

ÉTUDE DES MODÈLES D'HOLSTEIN ET SSH UNIDIMENSIONNELS À L'AIDE DU GROUPE DE RENORMALISATION

par
Émile Larouche

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



Université de Sherbrooke
Faculté des Science
Département de physique
20 octobre 2024

Remerciements

merci ben !

Résumé

voilà le résumé de mon mémoire.

Table des matières (TDM)

1	Introduction	9
1.1	Histoire des matériaux unidimensionnels	9
1.2	Contexte	9
1.3	Modèle Su-Schrieffer-Heeger (SSH)	9
1.4	Modèle d'Holstein (ou Cristal Moléculaire)	11
1.5	Champ Moyen	12
2	Groupe de renormalisation	13
2.1	contexte	13
2.2	Quelques définitions	13
2.2.1	Algèbre de Grassmann	14
2.2.2	Théorème de Wick	14
2.2.3	Théorème des graphes connexes	14
2.3	Groupe de Renormalisation (RG)	14
2.3.1	Fonction de partition	14
2.3.2	G-ologie	15
2.3.3	Équation d'écoulement	15
2.4	RG sur le modèle d'étude	15
2.4.1	Régime adiabatique	15
2.4.2	Régime non-adiabatique	15
2.4.3	Régime intermédiaire	15
3	Modèle SANS spin	17
3.1	particularité	17
3.2	Groupe de Renormalisation	17
3.2.1	Équation de Flot	17
3.2.2	Régime adiabatique	17
3.2.3	Régime non-adiabatique	17
3.2.4	Régime intermédiaire	17
3.3	Résultat	17
3.3.1	$\omega_s = \omega_b$	17
3.3.2	$\omega_s > \omega_b$	17
3.3.3	$\omega_s < \omega_b$	17
4	Modèle AVEC spin	19
4.1	Particularité	19
4.2	Groupe de Renormalisation	19
4.2.1	Équation de Flot	19
4.2.2	Régime adiabatique	19
4.2.3	Régime non-adiabatique	19
4.2.4	Régime intermédiaire	19
4.3	Résultat	19

4.3.1	$\omega_s = \omega_b$	19
4.3.2	$\omega_s > \omega_b$	19
4.3.3	$\omega_s < \omega_b$	19
5	Conclusion	21
5.1	Rappel	21
5.2	Vers l'infini et plus loin encore	21
6	Annexe	23
6.1	Théorème de Wick	23
6.2	Théorème des variables connexes	23
6.3	Exemple de calcul	23
6.3.1	Bulles de coopper et de Peierls	23
6.3.2	terme de renormalisation	23

1 Introduction

Résumé

Dans ce premier chapitre, je ferai un survol historique de la physique unidimensionnels pour motiver la recherche de ce mémoire. Si vous souhaitez avoir une introduction plus complète du domaine de recherche je conseille cette revue (refnouvelle). Ensuite, j'introduirai la problématique de ce mémoire pour ensuite enchaîner sur les différents morceaux du modèle qui sera à l'étude. De plus, j'introduirai les différentes notations utilisées tout au long de ce travail. Enfin, je ferai une première résolution du problème en utilisant la méthode de champ moyen pour donner un aperçu du modèle et pour justifier l'arrivée du prochain chapitre.

1.1 Histoire des matériaux unidimensionnels

Commençons notre histoire en 1911 au Pays-Bas (Bien qu'on puisse toujours commencer plus tôt), Avec Onnes qui mesure pour la première fois une résistance électrique nulle dans le mercure (Hg). Ceci est la première mesure d'une nouvelle phase.

1.2 Contexte

1.3 Modèle Su-Schrieffer-Heeger (SSH)

Le modèle Su-Schrieffer-Heeger apparaît pour la première fois en 1980 [4] pour tenter des résultats expérimentaux sur des molécules organiques de polyacétylène [1]. Alors, ils imaginent un modèle où l'on permet un déplacement entre-eux des paires de carbone et hydrogène.

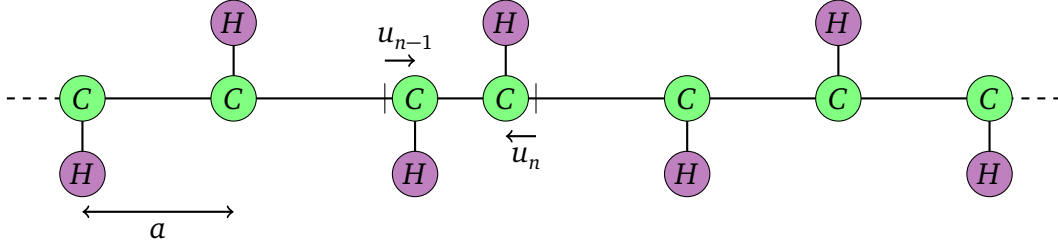


FIGURE 1.1 – Déformation du système représentant l'interaction des phonons du modèle SSH d'une molécule de polyacétylène. Le terme u_n (un champ scalaire) représente la déformation de la paire d'atome par rapport à sa position d'équilibre

Ce modèle ne s'applique pas uniquement au polyacétylène, on peut représenter ce modèle par n'importe quelle chaîne de molécules où les molécules oscillent entre-elles. Dans ce cas, on représente une molécule par un site du réseau et on modélise les phonons intermoléculaires, petit par rapport à la distance entre les sites, par des oscillateurs harmoniques. On peut représenter ce modèle avec le hamiltonien suivant où $t_{n,n+1}$ est le terme de saut d'électrons et u_n la déviation du site par rapport à sa position d'équilibre.

$$H_{SSH} = - \sum_{\sigma,n} t_{n,n+1} (c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_n \kappa (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{M}{2} \sum_n \dot{u}_n^2 \quad (1.1)$$

Aussi, on pose la masse et la constant κ comme uniforme (Symétrie de translation). Par la suite, le mouvement des sites imposent une variation de la variable $t_{n,n+1}$, on pose alors une correction linéaire.

$$t_{n,n+1} \approx t_0 + t'(u_{n+1} - u_n) \quad (1.2)$$

Cette correction linéaire permet d'inclure une interaction entre les phonons et les électrons. Donc,

$$H_{SSH} = - \sum_{\sigma,n} (t_0 + t'(u_{n+1} - u_n)) (c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_n \kappa (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{M}{2} \sum_n \dot{u}_n^2 \quad (1.3)$$

Maintenant, on fait une tranformation de Fourier et on utilise les définitions suivante pour les opérateurs bosoniques qui permettrons de retrouver une forme similaire à un oscillateur harmonique quantique.

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q u_q e^{iqnd} \quad \dot{u}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q p_q e^{iqnd} \quad c_{n,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k c_{k,\sigma} e^{iknd}$$

$$u_q = \sqrt{\frac{1}{2M\omega(q)}} (b_q + b_{-q}^\dagger) \quad p_q = \sqrt{\frac{M\omega(q)}{2}} (b_q^\dagger - b_{-q})$$

On tombe sur l'hamiltonien suivant.

$$H_{SSH} = \underbrace{\sum_{k,\sigma} \varepsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma,k,q} \frac{g(k,q)}{\sqrt{N}} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} (b_q + b_{-q}^\dagger)}_{H_e} + \underbrace{\sum_q \omega(q) \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right)}_{H_{ph}^0} \quad (1.4)$$

où

$$\varepsilon(k) = -2t_0 \cos(kd) \quad (1.5)$$

$$g(k,q) = \frac{-4it' \cos\left(\left[k + \frac{q}{2}\right]d\right) \sin\left(\frac{qd}{2}\right)}{\sqrt{2M\omega(q)}} \quad (1.6)$$

$$\omega(q) = -\sqrt{\frac{4\kappa}{M}} \sin\left(\frac{qd}{2}\right) \quad (1.7)$$

Avec $\varepsilon(k)$ la relation de dispersion des électrons, $\omega(q)$ celle des phonons et la constante $g(k,q)$ représente la constante de couplage électron-phonon.

1.4 Modèle d'Holstein (ou Cristal Moléculaire)

D'un autre côté, rien ne nous empêche d'imaginer des oscillations à même le "site", c'est à dire l'existence de phonons intramoléculaires. Ce modèle a été introduit par Holstein en 1959 lorsqu'il tentait d'étudier le mouvement des polarons (une quasiparticule formé d'un électron localisé avec une déformation du réseau) [2]. Si on reprend l'exemple du polyacétylène, on peut représenter ces phonons comme des vibrations entre les atomes d'hydrogène et l'atome de carbone auquel ils sont liés.

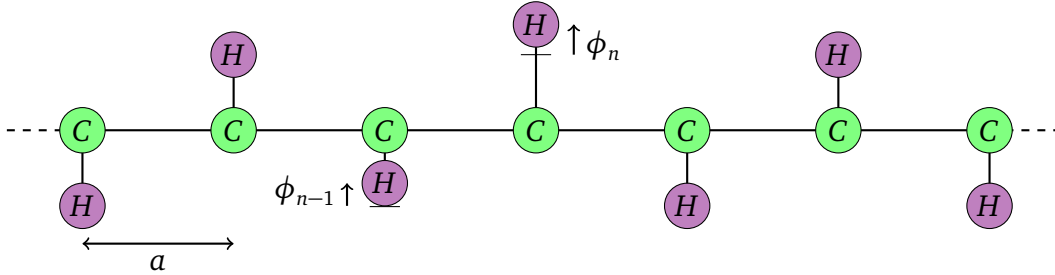


FIGURE 1.2 – Déformation du système représentant l'interaction des phonons du modèle d'Holstein. Le terme ϕ_n (un champ scalaire) représente la déformation de la paire d'atome par rapport à sa position d'équilibre

Contrairement au modèle précédent, ce type de phonon n'induit pas un déplacement des sites du réseau mais plutôt une variation de la densité électronique "à l'intérieur" des sites, d'où leur nom : intramoléculaire. On peut représenter cela avec une variation du potentiel chimique du système.

$$\varepsilon_n(\phi_n) \simeq \varepsilon_n + \lambda \phi_n \quad (1.8)$$

Donc, en posant $\varepsilon_n = 0$, c'est-à-dire potentiel chimique null et uniforme. on trouve le hamiltonien suivant en introduisant le hamiltonien des phonons (des oscillateurs harmoniques) mais cette fois avec une constante de ressort et une masse différente pour ces phonons.

$$H_{CM} = -t \sum_{n,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + c_{n+1,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + \text{cste} + \lambda \sum_n \phi_n c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + \frac{1}{2} \kappa^M \sum_n \phi_n^2 + \sum_n \frac{M \dot{\phi}_n^2}{2} \quad (1.9)$$

1.5 Champ Moyen

coucou, les copains

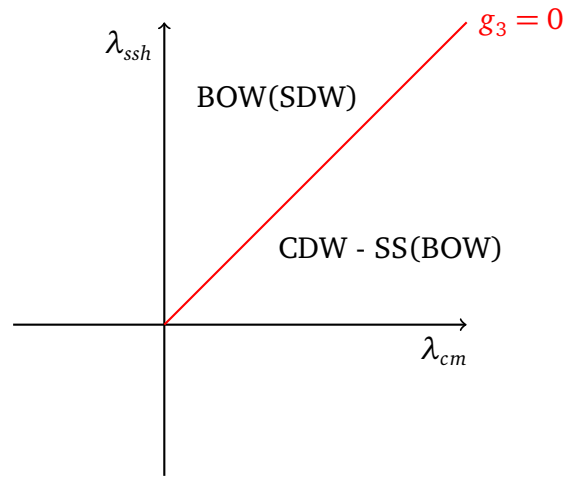


FIGURE 1.3 – Test de figure

Ensuite, je fais un test de référence de figures 1.3. je continue les tests

2 Groupe de renormalisation

Résumé

Le but de la première partie de ce chapitre est de donner toutes les clés de compréhension concernant le groupe de renormalisation wilsonien. On commencera par présenter certains concepts qui seront essentiels tout au long de cet ouvrage. Ensuite, je poserai les bases mathématiques nécessaires pour ensuite introduire le groupe de renormalisation. Enfin, la dépendance temporelle des constantes de couplage dans le calcul de renormalisation sera traité. Pour acquérir plus d'informations et d'intuition sur le sujet hors du présent texte, je conseille ceci [3]

2.1 contexte

2.2 Quelques définitions

Définissons quelques concepts qui seront centraux tout au long de ce mémoire.

Phase : Dans ce mémoire je vais beaucoup discuter de diagramme de *phase*, de transition de *phase* ou bien de *phasedu* système. Quand on parle de phase, on fait référence à des propriétés globales du système qui permettront de le distinguer de comme la conductivité, diffusion, etc. qui permettront de les différencier. Tout le travail fait ici est à très faible température $T \rightarrow 0$. Alors, on se trouve toujours implicitement dans l'état fondamental du système. Donc, les différentes phases possibles sont les différents états fondamentaux du système en fonction des différents paramètres du système d'étude.

Localité : Dans ce texte, il sera souvent question de phases où d'interactions *local* ou de phase localisée. Dans le premier cas, signifie que les interactions ont une faible portée spatiale dans le matériaux. Typiquement, l'interaction coulombienne "U" du modèle de Hubbard est une interaction que l'on qualifie de local puisqu'elle prends en compte uniquement les électrons qui se trouve sur le même sites (à la même position dans le matériau). Lorsque l'on parle de phase localisée, cela signifie que la phase du système est fixé. Par exemple, une onde de densité de charge peut être centré sur les sites comme pour l'état fondamental CDW mais peut être aussi détaché du réseau et avoir un degré de liberté supplémentaire. On peut imaginer une onde de charge pouvant "se déplacer" dans le système. C'est ce qui produit le pic de conductivité dans la partie...

Retard : Lorsque je mentionne le retard je parle ici de retard temporel, c'est-à-dire que des interactions entre des particules à des temps différents sont considérées dans ce mémoire.

adiabaticité : À plusieurs reprises dans ce mémoire, je parlerai de régime adiabatique et non-adiabatique. un processus adiabatique est un processus par lequel un système se transforme sans échanger de chaleur avec son environnement. Dans notre cas, on s'intéresse aux interactions électrons-phonons. Lorsque l'on mentionne que l'on se trouve dans le régime *adiabatique*, cela signifie que les électrons perçoivent les phonons du système comme étant fixe ou ayant une constante de ressort infini. Il y a alors peu ou pas d'échange entre les 2 et c'est pour cette raison que l'on qualifie ce régime d'*adiabatique*.

marginal : D

pertinente/non-pertinente :

2.2.1 Algèbre de Grassmann

définition plus avantage

2.2.2 Théorème de Wick

voir annexe

2.2.3 Théorème des graphes connexes

voir annexe

2.3 Groupe de Renormalisation (RG)

2.3.1 Fonction de partition

Généralement le but est de calculer la fonction de partition

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (2.1)$$

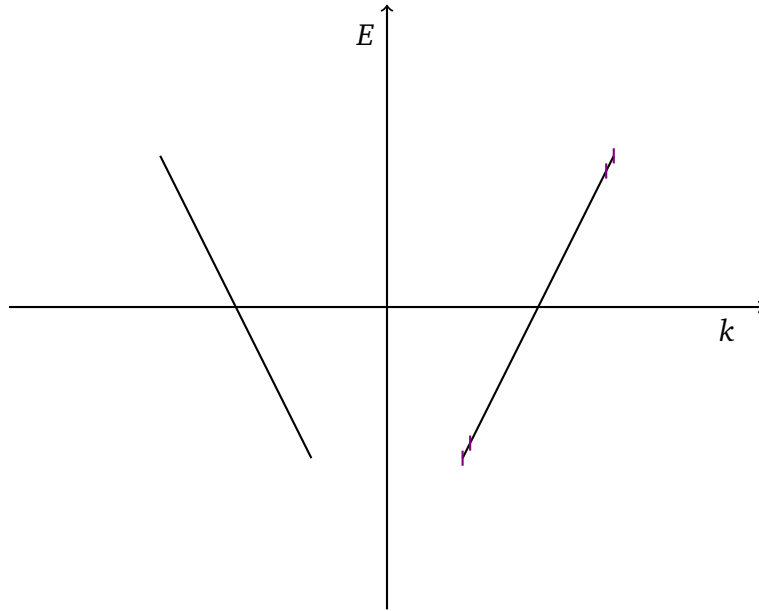


FIGURE 2.1 – Image illustrant la coque de renormalisation sur la relation de dispersion linéaire.

2.3.2 G-ologie

2.3.3 Équation d'écoulement

2.4 RG sur le modèle d'étude

2.4.1 Régime adiabatique

2.4.2 Régime non-adiabatique

2.4.3 Régime intermédiaire

3 Modèle SANS spin

3.1 particularité

3.2 Groupe de Renormalisation

3.2.1 Équation de Flot

3.2.2 Régime adiabatique

3.2.3 Régime non-adiabatique

3.2.4 Régime intermédiaire

3.3 Résultat

3.3.1 $\omega_s = \omega_b$

3.3.2 $\omega_s > \omega_b$

3.3.3 $\omega_s < \omega_b$

4 Modèle AVEC spin

Résumé

Dans ce chapitre, on traite le cas des fermions possédant des spins. Je présenterai le résultat du calcul de RG en utilisant une méthode diagrammatique. Ces résultats sont "généralisés" car ils prennent en compte tout les régimes temporels possible en introduisant des fonctions de Heavyside. Ensuite, je fais l'analyse complète des résultats dans les différents régimes. On remarque ...

4.1 Particularité

4.2 Groupe de Renormalisation

4.2.1 Équation de Flot

4.2.2 Régime adiabatique

4.2.3 Régime non-adiabatique

4.2.4 Régime intermédiaire

4.3 Résultat

4.3.1 $\omega_s = \omega_b$

4.3.2 $\omega_s > \omega_b$

4.3.3 $\omega_s < \omega_b$

5 Conclusion

5.1 Rappel

5.2 Vers l'infini et plus loin encore

6 Annexe

6.1 Théorème de Wick

6.2 Théorème des variables connexes

6.3 Exemple de calcul

6.3.1 Bulles de coopper et de Peierls

6.3.2 terme de renormalisation

Bibliographie

- [1] I. B. Goldberg, H. R. Crowe, P. R. Newman, A. J. Heeger, and A. G. MacDiarmid. Electron spin resonance of polyacetylene and AsF₅-doped polyacetylene. *The Journal of Chemical Physics*, 70(3) :1132–1136, February 1979.
- [2] T Holstein. Studies of polaron motion. *Annals of Physics*, 8(3) :325–342, November 1959.
- [3] Shang-keng Ma. Introduction to the Renormalization Group. *Reviews of Modern Physics*, 45(4) :589–614, October 1973.
- [4] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. Soliton excitations in polyacetylene. *Physical Review B*, 22(4) :2099–2111, August 1980.