic phases that may be tailored by varying the filling of the lattice or the ratio t/U. Above all, the since long proposed scenario of *d*-wave superfluidity emerging from a doped Mott insulator has been put forward thanks to energy minimizations with no physical assumption on the relevant orders. Nevertheless, such intertwining of magnetic and pair

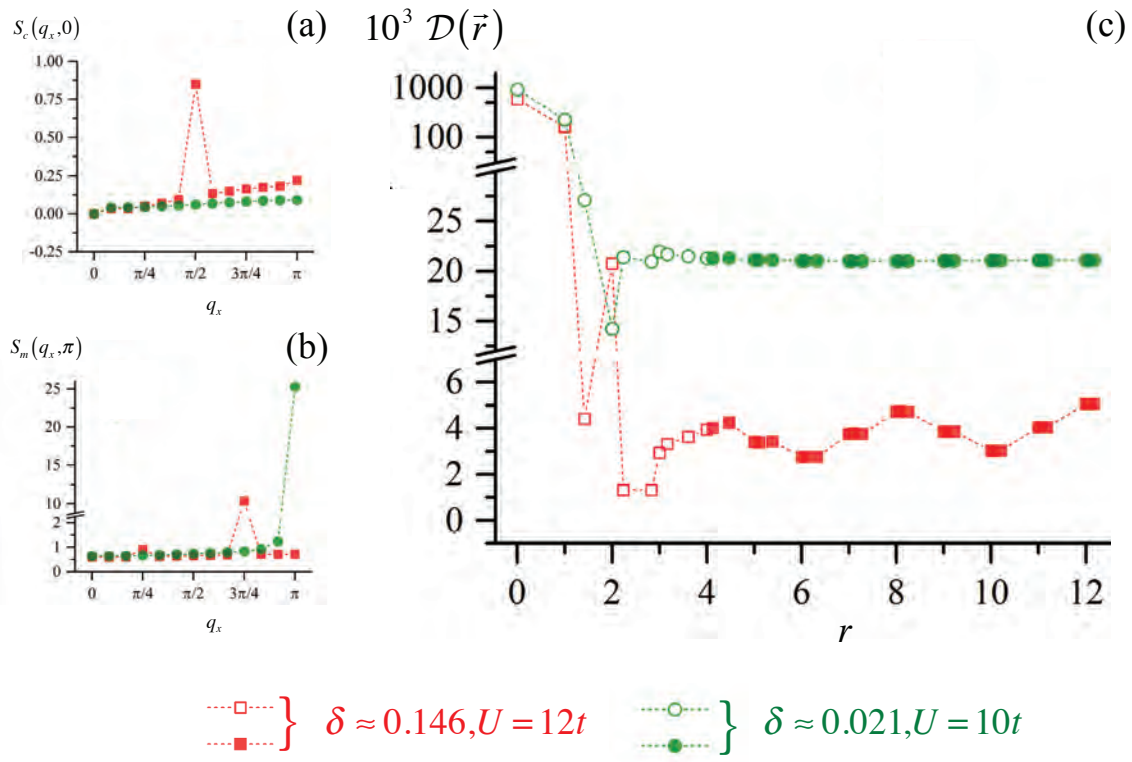


Figure 12. Charge (a) and spin (b) structure factors as a function of wavevectors along relevant paths of the first Brillouin zone. (c) Spatial dependence of the autocorrelation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ in the *d*-wave pairing channel. Symmetry projected HF/BdG results are shown for a four-leg ladder of length $L = 24$.

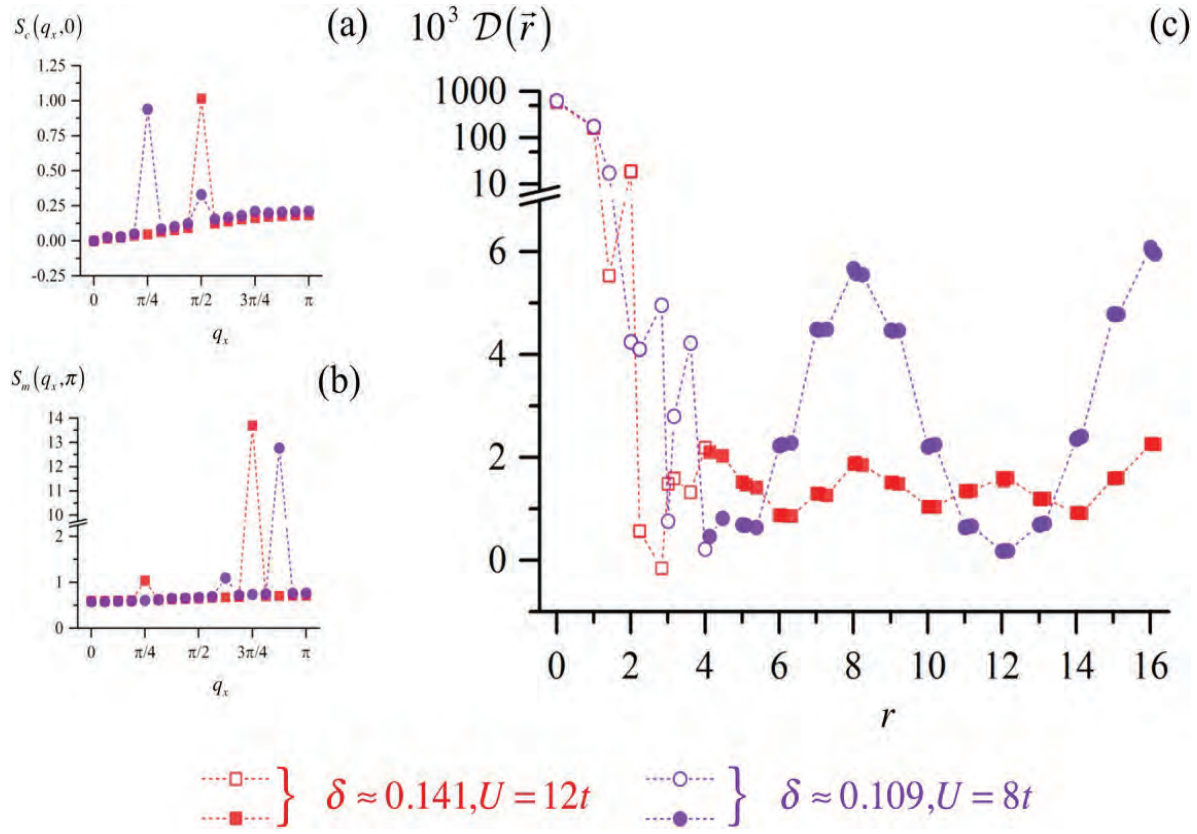


Figure 13. Same as in Fig. 12 but for a tube of $L = 32$ plaquettes and different lattice fillings.

degrees of freedom manifests itself under various facets depending on whether antiferromagnetic correlations grow from homogenous collinear spins, spatially modulated spin-density waves or spirals. It also involves the charge degree of freedom as stripes that either destroy or support superfluidity, depending on their filling. These features have been extracted from symmetry-adapted states originating from quantum number projection that also induce correlations beyond mean-field. Furthermore, magnetic, charge and superfluid correlations remain robust against improvements of this wavefunction. The quantum phase diagram in the four-leg tube geometry therefore provides an additional reference for the cross-validation between theory and quantum emulation from experiments that is necessary to face the exponential complexity of low dimensional quantum matter.

Acknowledgments

We warmly thank T. Kopp and D. Braak for stimulating discussions. This research was partly supported by the ANR through the GeCoDo project (ANR-11-JS08-001-01). We are grateful to the Région Basse-Normandie and the Ministère de la Recherche for financial support.

Appendix

We discuss here the influence of the boundary conditions along the tube direction in the symmetry projected HF/BdG approximation to the ground-state of the Hubbard model in a four-leg geometry. Emphasis is put on the energy E_Γ, the magnetic $S_m(\vec{q})$ and charge $S_c(\vec{q})$ structure factors Eqs. (12), (8) as on the correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ in the *d*-wave pairing sector Eq. (8). The results obtained with periodic (PBC) and antiperiodic (APBC) boundary conditions are compared through several representative cases for a tube length $L=16$.

We first focus on two neighboring fillings $N=56$ and $N=58$ in the intermediate regime $U/t=4$ to probe the robustness of the non-monotonicity of the *d*-wave superfluid response reported in the phase diagram Fig. 11 for this interaction. Indeed, the magnetic and density correlations reported on Fig. 14 reveal only marginal differences between PBC and APBC. In both cases, a spin-density wave with the magnetic period $\lambda_m=16$ is found. Regarding the pairing correlations in the *d*-wave channel, no sensitivity to the tube boundaries appears when $\mathcal{D}(\vec{r})$ is essentially zero at large distance, as shown in Fig. 14 for $N=56$. On the contrary, precursors of *d*-wave superfluid states are more subject to be influenced by the choice of PBC or APBC, as anticipated in Sec. 4. This is clearly the case for $N=58$ where PBC maintains a long-ranged plateau in $\mathcal{D}(\vec{r})$, but with a reduced value. When moving to the strongly correlated regime, the superfluid behavior displays a similar effect against the change of boundary conditions as long as it is intertwined with long wavelength modes in the magnetic and/or density channels. For instance, in the paired-stripe state obtained for $N=58$ atoms at $U/t=10$ and shown in Fig. 15a, $\mathcal{D}(\vec{r})$ with PBC or APBC exhibits an oscillating shape at large r though PBC significantly reduces the amplitude as well as the averaged value. On the other hand, when considering $N=62$ atoms that realize a lightly hole doped antiferromagnetic Mott insulator, $\mathcal{D}(\vec{r})$ is no longer affected whether PBC or APBC are selected (see Fig 15b).

Finally, the present symmetry projected HF/BdG calculations suggest that the main results summarized in the phase diagram Fig. 11 are not significantly contaminated from boundary condition effects.

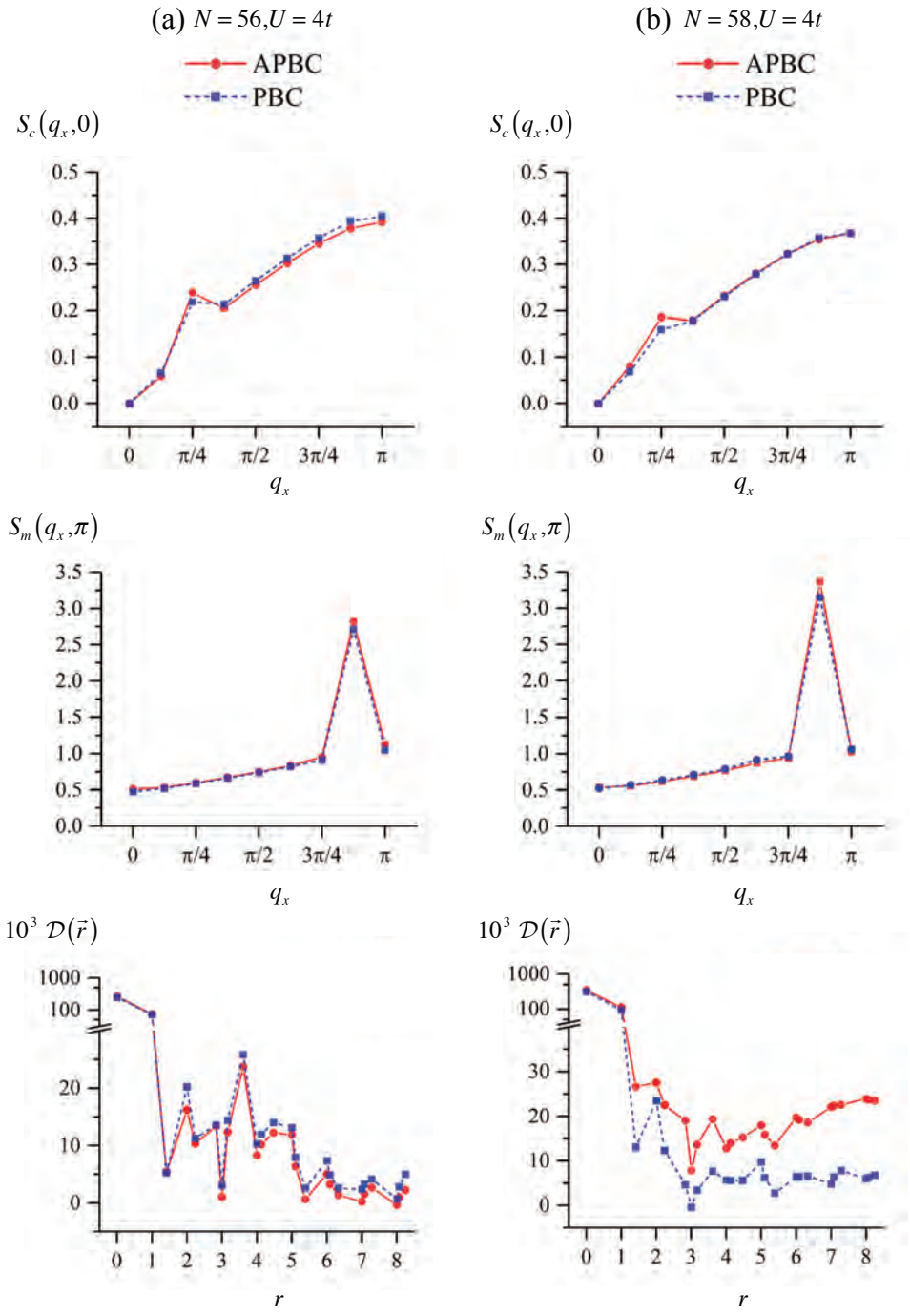
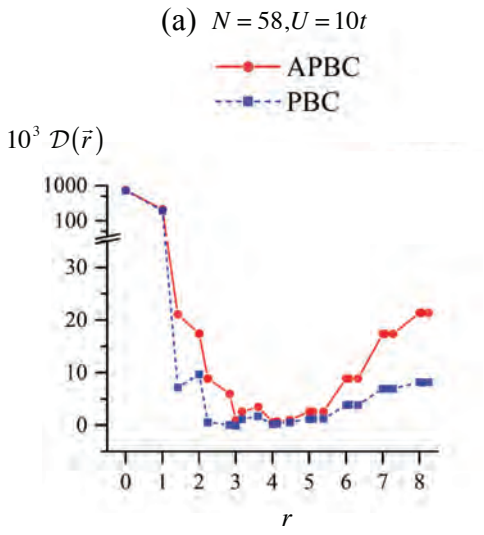
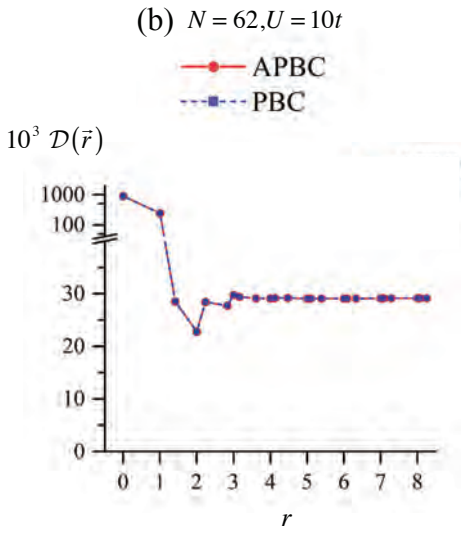


Figure 14. Sensitivity on boundary conditions along the leg direction of correlations in the density, spin and superfluid channels as obtained from the symmetry projected HF/BdG ansatz in a tube geometry of length $L = 16$. The relevant charge $S_c(\vec{q})$ and magnetic $S_m(\vec{q})$ structure factors are shown on the upper and middle parts, respectively, while the *d*-wave pair correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ is plotted on the bottom. The variational energies with APBC (PBC) are $E_\Gamma = -63.445\ t\ (-63.592\ t)$ and $E_\Gamma = -60.885\ t\ (-61.297\ t)$ for $N = 56$ and $N = 58$, respectively.





	APBC	PBC
E_Γ/t	-34.9927	-35.259
$\vec{q}_c$	(π/4, 0)	(π/4, 0)
$S_c(\vec{q}_c)$	0.384	0.385
$\vec{q}_m$	(7π/8, π)	(7π/8, π)
$S_m(\vec{q}_m)$	5.666	5.664

	APBC	PBC
E_Γ/t	-29.3844	-29.3846
$\vec{q}_c$		
$S_c(\vec{q}_c)$		
$\vec{q}_m$	(π, π)	(π, π)
$S_m(\vec{q}_m)$	16.3214	16.3215

Figure 15. Dependence on the boundary conditions of several observables for a ladder of $L = 16$ four-site plaquettes at two different filling factors. The long-ranged pairing correlations $\mathcal{D}(\vec{r})$ and the energy E_Γ are lowered by PBC in the stripe phase $N = 58$, while this is not the case in the doped antiferromagnet $N = 62$. The location $\vec{q}_c$ ($\vec{q}_m$) and the values of the peaks in the charge (spin) structure factors S_c (S_m) are not affected by the boundary conditions.

References

[1] Fradkin E and Kivelson S A 2012 *Nature Phys*. **8** 865

[2] Bloch I, Dalibard J and Zwerger W 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 885

[3] Zwierlein M W, Abo-Shaeer J R, Schirotzek A, Schunck C H and Ketterle W 2005 *Nature* **435** 1047

[4] Zwierlein M W, Schunck C H, Schirotzek A and Ketterle W 2006 *Nature* **442** 54

[5] Sanner C, Su E J, Huang W, Keshet A, Gillen J and Ketterle W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 240404

[6] Jo G B, Lee Y R, Choi J H, Christensen C A, Kim T H, Thywissen J H, Pritchard D E and Ketterle W 2009 *Science* **325** 1521

[7] Lewenstein M, Sampera A, Ahufinger V, Damski B, Sen A and Sen U 2007 *Adv. Phys.* **56** 243

[8] Köhl M, Moritz H, Stöferle T, Günter K and Esslinger T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 080403

[9] Chin J K, Miller D E, Liu Y, Stan C, Setiawan W, Sanner C, Xu K and Ketterle W 2006 *Nature* **443** 961

[10] Hubbard J 1963 *Proc. Roy. Soc. London A* **276** 238

[11] Loh Y L and Trivedi N 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 165302

[12] Sewer A, Zotos X and Beck H 2002 *Phys. Rev. B* **66** 14504(R)

[13] Anderson P W 1987 *Science* **235**, 1196

[14] Xu Z, Stock C, Chi S, Kolesnikov A I, Xu G, Gu G and Tranquada J M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 177002

[15] Fradkin E, Kivelson S A and Tranquada J M 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 457

[16] Lieb E H and Wu F Y 1968 *Phys. Rev. Lett.* **20** 1445

[17] Bulla R, Costi T and Vollhardt D 2001 *Phys. Rev. B* **64** 045103

[18] Troyer M and Wiese U J 2005 *Phys. Rev. Lett*. **94** 170201

[19] Liang S and Pang H 1994 Phys. Rev. B **49** 9214

[20] Deng Y, Kozik E, Prokof'ev N and Svistunov B 2015 *EPL* **110** 57001

[21] Jördens R, Strohmaier N, Günter K, Moritz H and Esslinger T 2008 *Nature* **455** 204

[22] Hart R A, Duarte P M, Yang T L, Liu X, Paiva T, Khatami E, Scalettar R T, Trivedi N, Huse D A and Hulet R G 2015 *Nature* **519** 211

[23] Van Houcke K, Werner F, Kozik E, Prokof'ev N, Svistunov B, Ku M J H, Sommer A T, Cheuk L W, Schirotzek A, Zierlein M 2012 *Nature Phys.* **8** 366

[24] Nascimbène S, Chen Y A, Atala M, Aidelsburger M, Trotzky S, Paredes B and Bloch I 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 205301

[25] Halboth C J and Metzner W 2000 *Phys. Rev. B* **61** 7364

[26] Metzner W, Salmhofer M, Honerkamp C, Meden V and Schönhammer J 2012 *Rev. Mod. Phys*. **84** 299

[27] Vollhardt D 1984 *Rev. Mod. Phys.* **56** 99

[28] Giamarchi T and Lhuillier C 1991 *Phys. Rev. B* **43** 12943

[29] Dzierzawa M and Frésard R 1993 *Z. Phys. B* **91** 245

[30] Miyazaki M, Yamaji K, Yanagisawa T and Kadono R 2009 *J. Phys. Soc. Jpn* **78** 043706

[31] Misawa T and Imada M 2014 *Phys. Rev. B* **90** 115137

[32] Chang C C and Zhang S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 116402

[33] Juillet O and Frésard R 2013 *Phys. Rev B* **87** 115136

[34] Leprévost A, Juillet O and Frésard R 2014 *Ann. Phys. (Berlin)* **526** 430

[35] Tomita N and Watanabe S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 166401

[36] Rodríguez-Guzmán R, Jiménez-Hoyos C A and Scuseria G E 2014 *Phys. Rev. B* **90** 195110

[37] Hamermesh M 1962 *Group Theory and its Applications to Physical Problems* (Reading MA: Addison-Wesley)

[38] Blaizot J P and Ripka G 1986 *Quantum Theory of Finite Systems* (Cambridge, MA: MIT Press)

[39] The overlap $\mathcal{N}_g^{(a,b)} = \left\langle \Phi^{(a)} \middle| \Phi_g^{(b)} \right\rangle$ is a determinant for two HF wavefunctions (see Ref. [38]) and a pfaffian otherwise (see Bertsch G F and Robledo L M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 042505).

[40] Leprévost A, Juillet O and Frésard R (2016) *in preparation*

[41] Corney J F and Drummond P D 2004 *Phys. Rev. Lett* **93** 260401

[42] Juillet O 2007 *New J. Phys*. **9** 163

[43] Assaad F F, Werner P, Corboz P, Gull E and Troyer M 2005 *Phys. Rev. B* **72** 22451

[44] Aimi T and Imada M 2007 *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** 084709

[45] Aimi T and Imada M 2007 *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** 113708

[46] Bauer B, Carr L D, Evertz H G, Feiguin A, Freire J, Fuchs S, Gamper L, Gukelberger J, Gull E, Guertler S, Hehn A, Igarashi R, Isakov S V, Koop D, Ma P N, Mates P, Matsuo H, Parcollet O, Pawlowski G, Picon J D, Pollet L, Santos E, Scarola V W, Schollwöck U, Silva C, Surer B, Todo S, Trebst S, Troyer M, Wall M L, Werner P and Wessel S 2011 *J. Stat. Mech.* **P05001**

[47] Shi H, Jimenez-Hoyos C A, Rodriguez-Guzman R, Scuseria G E and Zhang S 2014 *Phys. Rev. B* **89** 125129

[48] Misuzaki T and Imada M 2004 *Phys. Rev. B* **69** 125110

[49] Eichenberger D and Baeriswyl D 2007 *Phys. Rev. B* **76** 180504

[50] The rapidly decaying one-particle contributions in the pairing correlation function $\mathcal{D}(\vec{r})$ are discarded to avoid any spurious contamination from non-interacting dressed atoms. Precisely, the quantity $\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1\sigma_1}\hat{c}_{\vec{r}_4\sigma_4}\right\rangle_{\Psi_\Gamma}\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}_{\vec{r}_3\sigma_3}\right\rangle_{\Psi_\Gamma} - \left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1\sigma_1}\hat{c}_{\vec{r}_3\sigma_3}\right\rangle_{\Psi_\Gamma}\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}_{\vec{r}_4\sigma_4}\right\rangle_{\Psi_\Gamma}$ is subtracted for each term of the form $\left\langle \hat{c}^\dagger_{\vec{r}_1\sigma_1}\hat{c}^\dagger_{\vec{r}_2\sigma_2}\hat{c}_{\vec{r}_3\sigma_3}\hat{c}_{\vec{r}_4\sigma_4}\right\rangle_{\Psi_\Gamma}$, so that $\mathcal{D}(\vec{r})$ vanishes in the $U = 0$ limit.

[51] Corboz P, White S R, Vidal G and Troyer M 2011 *Phys. Rev. B* **84** 041108
[52] Corboz P, Rice T M and Troyer M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 046402
[53] White S R and Scalapino D J 1997 Phys. Rev. B **55** R14701
[54] White S R, Affleck I and Scalapino D J 1997 Phys. Rev. B **65** 165122
[55] Raczkowski M, Frésard R and Oles A M 2006 *Europhys. Lett.* **76** 128
[56] Peters R and Kawakami N 2014 *Phys. Rev. B* **89** 155134
[57] Bormann D, Schneider T and Frick M 1991 *Europhys. Lett.* **14** 101

Conclusion

Malgré la simplicité du modèle de Hubbard bidimensionnel et du nombre considérable d'approches théoriques qui lui sont dédiées, la connaissance de son diagramme de phases demeure incomplète. Antiferromagnétisme commensurable, supraconductivité de symétrie d, inhomogénéités sous forme de rayures ou de damiers, ondes de densité de spin, spirales magnétiques, courants de charge… Les phases proposées pour traduire la compétition à basse énergie entre la délocalisation par sauts et la répulsion sur site sont extrêmement diverses. Les approches théoriques ne retiennent alors traditionnellement qu'un ou deux de ces ordres en les imposant au préalable, par exemple au sein de fonctions d'onde *ad hoc* dépendant de quelques paramètres. Dans cette thèse, nous avons tenté d'apporter un éclairage nouveau sur une telle problématique à travers un ansatz variationnel exempt de tout choix a priori d'un jeu de corrélations privilégiées. Il repose sur la versatilité des fonctions d'onde de champ moyen HF et BdG ainsi que sur les symétries de l'Hamiltonien : en étant délibérément brisées puis restaurées par une projection sur les nombres quantiques associés, celles-ci permettent en effet d'induire des corrélations. La méthode « SEMF » de champ moyen enchevêtré par les symétries, développée tout au long de ce manuscrit, fournit en définitive un schéma de reconstruction de l'état fondamental via son développement sur une base non orthonormée d'états HF et/ou BdG à symétries restaurées. Leur optimisation pour minimiser l'énergie après projection requiert la résolution d'équations auto-consistantes qui ont été établies dans le cas le plus général au Chapitre 2 grâce à une extension du théorème de Wick et à sa reformulation en termes de pfaffiens.

Nous avons démontré analytiquement l'exactitude de l'approche SEMF pour un amas carré à quatre sites indépendamment de l'interaction sur site U au demi-remplissage. Pour de plus larges clusters, l'approximation SEMF a aussi été testée au regard de la comparaison avec les résultats issus de diagonalisations ou des simulations QMC actuellement réalisables : une partie importante des corrélations est en mesure d'être absorbée par un seul couple d'états HF/BdG projetés sur les nombres quantiques. Néanmoins, une détérioration est constatée lorsque la taille de la cellule augmente et il s'agit alors de contrer cette dégradation par un enrichissement de l'ansatz au travers d'un plus grand nombre de vecteurs HF et/ou BdG de base. Des gains notables en énergie sont certes ainsi obtenus, mais aucune modification physiquement significative des corrélations n'a été observée, au moins dans les canaux magnétique, de charge et d'appariement en onde d.

Même si le schéma SEMF poursuit à terme l'objectif de proposer un diagramme de phase à température nulle pour le modèle de Hubbard à deux dimensions, le travail présenté ici s'inscrit dans une stratégie progressive pour y parvenir en se concentrant d'abord sur des échelles à quatre montants. Pour une telle géométrie et dans le plan interaction-dopage en trous, les résultats SEMF tendent clairement vers un entrelacement des degrés de liberté de spin, de charge et de paires en onde d. A fort couplage, les corrélations associées se développent en effet coopérativement et sont en général spatialement modulées. Autour du dopage $1/8$, l'état SEMF s'interprète ainsi en termes de rubans de charge verticaux séparant des domaines antiferromagnétiques et supportant une condensation de paires de Cooper en onde d dans le canal d'impulsion nulle ainsi que dans celui du vecteur d'onde de densité de charge. En d'autres termes, cette supraconductivité inhomogène s'apparente à une réalisation

de la phase Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO), avec cependant un paramètre d'ordre possédant la symétrie d. Aucune supraconductivité en onde d n'est en revanche détectée pour des « stripes » remplies ou demi-remplies. Les rayures n'apparaissent enfin qu'au-delà d'un couplage critique qui décroît avec le dopage. Pour une interaction de plus faible intensité, la répartition des trous est uniforme à l'approximation SEMF avec de fragiles corrélations d'appariement en onde d à longue portée accompagnées d'une forme exotique d'antiferromagnétisme incommensurable : les moments magnétiques s'arrangent schématiquement selon une onde de densité de spin dans une direction et selon une spirale dans le plan transverse. Ces différents résultats se sont en outre montrés robustes vis-à-vis d'un élargissement du sous-espace variationnel HF/BdG, d'une modification des conditions aux bords dans la direction des montants ou d'une augmentation de la longueur de l'échelle.

Le travail présenté ouvre de multiples perspectives. En premier lieu, il nous semble opportun d'étendre l'étude des corrélations à de nouveaux canaux tels que la densité et le spin sur les liaisons ou les courants de charge et de spin afin d'affiner la caractérisation des diverses phases. Par exemple, il s'agira pour les « stripes » de déterminer si l'onde de densité de charge s'étend ou non à des sites contigus. De même, l'origine des oscillations exhibées par la fonction de corrélation dans le secteur de chiralité vectorielle reste à élucider. Dans une géométrie d'échelle, l'augmentation du nombre de montants est par ailleurs nécessaire pour étudier l'évolution du diagramme des phases au fur et à mesure que le réseau tend vers la géométrie carrée, pertinente pour les cuprates supraconducteurs. Celle-ci ne pourra néanmoins être directement appréhendée qu'avec des ressources informatiques nettement plus importantes. En effet, des clusters de très grande taille sont requis pour permettre le développement éventuel des modes de grande longueur d'onde que nous avons obtenus avec l'échelle à quatre montants : à titre d'illustration, l'observation d'une « stripe » antiferromagnétique de période 8 en charge nécessite un amas carré de taille minimale 16×16. Une autre perspective réside dans le développement d'une approche SEMF pour approximer l'état d'équilibre du modèle de Hubbard à température finie. Dans ce contexte, la méthode équivaut à utiliser un Hamiltonien d'essai à un corps projeté sur un secteur de symétrie et optimisé en se basant sur l'inégalité de Bogoliubov pour l'énergie libre. Comme nous l'avons signalé et prouvé dans le Chapitre 2, la validité du théorème de Wick pour tout opérateur densité gaussien non hermitique garantit (au moins formellement) de pouvoir réaliser un tel programme. A plus courte échéance, nous pouvons mettre à profit le schéma SEMF pour l'état fondamental développé dans cette thèse afin de traiter le modèle de Hubbard attractif polarisé en spin. En effet, la symétrie particule-trou de l'Hamiltonien doit assurer l'émergence de phases en relation avec celles que nous avons obtenues pour une interaction sur site positive. Plus particulièrement, un état « FFLO » avec des paires locales pour $U < 0$ est relié à une fonction d'onde exhibant des « stripes » en régime répulsif, tandis qu'une onde d de densité de spin est le pendant de la supraconductivité à $U > 0$ dans le canal de symétrie d. Enfin, il convient de souligner que les stratégies de champ moyen enchevêtré par les symétries ne sont pas limitées par la forme de l'Hamiltonien. Dès lors, nous pourrions envisager une application au modèle de Hubbard à trois bandes qui est en mesure de conduire à une meilleure description des cuprates supraconducteurs. Dans le domaine des atomes ultrafroids, un nouvel horizon s'est récemment ouvert par la réalisation expérimentale de gaz dégénérés de fermions possédant un moment dipolaire et de mélanges bosons-fermions. Nous projetons également de mettre en œuvre le schéma SEMF pour de tels systèmes dans la géométrie d'un tube de plaquettes à quatre sites que nous avons considérée : il s'agira alors de déterminer comment la superfluidité non conventionnelle issue d'un potentiel répulsif de contact réagit à des interactions anisotropes et de longue portée, ou s'entrelace avec la superfluidité d'un condensat de Bose-Einstein.

Résumé

La compréhension de la supraconductivité à haute température critique exhibée par certains oxydes de métaux de transition demeure une question centrale en physique théorique de la matière condensée. Dans ce contexte et depuis la proposition historique de P. W. Anderson, le modèle de Hubbard répulsif en géométrie bidimensionnelle est devenu un paradigme pour tenter de capturer les propriétés essentielles des matériaux supraconducteurs non conventionnels. Cependant, la détermination de son état fondamental exact se heurte à la complexité exponentielle du problème quantique à N-corps. Dans cette thèse, nous poursuivons l'objectif de développer un schéma variationnel d'approximation s'affranchissant de toute hypothèse concernant les ordres magnétiques, de charge ou supraconducteurs susceptibles d'émerger de l'Hamiltonien à basse énergie. L'approche trouve son originalité dans l'introduction de corrélations par la restauration, avant variation, de symétries délibérément brisées dans un état d'essai en forme d'une superposition de fonctions d'onde versatiles de type Hartree-Fock et Bogoliubov-de Gennes. Pour des petits amas à deux et quatre sites, nous montrons analytiquement que cette méthode de champ moyen enchevêtré par les symétries de l'Hamiltonien permet de retrouver l'état fondamental exact quelle que soit l'intensité des interactions. Pour de plus grands réseaux dopés en trous et dans les régimes fortement corrélés, nous mettons en exergue un arrangement des moments magnétiques en spirale ou suivant une onde de densité de spin qui est alors accompagnée d'inhomogénéités sous forme de rayures périodiquement réparties. De tels ordres sont de plus entrelacés avec des corrélations d'appariement en onde *d* à longue distance qui, à la limite thermodynamique, signent la supraconductivité. Ces résultats sont obtenus grâce à des simulations systématiques dans une géométrie de tubes de plaquettes pouvant être réalisée expérimentalement à l'aide d'atomes froids piégés dans des réseaux optiques.

Mots-clés : Hubbard, Modèle de ; Electrons – Corrélation ; Supraconductivité ; Symétrie (Physique) ; Atomes froids ; Antiferromagnétisme ; Méthodes variationnelles ; Stripes

Abstract

The understanding of superconductivity exhibited at high critical temperature by certain transition metal oxides remains a central issue in theoretical condensed matter physics. In this context, and since the historical proposal by P. W. Anderson, the repulsive Hubbard model in two dimensions became a paradigm in an attempt to capture the essential properties of non-conventional superconducting materials. However, the determination of the exact ground state encounters the exponential complexity of the quantum many-body problem. The main purpose of this thesis is to develop a variational scheme free of any hypothesis concerning magnetic, charge or superconducting orders likely to emerge from the Hamiltonian at low energy. The originality of the approach is found in the introduction of correlations by restoring, before variation, symmetries deliberately broken in a trial state given by a superposition of versatile wavefunctions of Hartree-Fock and Bogoliubov–de Gennes types. For small clusters of two and four sites, we show analytically that this symmetry entangled mean field method allows to find the exact ground state regardless of the strength of the on-site interaction. For larger hole-doped clusters and in the strongly correlated regime, we highlight an arrangement of magnetic moments in a spiral or in a spin density wave that is then accompanied by inhomogeneities in the form of regularly distributed stripes. Moreover, such orders are intertwined with long range *d*-wave pairing correlations, which, in the thermodynamic limit, sign superconductivity. These results are obtained through systematic simulations in a four-leg tube geometry that can be realized experimentally using cold atoms trapped in optical lattices.

Keywords : Hubbard model ; Electron configuration ; Superconductivity ; Symmetry (Physics) ; Cold atoms ; Antiferromagnetism ; Variational methods ; Stripes