

# Étalonnage d'une généralisation de l'approche autocohérente à deux particules pour la résolution du modèle de Hubbard en deux dimensions

Nicolas Martin

PHQ662, Introduction à la recherche  
Département de Physique, Université de Sherbrooke,  
Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1

21 décembre 2021

Le modèle de Hubbard permet d'étudier plusieurs familles de matériaux fortement corrélés avec succès, possédant un diagramme de phase riche. On ne connaît de solutions analytiques que dans certains cas. La plupart du temps, on doit utiliser des techniques approximatives pour trouver des résultats intéressants. Ici, deux méthodes hybrides basées sur la théorie autocohérente à deux particules sont proposées. Ces techniques font usage de la théorie du champ moyen dynamique. Les méthodes sont comparées avec des résultats exacts par Monte-Carlo en temps continu, sur un modèle d'étalonnage carré en deux dimensions à demi-rempli. On étudie la longueur de corrélation magnétique et la self-énergie en fréquence de Matsubara, avec des résultats encourageants.

## I. INTRODUCTION

L'étude des matériaux fortement corrélés où l'interaction entre les électrons est non négligeable est très compliquée. Les outils traditionnels de la physique de la matière condensée, telle que la théorie des bandes, sont non adaptés à ces types de matériaux. Or, les propriétés intéressantes qu'ont ces matériaux, telle que la supraconductivité à haute température, font de ces derniers un sujet d'étude actuel très actif.

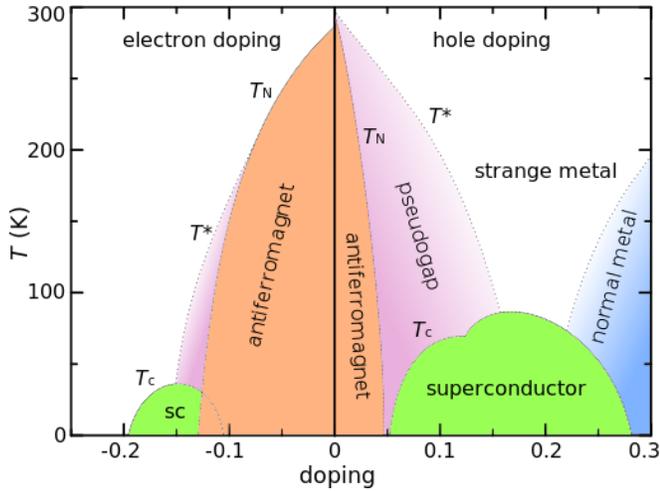


FIGURE 1. Diagramme de phase typique d'un cuprate. Tiré de [1]

Une famille de tels matériaux, les cuprates, présentent un diagramme de phase très riche (voir la figure 1). En plus de la supraconductivité, ils présentent une phase mystérieuse : le pseudogap, dont l'origine est encore débattue. Plusieurs modèles existent pour étudier ces matériaux permettant de reproduire en partie plusieurs des phases de ceux-ci. Pour la résolution de ces modèles, le calcul numérique de pointe est crucial, les modèles étant la plupart du temps insolubles exactement.

Dans ce projet, on propose une généralisation d'une technique de calcul permettant de résoudre approximativement le modèle de Hubbard. L'étalonnage de cette technique est effectué sur un ensemble de paramètres du modèle pour lequel des résultats exacts sont disponibles [2], pour en tester l'efficacité.

## II. OUTILS THÉORIQUES

### A. Le modèle de Hubbard

Un modèle très utilisé dans l'étude des matériaux fortement corrélés est le modèle de Hubbard. Dans ce dernier, une certaine densité d'électrons  $n$  est localisée sur des sites d'un réseau de dimension  $d$  et les électrons peuvent se déplacer d'un site à l'autre. Il respecte le principe d'exclusion de Pauli en limitant le nombre d'électrons par site à deux ou moins (un de chaque spin au maximum). Son hamiltonien est

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}. \quad (1)$$

Ici,  $t_{ij}$  est l'énergie cinétique correspondant au saut d'un électron de spin  $\sigma$  entre les sites  $i$  et  $j$ . La répulsion coulombienne entre les électrons est supposée négligeable pour des électrons situés sur des sites différents, ce qui représente l'effet d'écrantage important par les noyaux atomiques dans des matériaux réels. L'énergie de répulsion entre deux électrons sur un même site est représentée par le coût de double-occupation  $U$ . Le potentiel chimique  $\mu$  contrôle le remplissage du modèle.

Si  $t \neq 0$  et  $U \neq 0$ , on ne connaît pas de solution exacte à ce modèle (autre qu'en dimension  $d = 1$  ou  $d \rightarrow \infty$ ). Cela peut être compris simplement par le fait que les termes de saut  $t_{ij}$  favorisent des états électroniques étendus, alors que  $U$  favorise des états localisés sur des sites. Ainsi, lorsque ces deux

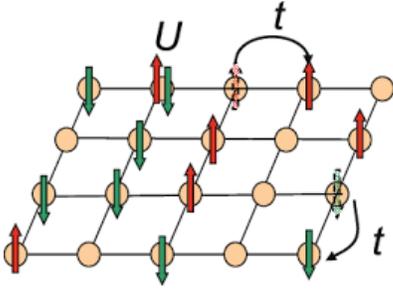


FIGURE 2. Paramètres de saut du modèle de Hubbard. Tiré de [3]

paramètres sont du même ordre de grandeur, l'état du système est hautement non trivial et donne lieu à un diagramme de phase riche.

Pour simuler les cuprates dopés aux électrons, on adopte des paramètres qui permettent de reproduire approximativement la physique des plans d'oxyde de cuivre. On définit ainsi  $t$  comme amplitude de saut vers les premiers voisins, tel qu'illustré à la figure 2. De plus, pour l'étalonnage des méthodes de calcul, on utilise  $t = 1$ ,  $U = 2$ . Finalement, on se place à demi-remplissage, soit un électron par site, en posant  $\mu = U/2$ . Pour toute la suite de cet article, on adopte la convention  $k_B = 1$ , de sorte à ce que la température inverse est  $\beta = 1/T$ .

## B. L'approche autocohérente à deux particules (TPSC)

L'approche autocohérente à deux particules, souvent désignée par le sigle TPSC (de l'anglais *Two-Particle Self-Consistent approach*), est une approche analytique permettant de résoudre approximativement le modèle de Hubbard. Elle est valide pour une force d'interaction  $U$  faible à intermédiaire [4], ainsi qu'à dimension  $d \leq 2$ . Elle définit les susceptibilités de spin et de charge du système en fonction des vertex d'interaction renormalisés constants  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  :

$$\chi_{sp}(q) \equiv \frac{\chi_0(q)}{1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi_0(q)} \quad (2)$$

$$\chi_{ch}(q) \equiv \frac{\chi_0(q)}{1 + \frac{1}{2}U_{ch}\chi_0(q)}. \quad (3)$$

Dans ces expressions,  $\chi_0(q)$  est la susceptibilité non interagissante connue. L'argument des fonctions,  $q \equiv (\mathbf{q}, iq_n)$ , représente à la fois un vecteur d'onde de la zone de Brillouin  $\mathbf{q}$  et une fréquence de Matsubara bosonique  $iq_n \equiv 2\pi Tn$ .

Les susceptibilités respectent exactement les règles de somme

$$\frac{T}{N} \sum_q \chi_{sp}(q) = n - 2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \quad (4)$$

$$\frac{T}{N} \sum_q \chi_{ch}(q) = n + 2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - n^2. \quad (5)$$

Ici,  $D \equiv \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  est la double-occupation du réseau, représentant la proportion de sites occupés par deux électrons.

Comme on a trois quantités inconnues (la double-occupation et les deux vertex d'interaction), on doit trouver une troisième équation pour pouvoir les déterminer de façon autocohérente. Pour ce faire, on introduit habituellement l'*ansatz* (une équation posée comme hypothèse) de la TPSC

$$U_{sp} \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle = U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle, \quad (6)$$

où  $\langle n_\uparrow \rangle = \langle n_\downarrow \rangle = n/2$ . L'ajout de cette expression permet de déterminer complètement les vertex d'interaction et  $D$ .

Une fois  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  déterminés par les relations (4) à (6), on peut calculer la self-énergie du modèle par la relation

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(k) = U n_{-\sigma} + \frac{U T}{8 N} \sum_q [3U_{sp}\chi_{sp}(q) + U_{ch}\chi_{ch}(q)] \mathcal{G}_\sigma^{(1)}(k+q). \quad (7)$$

Ici,  $\mathcal{G}_\sigma^{(1)}$  est la fonction de Green non interagissante, et  $k \equiv (\mathbf{k}, ik_n)$  représente un vecteur d'onde et une fréquence de Matsubara fermionique  $ik_n = (2n+1)\pi T$ .

On peut aussi déterminer la *longueur de corrélation de spin*  $\xi_{sp}$ , qui correspond à la largeur à mi-hauteur dans la zone de Brillouin de la susceptibilité de spin à fréquence nulle  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0)$  [2]. En effet, on peut lisser cette dernière à une courbe lorentzienne centrée autour du vecteur d'onde  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , ce qui nous donne

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n = 0) = \frac{A}{(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - \xi^{-2}}. \quad (8)$$

cette dernière, telle que son nom l'indique, nous informe sur la portée effective des fluctuations de spin dans le matériau.

## C. Théorie du champ moyen dynamique (DMFT)

### 1. DMFT paramagnétique

La DMFT (sigle qui vient du terme anglais *Dynamical Mean-Field Theory*) est une méthode itérative pour résoudre approximativement le modèle de Hubbard. Cette approche remplace le problème sur réseau par le problème d'un site (qu'on appelle l'impureté) couplé à un bain d'électrons sans interactions. On approxime la self-énergie de l'impureté comme purement locale, soit

$$\Sigma_\sigma(k) = \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \approx \Sigma_\sigma(ik_n). \quad (9)$$

La procédure de calcul commence avec une self-énergie d'essai. On projette ensuite cette self-énergie sur l'impureté, avec les relations

$$\mathcal{G}_\sigma(k) = \frac{1}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma_\sigma(k)} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ii}(ik_n) &= \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{ik_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Sigma(ik_n)} \\ &= \int d\epsilon \frac{N(\epsilon)}{ik_n - (\epsilon - \mu) - \Sigma(ik_n)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Ici,  $N(\epsilon)$  est la densité d'états non interagissante du réseau. On se sert de cette fonction de Green, ainsi que de la self-énergie, pour trouver la fonction de Green non interagissante par l'équation de Dyson

$$\mathcal{G}_{ii}^0(ik_n) = \left[ \left( \mathcal{G}_{ii}(ik_n) \right)^{-1} + \Sigma(ik_n) \right]^{-1}. \quad (12)$$

Un solveur externe est ensuite utilisé pour résoudre le problème d'impureté d'Anderson, à l'aide de  $\mathcal{G}_{ii}^0$  et  $U$ . Ce dernier nous donne en sortie une nouvelle self-énergie, qui permet de recommencer la boucle d'autocohérence et d'itérer jusqu'à convergence. Les observables d'intérêt sont aussi mesurées à chaque itération et convergent de la même façon.

Dans notre cas, on utilise le solveur d'impureté CTHYB [5], basé sur la librairie TRIQS [6], et implémentant un algorithme de Monte-Carlo en temps continu. À chaque itération, on effectue  $1.2 \times 10^7$  mesures.

## 2. DMFT antiferromagnétique

Cette modification de la DMFT [7] permet au système de se placer dans un ordre antiferromagnétique, qui est énergétiquement favorisé à basse température dans le réseau d'étalement à demi-rempli. Pour se faire, on considère deux sites indépendants A et B du réseau, qui ont leurs propres fonctions de corrélation. La relation (11) est cependant modifiée pour les deux sous-réseaux, prenant la forme [8]

$$\mathcal{G}_{\alpha,\sigma}(ik_n) = \int d\epsilon N(\epsilon) \frac{\zeta_{\bar{\alpha},\sigma} + \epsilon}{\zeta_{A,\sigma} \zeta_{B,\sigma} - \epsilon^2} \quad (13)$$

$$\zeta_{\alpha,\sigma} \equiv ik_n + \mu - \alpha \sigma h_s - \Sigma_{\alpha,\sigma}. \quad (14)$$

Ici,  $\alpha$  représente l'indice du sous-réseau (A et B);  $\bar{\alpha}$ , le réseau complémentaire (B et A). On note aussi  $h_s$ , qui permet si désiré d'inclure l'effet d'un champ magnétique alterné. On voit ainsi que la relation d'autocohérence couple les deux sous-réseaux ensemble. Aussi, on symétrise les self-énergies des deux impuretés par la relation

$$\Sigma_{\alpha,\sigma}(ik_n) = \frac{1}{2} \left[ \Sigma_{\alpha,\sigma}(ik_n) + \Sigma_{\bar{\alpha},\sigma}(ik_n) \right], \quad (15)$$

qui permet à l'ordre antiferromagnétique de se former.

## III. APPROCHE PROPOSÉE

### A. Limitations de la TPSC

Bien que la TPSC respecte le théorème de Mermin-Wagner et le principe d'exclusion de Pauli, elle présente quelques limitations. Ainsi, l'*ansatz* (6) est totalement faux à très basse température, faisant tendre la  $U_{sp}$  (et la double-occupation) vers 0. De plus, il est difficile d'adapter cette approche, car on manque de règles de somme analogues à (4) et (5) pour déterminer toutes les vertex d'interaction de façon autocohérente.

### B. Limitations de la DMFT

Comme toutes les quantités calculées par la DMFT à un site sont locales, on ne connaît pas la dépendance en vecteur d'onde des fonctions de corrélations (comme la self-énergie). Cette approximation locale est exacte pour  $d \rightarrow \infty$  et bonne pour  $d \leq 3$ , mais moins bonne en deux dimensions. De plus, cette localité ne permet pas d'inclure l'effet des fluctuations antiferromagnétique à longue portée qui sont présentes dans notre modèle.

### C. Remplacement de l'ansatz de la TPSC

La première modification à la TPSC consiste à se débarrasser de l'*ansatz* (6), qu'on sait être problématique dans le régime à très basse température. Pour le remplacer, on utilise plutôt la double-occupation du modèle obtenue par calcul de DMFT (qui peut être de type paramagnétique ou antiferromagnétique). Les vertex d'interaction  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  sont ensuite déterminés par les règles de somme habituelles (4) et (5).

### D. Correction sur la self-énergie locale

Une deuxième modification consiste à utiliser la self-énergie locale obtenue par le calcul de DMFT, pour remplacer la partie locale de la self-énergie obtenue par TPSC. Ainsi, on fait la substitution

$$\Sigma^{TPSC}(\mathbf{k}, ik_n) \rightarrow \left[ \Sigma^{TPSC}(\mathbf{k}, ik_n) - \Sigma^{TPSC}(ik_n) \right] + \Sigma^{DMFT}(ik_n), \quad (16)$$

où

$$\Sigma^{TPSC}(ik_n) \approx \frac{1}{n_{\mathbf{k}}^2} \sum_{\mathbf{k}} \Sigma^{TPSC}(\mathbf{k}, ik_n). \quad (17)$$

De ce fait, on espère combiner la DMFT, qui tient compte très bien des effets locaux, et la capacité de la TPSC à reproduire les effets à grande longueur d'onde. Cette deuxième approche se combine très bien à la première, les deux nécessitant le même calcul de DMFT.

Si le calcul de DMFT a été fait de façon à permettre l'ordre antiferromagnétique, on doit moyenner la self-énergie sur les deux sous-réseaux afin d'obtenir une seule self-énergie locale  $\Sigma^{DMFT}(ik_n)$ .

## IV. RÉSULTATS ET ANALYSE

### A. Double-occupation

À la figure 3, on montre la double-occupation du modèle pour les différentes approches à l'étude, ainsi que la comparaison avec des calculs exacts par DiagMC (les carrés noirs). On remarque trois régimes différents pour la double-occupation exacte du modèle :

1. À très haute température ( $\beta \lesssim 1$ ),  $D$  diminue lorsqu'on refroidit le système;
2. À température intermédiaire ( $1 \lesssim \beta \lesssim 10$ ),  $D$  augmente;
3. À basse température ( $\beta \gtrsim 10$ ),  $D$  diminue de nouveau.

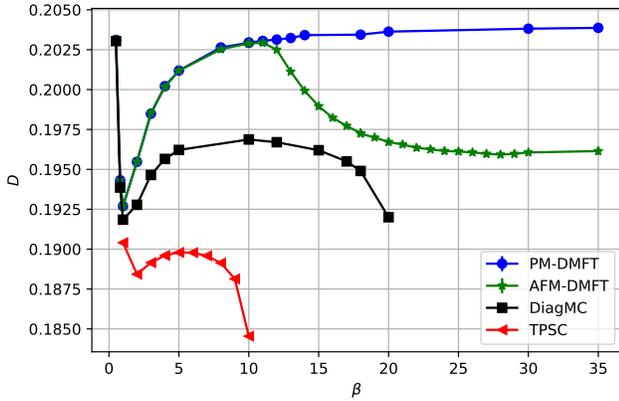


FIGURE 3. Double-occupation du modèle d'étalonnage obtenue par diverses méthodes de calcul, pour une température inverse  $\beta$  allant de 0.5 à 35. À noter, la température diminue en allant vers la droite. Les données par DiagMC sont tirées de [2].

Tel que discuté en [2], le premier régime correspond au comportement normal d'un liquide de Fermi. Dans ce dernier, l'augmentation de la température permet aux électrons de doublement occuper un site malgré la répulsion coulombienne, en augmentant leur énergie thermique. Ce régime est bien reproduit qualitativement par toutes les méthodes, bien que l'accord quantitatif soit meilleur par la DMFT que la TPSC.

Le régime intermédiaire où  $D$  augmente lorsque  $T$  diminue est lui aussi bien reproduit qualitativement par toutes les méthodes et est dû à des considérations entropiques [2]. On remarque cependant que cet effet est surestimé par la DMFT et sous-estimé par la TPSC.

Finalement, le troisième régime à basse température correspond à celui où les fluctuations antiferromagnétiques à longue portée sont importantes. Pour cette raison, la DMFT paramagnétique, qui ne permet pas ces dernières, ne reproduit pas la baisse de  $D$  à très basse température. La DMFT antiferromagnétique, dans ce régime, permet au système de s'ordonner magnétiquement, ce qui explique la décroissance de  $D$  malgré le fait que les quantités en DMFT sont purement locales. Des résultats similaires par des extensions cellulaires de la DMFT reproduisent aussi ces résultats [9].

## B. Longueur de corrélation magnétique

À la figure 4, on compare la longueur de corrélation magnétique calculée par diverses méthodes. Les méthodes hybrides proposées, utilisant la double-occupation tirée d'un calcul de DMFT (paramagnétique ou antiferromagnétique) sont désignées par TPSC+DMFT. Comme les courbes sont

tracées dans un espace semi-log, une courbure positive dénote une croissance exponentielle de la longueur de corrélation magnétique.

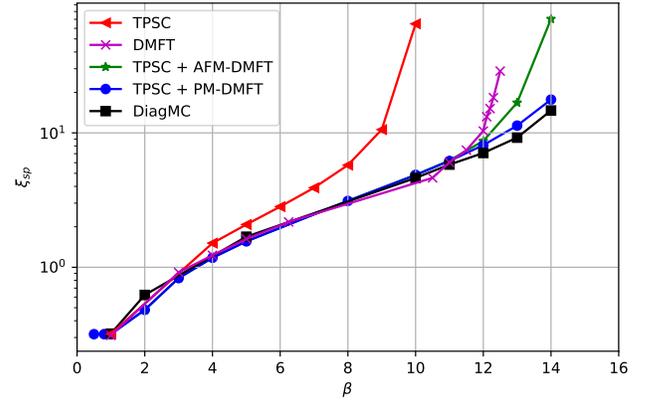


FIGURE 4. Longueur de corrélation magnétique du modèle d'étalonnage obtenue par diverses méthodes de calcul, pour une température inverse  $\beta$  allant de 0.5 à 35. Les données par DiagMC et DMFT sont tirées de [2].

On remarque tout d'abord que les techniques hybrides permettent de suivre de plus près les résultats exacts par Monte-Carlo en temps continu, par rapport aux techniques séparées de TPSC et DMFT. Cela peut être vu comme la combinaison des forces des deux méthodes : la reproduction des effets locaux par la DMFT et des effets non-locaux par la TPSC.

De plus, la DMFT paramagnétique nous permet de calculer une longueur de corrélation magnétique plus correcte que la DMFT antiferromagnétique à basse température, et ce, malgré le fait qu'elle nous donne une double-occupation qualitativement incorrecte dans ce régime.

## C. Self-énergie

La self-énergie aux premières fréquences de Matsubara ayant un effet très important sur la physique d'un matériau, il est indispensable qu'une technique de calcul approximative puisse donner un accord qualitatif avec les valeurs exactes. À cet effet, aux figures 5 et 6, on compare la self-énergie à l'anti-node  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$

- Par simulation Monte-Carlo, en noir (résultats tirés de [2]);
- Par la TPSC avec *ansatz* traditionnelle, en rouge;
- Par la TPSC en utilisant la double-occupation de la DMFT, en lignes tiretées;
- Par la TPSC en utilisant à la fois la double occupation de la DMFT, ainsi qu'en faisant la substitution de la self-énergie locale de la DMFT, en lignes pleines.

On voit tout d'abord que, comme vu dans le cas de la longueur de corrélation magnétique, l'utilisation de la double-occupation de la DMFT améliore grandement la self-énergie par rapport à l'utilisation de la TPSC avec *ansatz*. En effet, comme la différence entre les deux premières fréquences nous

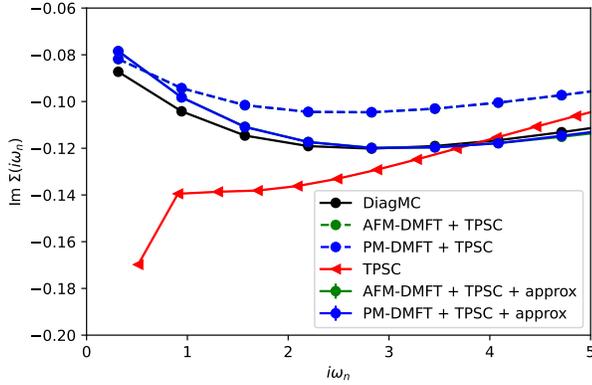


FIGURE 5. Partie imaginaire de la self-énergie, aux premières fréquences de Matsubara, pour une température inverse  $\beta = 10$ . L'étiquette *approx* représente l'approximation sur la self-énergie locale de la DMFT. Les courbes vertes et bleues sont superposées, en raison de la différence négligeable entre les deux méthodes à cette température.

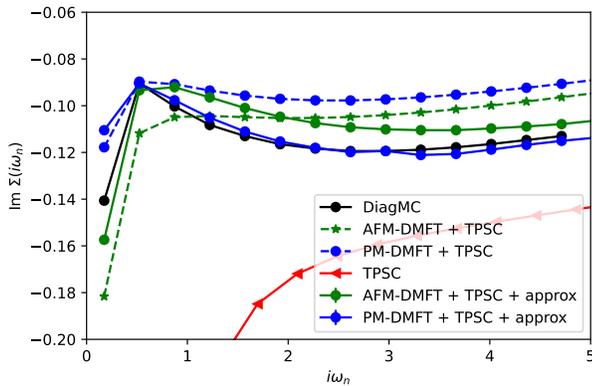


FIGURE 6. Partie imaginaire de la self-énergie, aux premières fréquences de Matsubara, pour une température inverse  $\beta = 18$ . L'étiquette *approx* représente l'approximation sur la self-énergie locale de la DMFT.

donne de l'information sur la phase du matériau, une self-énergie décroissante et croissante à basse fréquence est fonda-

mentalement différente. Ainsi, la TPSC prédit un pseudogap à cette température, alors que les autres méthodes prédisent (correctement) un comportement en liquide de Fermi.

On voit aussi que l'approximation sur la self-énergie locale améliore grandement le comportement à haute fréquence de Matsubara des courbes, ce qui permet de reproduire quantitativement les résultats exacts par DiagMC. Cela nous indique, en conjonction avec le fait que le comportement à basse fréquence soit aussi près des résultats exacts, que l'approximation sur la self-énergie locale est bonne.

À partir de ces deux résultats, il n'est pas possible de déterminer une méthode clairement meilleure entre la DMFT paramagnétique ou antiferromagnétique pour le calcul de la self-énergie. Les deux méthodes donnent des résultats qualitativement compatibles, quoique le résultat paramagnétique semble être un peu plus près des résultats exacts à basse température.

## V. CONCLUSION

Dans ce projet, deux améliorations potentielles à la TPSC ont été testées sur le modèle d'étalement, sous la lumière de la longueur de corrélation magnétique et la self-énergie en fréquences de Matsubara. On a trouvé une amélioration nette en utilisant la double-occupation provenant d'un calcul de DMFT paramagnétique à un site, améliorant quantitativement l'accord avec les résultats exacts par Monte-Carlo. La self-énergie est non seulement qualitativement supérieure à celle calculée par la TPSC traditionnelle, mais elle apporte aussi un accord quantitatif à haute fréquence. On propose ainsi l'approche TPSC+PDMFT+approx comme technique optimale pour ce modèle.

Pour continuer le projet, ces techniques pourront être appliquées à un ensemble de paramètres correspondant à des matériaux plus réalistes, tels que les cuprates dopés aux électrons. On pourra ainsi voir l'effet de ces changements sur le diagramme de phase prédit par le modèle, qui pourra être comparé à des résultats expérimentaux. En particulier, la ligne  $T^*$ , délimitant le pseudogap antiferromagnétique, pourra être calculée. Finalement, l'utilisation de la double-occupation de la DMFT permettra de généraliser la TPSC à l'étude de modèles plus généraux et réalistes, tel que le modèle à plusieurs bandes.

[1] H. Motzkau, [Schematic doping phase diagram of cuprate high-temperature superconductors](#).  
[2] T. Schäfer, N. Wentzell, F. Šimkovic, Y.-Y. He, C. Hille, M. Klett, C. J. Eckhardt, B. Arzhang, V. Harkov, F.-M. Le Régent, and et al., Tracking the footprints of spin fluctuations : A multimethod, multimessenger study of the two-dimensional hubbard model, [Physical Review X](#) **11**, 011058 (2021).  
[3] S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, High performance LOBPCG method for solving multiple eigenvalues of hubbard model : Efficiency of communication avoiding neumann expansion preconditioner, pp. 243–256.

[4] Y. M. Vilk and A.-M. S. Tremblay, Non-perturbative many-body approach to the hubbard model and single-particle pseudogap, [Journal de Physique I](#) **7**, 1309–1368 (1997), arXiv : cond-mat/9702188.  
[5] P. Seth, I. Krivenko, M. Ferrero, and O. Parcollet, Triqs/cthyb : A continuous-time quantum monte carlo hybridisation expansion solver for quantum impurity problems, [Computer Physics Communications](#) **200**, 274 (2016).  
[6] O. Parcollet, M. Ferrero, T. Ayrat, H. Hafermann, I. Krivenko,

- L. Messio, and P. Seth, Triqs : A toolbox for research on interacting quantum systems, *Computer Physics Communications* **196**, 398 (2015).
- [7] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, *Reviews of Modern Physics* **68**, 13, publisher : American Physical Society.
- [8] J. K. Freericks and V. Zlatić, Exact dynamical mean-field theory of the falicov-kimball model, *Reviews of Modern Physics* **75**, 1333, publisher : American Physical Society.
- [9] L. Fratino, P. Sémon, M. Charlebois, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, Signatures of the mott transition in the antiferromagnetic state of the two-dimensional hubbard model, *Phys. Rev. B* **95**, 235109 (2017).