Susceptibilité de paires de type $\mathbf{d_{x^2-y^2}}$

1- Motivation

Il est généralement admis que pour la supraconductivité à haute T_c, la symétrie d'intérêt pour le paramètre d'ordre est celle de type $d_{x^2-y^2}$. C'est pourquoi nous avons ajouté, dans le programme de simulation Monte Carlo Quantique (MCQ), une sous-routine permettant de calculer les corrélations de paires dynamiques de type d. La sous-routine SUMSUSCEP permet ensuite d'effectuer l'intégrale pour obtenir la susceptibilité de paires comme telle.

2- Traitement analytique

Pour la définition du paramètre d'ordre, nous nous référons à l'équation [15] de l'article PRB vol49 p.4106. En travaillant dans la représentation que nous appellerons "matricielle" (i.e où il n'y a pas de somme sur les sites i), nous avons que:

$$\begin{aligned}
\Delta^{\dagger}_{d_j} &\equiv \frac{1}{2\sqrt{NM}} \sum_{\nu} g^d(\nu) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\nu\downarrow} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{NM}} (c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{x}\downarrow} + c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{x}\downarrow} - c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{y}\downarrow} - c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{y}\downarrow})
\end{aligned} \tag{1}$$

ainsi que:

$$\begin{aligned}
\Delta_{d_i} &\equiv \frac{1}{2\sqrt{NM}} \sum_{\nu} g^d(\nu) c_{i+\nu\downarrow} c_{i\uparrow} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{NM}} (c_{i+\hat{x}\downarrow} c_{i\uparrow} + c_{i-\hat{x}\downarrow} c_{i\downarrow} - c_{i+\hat{y}\downarrow} c_{i\uparrow} - c_{i-\hat{y}\downarrow} c_{i\uparrow})
\end{aligned} \tag{2}$$

En combinant les équations (1) et (2), on trouve que:

$$\begin{aligned}
\langle \Delta_{d_i}(\tau) \Delta^{\dagger}_{d_j} \rangle = \frac{1}{4NM} [&\langle c_{i+\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{x}\downarrow} \rangle + \langle c_{i+\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{x}\downarrow} \rangle \\
&- \langle c_{i+\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{y}\downarrow} \rangle - \langle c_{i+\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{y}\downarrow} \rangle \\
&+ \langle c_{i-\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{x}\downarrow} \rangle + \langle c_{i-\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{x}\downarrow} \rangle \\
&- \langle c_{i-\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{y}\downarrow} \rangle - \langle c_{i-\hat{x}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{y}\downarrow} \rangle \\
&- \langle c_{i+\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{x}\downarrow} \rangle - \langle c_{i+\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{x}\downarrow} \rangle \\
&+ \langle c_{i+\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{y}\downarrow} \rangle + \langle c_{i+\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{y}\downarrow} \rangle \\
&- \langle c_{i-\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{x}\downarrow} \rangle - \langle c_{i-\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{x}\downarrow} \rangle \\
&+ \langle c_{i-\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j+\hat{y}\downarrow} \rangle + \langle c_{i-\hat{y}\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c^{\dagger}_{j\uparrow} c^{\dagger}_{j-\hat{y}\downarrow} \rangle]
\end{aligned} \tag{3}$$

Or, le théorème de Wick implique que (voir la section 3.5 du rapport "Aspects numériques des simulations du modèle de Hubbard - Monte Carlo quantique et méthode d'entropie maximum" sur la page web de D. Poulin et H. Touchette):

$$\langle c_{k\downarrow}(\tau)c_{l\uparrow}(\tau)c^{\dagger}_{m\uparrow}c^{\dagger}_{n\downarrow}\rangle = \langle c_{l\uparrow}(\tau)c^{\dagger}_{m\uparrow}\rangle\langle c_{k\downarrow}(\tau)c^{\dagger}_{n\downarrow}\rangle \tag{4}$$

car la moyenne d'opérateurs de spin opposé est toujours nulle. En utilisant le fait que

$$\langle c_{k\sigma}(\tau)c^{\dagger}_{l\sigma}\rangle = G^{\sigma}_{kl}(\tau) \tag{5}$$

l'équation (3) s'écrit sous la forme:

$$\begin{aligned}
\langle\Delta_{d_i}(\tau)\Delta^{\dagger}_{d_j}\rangle = \frac{1}{4NM}[&G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{x},j+\hat{x}}(\tau) + G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{x},j-\hat{x}}(\tau) \\
&- G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{x},j+\hat{y}}(\tau) - G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{x},j-\hat{y}}(\tau) \\
&+ G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{x},j+\hat{x}}(\tau) + G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{x},j-\hat{x}}(\tau) \\
&- G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{x},j+\hat{y}}(\tau) - G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{x},j-\hat{y}}(\tau) \\
&- G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{y},j+\hat{x}}(\tau) - G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{y},j-\hat{x}}(\tau) \\
&+ G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{y},j+\hat{y}}(\tau) + G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i+\hat{y},j-\hat{y}}(\tau) \\
&- G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{y},j+\hat{x}}(\tau) - G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{y},j-\hat{x}}(\tau) \\
&+ G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{y},j+\hat{y}}(\tau) + G^{\uparrow}_{i,j}(\tau)G^{\downarrow}_{i-\hat{y},j-\hat{y}}(\tau)]
\end{aligned} \tag{6}$$

On définit les corrélations de paires dynamiques comme la somme sur toutes les possibilités de sites i et j:

$$\tilde{P}_{\alpha}(\tau) = \sum_{i,j}\langle\Delta_{\alpha_i}(\tau)\Delta^{\dagger}_{\alpha_j}\rangle \tag{7}$$

où α désigne le type de symétrie que l'on considère (s, $d_{x^2-y^2}$, etc.). La susceptibilité de paires est ensuite obtenue en prenant l'intégrale sur tous les temps imaginaires:

$$P_{\alpha} = \int_0^{\beta}\tilde{P}_{\alpha}(\tau)\,d\tau = \int_0^{\beta}\sum_{i,j}\langle\Delta_{\alpha_i}(\tau)\Delta^{\dagger}_{\alpha_j}\rangle\,d\tau \tag{8}$$

3- Implantation

La sous-routine SUSCEPI_D du programme de simulations MCQ calcule les corrélations de paires dynamiques de type $d_{x^2-y^2}$ à l'aide des formules (6) et (7) , puis on appelle la sous-routine SUMSUSCEP qui effectue l'intégration sur τ par la méthode de Simpson et permet d'obtenir la susceptibilité de paires.
Cependant, vous remarquerez que dans la sous-routine SUSCEPI_D, on multiplie chaque terme de l'équation (6) par COSMAG(J,I,K). Ici, J et I sont des indices de sites tandis que K est un vecteur d'onde. Il semble donc que l'on effectue une transformée de Fourier et que l'on obtienne les résultats en fonction de $\vec{\mathbf{k}}$. Ceci n'est pas tout à fait le cas, car il manque un facteur "1/NM" pour respecter la définition de la transformée de Fourier. Pour le vecteur d'onde $\vec{\mathbf{k}}=0$, on retrouve exactement les expressions données plus haut car COSMAG(J,I,0)=1 $\forall$ J,I.