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

23 octobre 2024

Remerciements

Merci !

Résumé

voilà le résumé de mon mémoire.

Table des matières (TDM)

1 Introduction

Résumé

Dans ce premier chapitre, je ferai un survol historique de la physique unidimensionnelles pour motiver la recherche de ce mémoire. Si vous souhaitez avoir une introduction plus complète du domaine de recherche je conseille.... Ensuite, j'introduirai la problématique de ce mémoire pour ensuite enchaîner sur les différents morceaux du modèle de ce mémoire. Enfin, je ferai une première résolution du problème en utilisant la méthode de champ moyen pour donner une première intuition du modèle et pour justifer l'arrivé 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-Schreiffer-Heigger 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.

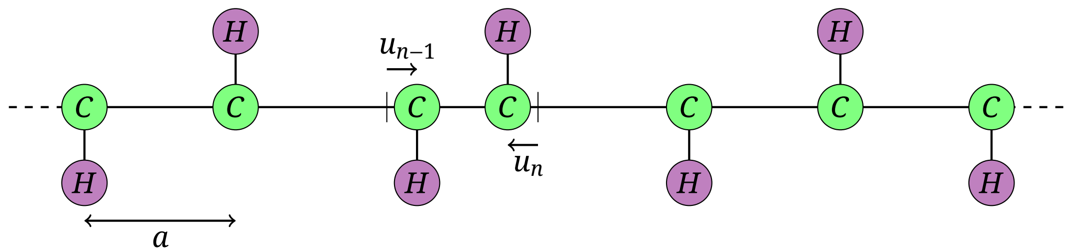

FIGURE 1.1 – Déformation du système représentant l'interaction des phonons du modèle SSH d'une molécule de polyacétilène. Le terme u_n (un champ scalaire) représente la déformation de la paire d'atome par rapport à sa position d'équilibre

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.

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

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.

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

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

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

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.

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

$$u_q = \sqrt{\frac{1}{2M\omega(q)}}\left(b_{q,b} + b^{\dagger}_{-q,b}\right) \qquad p_q = \sqrt{\frac{M\omega(q)}{2}}\left(b^{\dagger}_{q,b} - b_{-q,b}\right)$$

On tombe sur l'hamiltonien suivant.

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

où

$$\varepsilon(k) = -2t_0 \cos(kd) \tag{1.5}$$

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

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

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 polyacétilène, on peut représenter ces phonons comme des vibrations entre les atomes d'hydrogène et l'atome de carbone auquel ils sont liés.

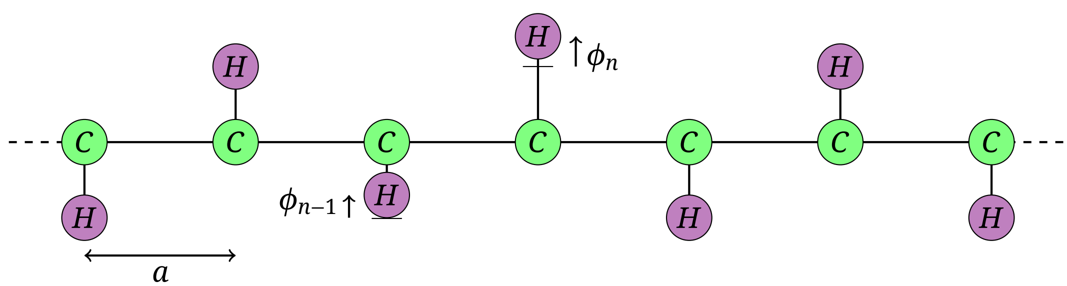

FIGURE 1.2 – Déformation du système représentant l'interaction des phonons du modèle d'Holstein. Le terme ϕ_n (un champ scalaire) représente la déformation de la paire d'atome par rapport à sa position d'équilibre

Contrairement au modèle précédent, ce type de phonon n'induit pas un déplacement des sites du réseau mais plutôt une variatiton de la densité électronique "à l'intérieur" des sites, d'où leur nom : intramoléculaire. On représente ce type de phonon avec un opérateur $n_{i,\sigma} = c^\dagger_{i,\sigma}$

$$H_{CM} = -t \sum_{n,\sigma} c^\dagger_{n,\sigma} c_{n+1,\sigma} + c^\dagger_{n+1,\sigma} c_{n,\sigma} + \lambda \sum_n \phi_n c^\dagger_{n,\sigma} c_{n,\sigma} + \frac{1}{2} \kappa^M \sum_n \phi_n^2 + \sum_n \frac{M\dot{\phi}_n^2}{2} \tag{1.8}$$

On applique une transformation de Fourier sur les différents opérateurs

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

$$x_q = \sqrt{\frac{1}{2M\omega(q)}} \left(b_{q,s} + b^{\dagger}_{-q,s} \right) \qquad p_q = \sqrt{\frac{M\omega(q)}{2}} \left(b^{\dagger}_{q,s} - b_{-q,s} \right)$$

1.5 Champ Moyen

coucou, les copains

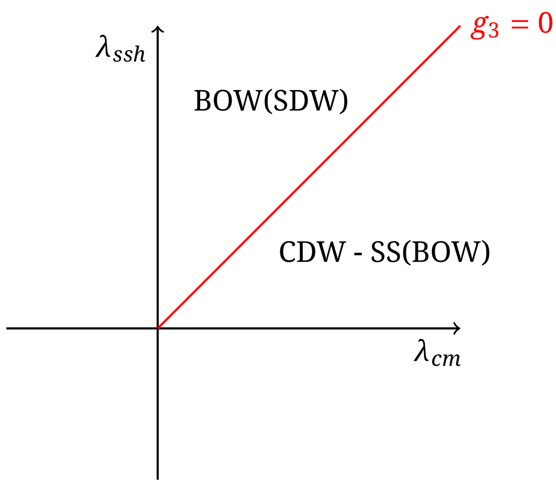

FIGURE 1.3 – Test de figure

Ensuite, je fais un test de référence de figures 1.3.

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 dépendence 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 centrals tout au long de ce mémoire.

adiabaticité : À plusieurs reprises dans ce mémoire, je parlerai de régime adiabatique et non-adiabatique. un processus adiabatique est un processus par laquelle un système se transforme sans échanger de chaleur avec son environnement. Dans notre cas, on s'intérèsse aux interactions électrons-phonons. Lorsque l'on mentionne que l'on se trouve dans le régime *adiabatique*, cela signifie que les électrons percoivent 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 se régime d'*adiabatique*.

pertinent/non-pertinent :

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

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} \tag{2.1}$$

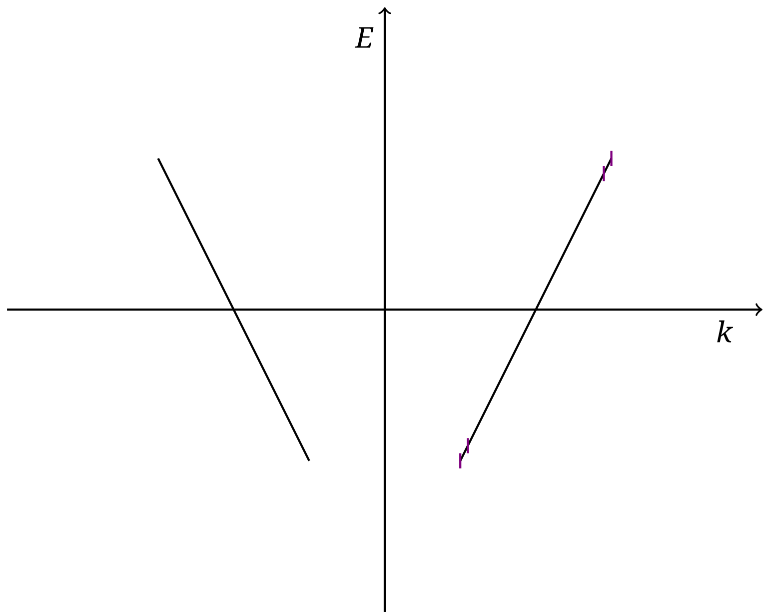

FIGURE 2.1 – Une image qui n’est pas terminé

2.3.2 G-ologie

3 Modèle SANS spin

3.1 particularité

3.2 Groupe de Renormalisation

3.2.1 Équation de Flot

3.3 Résultat

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 "générals" car ils prennent en compte tout les régimes temporelles possible en introduisant des fonctions de Heavyside. Ensuite, je fais l'analyse complète des résultats dans les différents régimes.

4.1 Particularité

4.2 Groupe de Renormalisation

4.2.1 Équation de Flot

4.3 Résultat

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.