

Compétition entre l'antiferromagnétisme et la  
supraconductivité dans le modèle de Hubbard  
appliqué aux cuprates

par

Mathieu Guillot

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

FACULTÉ DES SCIENCES  
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 16 avril 2007

# Composition du jury

*Le \_\_\_\_\_, le jury a accepté le mémoire de M. Guillot dans sa version finale.*

Prof. André-Marie Tremblay  
Département de physique  
Directeur de recherche

Prof. David Sénéchal  
Département de physique  
Co-directeur de recherche

Prof. Claude Bourbonnais  
Département de physique  
Président-Rapporteur

Prof. Mario Poirier  
Département de physique

*À mon grand-père Raymond, ainsi qu'à ma famille*

# Sommaire

Nous présentons dans ce document les résultats d'une étude théorique du diagramme de phase de l'état fondamental du modèle de Hubbard à une bande appliqué aux supraconducteurs à haute température critique, en fonction du dopage. Pour solutionner approximativement ce modèle, nous avons utilisé la théorie des perturbations inter-amas variationnelle qui permet d'effectuer une approximation non-perturbative basée sur la solution d'une fonctionnelle exacte de la self-énergie. Pour ce faire, nous avons effectué la diagonalisation exacte de 4 amas distincts allant jusqu'à 12 sites. Par rapport aux travaux antérieurs sur le sujet, ce projet contient plusieurs éléments originaux dont une étude systématique en taille en incluant le potentiel chimique de l'amas dans les paramètres variationnels, ce qui permet d'assurer la cohérence thermodynamique de nos résultats. Nous discutons aussi pour la première fois des effets de taille finie particuliers apparaissant sous dopage. Il ressort de ce travail un accord qualitatif satisfaisant avec le diagramme de phase expérimental des cuprates.

Du côté dopé aux trous, nos résultats montrent la présence d'une phase antiferromagnétique allant jusqu'à 10% de dopage, suivie d'un dôme supraconducteur de forte amplitude. Nous concluons à l'absence de phase de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice de symétrie  $d_{x^2-y^2}$  du côté dopé aux trous. Du côté dopé aux électrons, nos résultats prédisent l'existence d'une phase de coexistence qui se termine près du dopage maximal suivie d'une phase supraconductrice pour la région sur-dopée. Nos calculs montrent que le paramètre d'ordre supraconducteur est de plus forte amplitude lorsque le système est dopé aux trous, ce qui est en accord avec l'expérience. Nous concluons que le terme de saut au troisième voisin est essentiel pour reproduire correctement le diagramme de phase des cuprates du côté dopé aux trous.

# Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier mon directeur de maîtrise David Sénéchal pour m'avoir donné l'opportunité d'effectuer ce travail. Ce fut un grand plaisir de travailler avec vous et votre encadrement a favorisé mon apprentissage. Merci pour le support et la confiance que vous m'avez accordés tout au long du projet.

Je tiens également à remercier André-Marie Tremblay pour m'avoir initié au formalisme de la mécanique quantique à plusieurs particules. Merci d'avoir suivi avec intérêt l'évolution de mes travaux. Ce fut un grand plaisir de vous côtoyer au cours de ces deux années.

Merci également à Dany Plouffe, Peyman Sahebsara et Andriy Nevidomskyy pour les discussions éclairantes sur les aspects techniques de la théorie des perturbations inter-amas et son extension variationnelle. Les personnes travaillant sur un même sujet au sein d'une équipe sont des ressources forts importantes. Je tiens également à remercier le réseau québécois de calcul de haute performance (RQCHP) pour m'avoir permis d'utiliser des ressources en calcul considérable pour la réalisation de ce projet.

Je veux enfin remercier mes collègues de bureau : Charles Brillon, Dominic Bergeron et Sébastien Roy pour l'ambiance de travail positive et agréable dont j'ai pu bénéficier au cours de ces deux années. Merci à Charles Brillon pour m'avoir si souvent aidé à utiliser les outils informatiques. Merci aussi à Dominic Bergeron pour les discussions passionnées et parfois éreintantes que nous avons eu sur la mécanique quantique.

# Table des matières

|  |          |
|--|----------|
| Sommaire   | iv       |
| Table des matières                                 | vi       |
| Liste des tableaux                                 | ix       |
| Liste des figures                                  | x        |
| Notation   | xiii     |
| Introduction                                       | 1        |
| <b>1 Supraconductivité dans les cuprates</b>       | <b>3</b> |
| 1.1 Diagramme de phase des cuprates . . . . .      | 4        |
| 1.1.1 Phase antiferromagnétique isolante . . . . . | 4        |
| 1.1.2 Phase supraconductrice . . . . .             | 6        |
| 1.1.3 Phase pseudogap . . . . .                    | 7        |
| 1.1.4 Phase métallique . . . . .                   | 8        |
| 1.2 Physique des électrons corrélés . . . . .      | 9        |
| 1.2.1 Le modèle de Hubbard . . . . .               | 11       |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>2</b> | <b>Méthodologie</b>   | <b>14</b> |
| 2.1      | Théorie des perturbations inter-amas . . . . .                      | 14        |
| 2.1.1    | Rétablissement de l'invariance sous translation . . . . .           | 16        |
| 2.1.2    | Diagonalisation exacte d'un amas . . . . .                          | 17        |
| 2.1.3    | Calcul de la fonction de Green CPT . . . . .                        | 20        |
| 2.1.4    | Évaluation des quantités physiques pertinentes . . . . .            | 21        |
| 2.1.5    | Succès de la CPT . . . . .  | 23        |
| 2.2      | Principes variationnels pour systèmes corrélés . . . . .            | 23        |
| 2.2.1    | Fonctionnelle de Luttinger-Ward . . . . .                           | 24        |
| 2.2.2    | Fonctionnelle de la self-énergie . . . . .                          | 26        |
| 2.2.3    | Stratégies d'approximation . . . . .                                | 27        |
| 2.3      | Théorie des perturbations inter-amas variationnelle . . . . .       | 29        |
| 2.3.1    | Paramètres variationnels . . . . .                                  | 30        |
| 2.3.2    | Modélisation des cuprates . . . . .                                 | 31        |
| 2.3.3    | Aspects techniques . . . . .  | 32        |
| <b>3</b> | <b>Analyse des résultats</b>  | <b>36</b> |
| 3.1      | Cohérence thermodynamique du nombre moyen de particules . . . . .   | 36        |
| 3.2      | Diagramme de phase des systèmes étudiés . . . . .                   | 39        |
| 3.2.1    | Système avec amas de 4 sites . . . . .                              | 39        |
| 3.2.2    | Système avec amas de 8 sites . . . . .                              | 46        |
| 3.2.3    | Système avec amas de 10 sites . . . . .                             | 52        |
| 3.2.4    | Système avec amas de 12 sites . . . . .                             | 57        |
| 3.3      | Évolution des solutions en fonction de la taille des amas . . . . . | 64        |
| 3.3.1    | Solution normale . . . . .  | 64        |

|   |           |
|---|-----------|
| <i>Table des matières</i>   | viii      |
| 3.3.2 Solution antiferromagnétique . . . . .                            | 64        |
| 3.3.3 Solution supraconductrice . . . . .                               | 67        |
| 3.3.4 Solution de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice . | 69        |
| 3.4 Comparaison des résultats . . . . .                                 | 74        |
| <b>Conclusion</b>   | <b>77</b> |
| <b>A Cohérence thermodynamique du nombre moyen de particules</b>        | <b>79</b> |
| <b>Bibliographie</b>  | <b>82</b> |

# Liste des tableaux

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 2.1 | Champs de Weiss des solutions . . . . .                 | 31 |
| 2.2 | Paramètres utilisés pour le modèle de Hubbard . . . . . | 32 |
| 2.3 | Termes de saut présents dans les amas . . . . .         | 34 |

# Liste des figures

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1.1 | Diagramme de phase des cuprates . . . . .   | 5  |
| 1.2 | Symétrie des orbitales de cuivre et d'oxygène dans les plans $\text{CuO}_2$ . . . . .           | 6  |
| 1.3 | Structure de bande du composé $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . . . . .                               | 7  |
| 1.4 | Poids spectral du composé $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ selon ARPES . . . . . | 9  |
| 2.1 | Insertion d'un amas dans le super-réseau . . . . .  | 15 |
| 2.2 | Contour d'intégration pour le calcul des observables . . . . .                                  | 22 |
| 2.3 | Poids spectral CPT . . . . .  | 24 |
| 2.4 | Développement perturbatif de la fonctionnelle de Luttinger-Ward . . . . .                       | 25 |
| 2.5 | Espace variationnel . . . . .   | 29 |
| 2.6 | Géométrie des différents systèmes de référence utilisés. . . . .                                | 35 |
| 3.1 | Cohérence thermodynamique de la densité . . . . .   | 38 |
| 3.2 | Effet de la cohérence thermodynamique sur le grand potentiel . . . . .                          | 38 |
| 3.3 | Paramètres d'ordre en utilisant l'amas de 4 sites . . . . .                                     | 40 |
| 3.4 | Champs de Weiss en utilisant l'amas de 4 sites . . . . .  | 42 |
| 3.5 | Potentiels chimiques de l'amas en utilisant l'amas de 4 sites . . . . .                         | 43 |
| 3.6 | Comportement de l'énergie lors d'une transition de phase . . . . .                              | 43 |
| 3.7 | Construction de Maxwell en présence d'une séparation de phase . . . . .                         | 44 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.8  | Compressibilité électronique négative . . . . .  | 45 |
| 3.9  | Grands potentiels en utilisant l'amas de 4 sites. . . . .  | 47 |
| 3.10 | Paramètres d'ordre en utilisant l'amas de 8 sites . . . . .  | 48 |
| 3.11 | Champs de Weiss en utilisant l'amas de 8 sites . . . . .   | 49 |
| 3.12 | Potentiels chimiques de l'amas en utilisant l'amas de 8 sites . . . . .  | 50 |
| 3.13 | Densité d'électrons de l'amas pour la solution supraconductrice en utilisant<br>l'amas 8 sites. . . . .          | 50 |
| 3.14 | Influence des changements de secteur de l'amas de 8 sites sur le paramètre<br>d'ordre supraconducteur . . . . .  | 51 |
| 3.15 | Grands potentiels en utilisant l'amas de 8 sites . . . . .   | 53 |
| 3.16 | Paramètres d'ordre en utilisant l'amas de 10 sites . . . . .   | 54 |
| 3.17 | Champs de Weiss en utilisant l'amas de 10 sites . . . . .  | 55 |
| 3.18 | Potentiels chimiques de l'amas en utilisant l'amas de 10 sites . . . . .   | 55 |
| 3.19 | Influence des changements de secteur de l'amas de 10 sites sur le paramètre<br>d'ordre supraconducteur . . . . . | 56 |
| 3.20 | Grands potentiels des solutions obtenues en utilisant l'amas de 10 sites. . .                                    | 58 |
| 3.21 | Paramètres d'ordre en utilisant l'amas de 12 sites . . . . .   | 59 |
| 3.22 | Champs de Weiss en utilisant l'amas de 12 sites . . . . .  | 60 |
| 3.23 | Potentiels chimiques de l'amas en utilisant l'amas de 12 sites . . . . .   | 61 |
| 3.24 | Influence des changements de secteur de l'amas de 12 sites sur le paramètre<br>d'ordre supraconducteur . . . . . | 62 |
| 3.25 | Grands potentiels des solutions obtenues en utilisant l'amas de 12 sites. . .                                    | 63 |
| 3.26 | Grand potentiel de la solution normale en fonction de la taille des amas . .                                     | 65 |
| 3.27 | Champ de Weiss antiferromagnétique pour les différents amas . . . . .  | 66 |
| 3.28 | Paramètre d'ordre antiferromagnétique pour les différents amas . . . . .   | 67 |

|      |  |    |
|------|--|----|
| 3.29 | Amplitude du champ de Weiss antiferromagnétique en fonction du facteur de qualité de l'amas . . . . .      | 68 |
| 3.30 | Champ de Weiss supraconducteur pour les différents amas . . . . .  | 69 |
| 3.31 | Paramètre d'ordre supraconducteur pour les différents de amas. . . . .                                     | 70 |
| 3.32 | Champ de Weiss de la solution de coexistence pour les différents amas. .                                   | 72 |
| 3.33 | Paramètre d'ordre de la solution de coexistence pour les différents amas.                                  | 73 |
| 3.34 | Solution de coexistence et solution supraconductrice sans varier le potentiel chimique de l'amas . . . . . | 75 |
| 3.35 | Solution de coexistence et solution supraconductrice sans terme de saut au troisième voisin . . . . .      | 76 |

# Notation

$\gamma$  : Réseau original

$\Gamma$  : Super-réseau

$\gamma^*$  : Réseau réciproque de  $\gamma$

$\Gamma^*$  : Réseau réciproque de  $\Gamma$

$ZB_\gamma$  : Zone de Brillouin de  $\gamma$

$ZB_\Gamma$  : Zone de Brillouin de  $\Gamma$

$\mathbf{r}$  : Vecteur position d'un site du réseau  $\gamma$

$\mathbf{k}$  : Vecteur réciproque de  $\mathbf{r}$  élément de  $ZB_\gamma$

$\tilde{\mathbf{r}}$  : Vecteur position d'un amas

$\tilde{\mathbf{k}}$  : Vecteur réciproque de  $\tilde{\mathbf{r}}$  élément de  $ZB_\Gamma$

N : Solution normale

AF : Solution antiferromagnétique

SC : solution supraconductrice

AFSC : Solution de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice

$M'$  : Champ de Weiss antiferromagnétique

$\langle M \rangle$  : Paramètre d'ordre antiferromagnétique

$\Delta'$  : Champ de Weiss supraconducteur

$\langle \Delta \rangle$  : Paramètre d'ordre supraconducteur

$\mu$  : Potentiel chimique du réseau

$\mu'$  : Potentiel chimique de l'amas

$n$  : Densité du réseau

$n'$  : Densité de l'amas

$\chi_M(\text{AFSC})$  : Courbure du grand potentiel de la solution AFSC dans la direction du champ de Weiss antiferromagnétique.

$\chi_\Delta(\text{AFSC})$  : Courbure du grand potentiel de la solution AFSC dans la direction du champ de Weiss supraconducteur.

# Introduction

La supraconductivité est un état de la matière des plus exceptionnels qui soit puisqu'il s'agit d'une manifestation macroscopique d'un phénomène purement quantique. Sa description théorique nécessite l'utilisation des concepts de la mécanique quantique à plusieurs particules puisqu'il s'agit fondamentalement d'un phénomène collectif.

La supraconductivité fut observée pour la première fois en 1911 par Kamerlingh Onnes lors d'expériences portant sur le transport électronique à très basse température. Ses résultats montraient que sous la température critique  $T_c \approx 4.16\text{K}$ , la résistivité électrique du mercure chutait abruptement à zéro, faisant ainsi apparaître une conductivité infinie. Cette découverte lui valut le prix Nobel de physique en 1913. Plusieurs autres éléments métalliques, dont l'aluminium et le plomb, se révélèrent par la suite supraconducteurs avec des températures de transition du même ordre de grandeur que celle du mercure. Plus tard, en 1933, W. Meissner montra que l'état supraconducteur était aussi caractérisé par un état diamagnétique parfait et que l'application d'un champ magnétique suffisamment intense permettait de détruire la supraconductivité et de rétablir l'état normal.

Il fallut attendre jusqu'en 1957, 46 ans après la découverte du premier supraconducteur, pour qu'une théorie permettant d'expliquer le mécanisme microscopique de la supraconductivité soit formulée. La théorie BCS, du nom de ses auteurs, Bardeen, Cooper et Schrieffer, prédit en effet correctement toutes les caractéristiques de ces supraconducteurs en plus d'être en accord quantitatif avec les mesures expérimentales. Selon cette théorie, l'interaction électron-phonon engendre une attraction effective entre les électrons de vecteurs d'onde et de spins opposés, situés dans un intervalle d'énergie égal à l'énergie de Debye près de la surface de Fermi. Ces électrons forment alors un état lié bosonique appelé paire de Cooper. La théorie BCS montre que la condensation des paires de Cooper mène à un état quantique à N-corps plus stable que l'état normal.

La découverte des supraconducteurs organiques et à fermions lourds en 1979 ainsi que des supraconducteurs à haute température critique en 1986, a cependant contribué à modifier les conceptions, jusque là établies, de l'état supraconducteur. Les expériences effectuées sur ces matériaux ont en effet clairement démontré que les électrons se comportent différemment des prédictions de la théorie BCS, ce qui suggère qu'un mécanisme autre que l'interaction électron-phonon soit responsable de la formation des paires de Cooper. Le fait que ces supraconducteurs possèdent tous une phase magnétique à proximité de la phase supraconductrice, ainsi que la présence d'une phase de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice dans les composés organiques et les fermions lourds [1] [2], suggèrent fortement que l'interaction électron-électron, peut-être par un mécanisme de fluctuations magnétiques, soit responsable de cette supraconductivité non-conventionnelle. D'un point de vue théorique, les systèmes à électrons fortement corrélés sont dans la majorité des cas extrêmement difficiles à résoudre. Le système le plus simple qui soit permettant de modéliser des électrons en interaction sur un réseau cristallin est le modèle de Hubbard. Ce modèle est pressenti pour contenir les ingrédients physiques nécessaires pour engendrer un état supraconducteur différent de l'état BCS.

Ce travail se veut une humble contribution à l'effort collectif visant à mieux comprendre le comportement électronique des supraconducteurs à haute température critique. L'objectif central de ce projet de maîtrise fut de calculer le diagramme de phase de l'état fondamental du modèle de Hubbard en fonction du remplissage, en utilisant une structure de bande et une énergie de répulsion coulombienne applicables aux cuprates. Nous nous sommes entre autre intéressés à la possibilité d'une phase de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice. Pour ce faire, nous avons utilisé la théorie des perturbations inter-amas variationnelle qui permet, de façon approximative, l'étude des différentes phases à symétrie brisée du modèle de Hubbard.

Le premier chapitre de ce mémoire vise à présenter les propriétés électroniques importantes des supraconducteurs à haute température critique et à justifier pourquoi le modèle de Hubbard est adéquat pour décrire le diagramme de phase des cuprates. Le chapitre deux est consacré à la description détaillée de la méthode VCPT. Finalement, le dernier chapitre porte sur la présentation et l'analyse des résultats obtenus.

# Chapitre 1

## Supraconductivité dans les cuprates

C'est en 1986 que Georg Bednorz et Alex Müller, tous deux membres du centre de recherche IBM à Zürich, font la découverte du premier supraconducteur à haute température critique. Le composé  $\text{La}_{5-x}\text{Ba}_x\text{Cu}_5\text{O}_{5(3-y)}$  appartenant à la famille des cuprates, montre en effet une chute abrupte de la résistivité électronique à partir d'une température de transition  $T_c=35$  K pour une concentration de Baryum égale à  $x = 0.75$  avec  $y > 0$  [3]. Le même composé avec  $x = 1$  et  $y > 0$  devenait lui aussi supraconducteur. Cette découverte était fort surprenante puisque le matériau en question est parfaitement isolant aux conditions ambiantes et que la température de transition supraconductrice était la plus élevée jamais observée. Les composés métalliques constituaient à l'époque les seuls supraconducteurs ayant des températures de transition considérables. La découverte suscita l'enthousiasme des physiciens de la matière condensée pour la recherche d'autres composés supraconducteurs appartenant à la famille des cuprates.

L'année suivante, M. K. Wu de University of Alabama et ses collègues substituèrent le Lanthane par de l'Yttrium dans le composé de Bednorz et Müller. Ils observèrent une transition supraconductrice à une température critique  $T_c=93$ K pour le composé  $(\text{Y}_{0.6}\text{Ba}_{0.4})_2\text{CuO}_4$  [4]. Un progrès énorme venait alors d'être réalisé. Pour la première fois, un matériau devenait supraconducteur à une température supérieure à celle de l'azote liquide, un liquide de refroidissement pouvant être produit à faible coût, ouvrant ainsi la voie à des applications commerciales plus nombreuses de la supraconductivité.

Aujourd'hui le supraconducteur ayant la plus haute température de transition à pression ambiante est le composé  $\text{Hg}_{0.8}\text{Ti}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8.33}$  avec un  $T_c=139$  K [5]. Il est

possible d'augmenter la température de transition jusqu'à  $T_c=164$  K, lorsque l'on soumet le composé  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8.33}$  à des pressions de l'ordre du giga Pascals [6].

La recherche d'un matériau supraconducteur aux conditions ambiantes reste l'objectif ultime dans ce domaine de recherche et de nombreux travaux en ce sens sont en cours dans plusieurs pays. Pour atteindre ce but, il est crucial de comprendre le comportement électronique dans les supraconducteurs à haute température critique afin de mettre en évidence le mécanisme à l'origine de la supraconductivité. C'est seulement une fois cette étape franchie qu'il sera possible de suggérer des façons d'augmenter la température de transition et d'expliquer pourquoi celle-ci est si élevée dans les cuprates.

## 1.1 Diagramme de phase des cuprates

Les supraconducteurs à haute température critique possèdent plusieurs propriétés fondamentales communes que l'on croit directement liées au mécanisme de la supraconductivité. Ces composés possèdent tous une structure atomique en couche formée d'un ou de plusieurs plans cuivre-oxygène  $\text{CuO}_2$ . La conductivité électronique est d'ailleurs fortement anisotrope et confinée essentiellement à ces plans. De plus, ces supraconducteurs sont tous produits en dopant un oxyde de cuivre isolant antiferromagnétique avec des électrons ou des trous par substitution chimique. Le composé non dopé est appelé le composé parent. En variant la concentration d'électrons dans les plans cuivre-oxygène, l'ordre antiferromagnétique est détruit progressivement pour faire place à un ordre supraconducteur avec une température de transition qui dépend du remplissage. Le comportement électronique de ces supraconducteurs peut être résumé dans un seul diagramme de phase - dit universel - des cuprates, (figure 1.1).

### 1.1.1 Phase antiferromagnétique isolante

Considérons tout d'abord la phase antiferromagnétique isolante. Les expériences de spectroscopie sur les composés parents ont montré que l'hybridation des orbitales du cuivre avec ceux de l'oxygène est telle que les atomes de cuivre sont doublement ionisés, engendrant une configuration électronique  $\text{Cu}^{++} [\text{Ar}]3d^9$  avec un trou dans l'orbitale

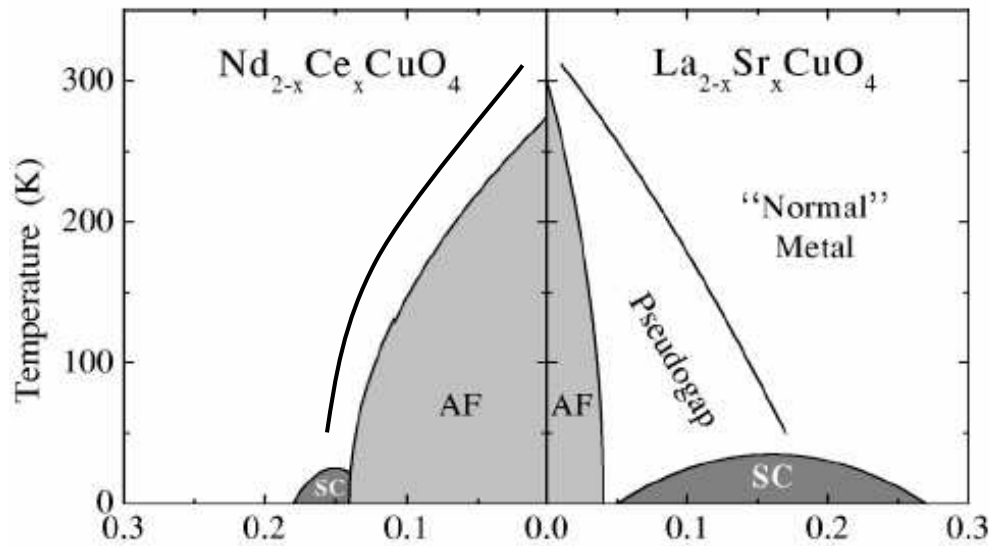


FIGURE 1.1: Diagramme de phase universel des cuprates en fonction du remplissage des plans  $\text{CuO}_2$ . [7]

$d$  [8]. La maille élémentaire de ces plans est composée d'une orbitale de symétrie  $d_{x^2-y^2}$  simplement occupée et de deux orbitales  $p_x$  et  $p_y$  doublement occupées (figure 1.2). A des températures inférieures à environ 300K, les spins non appariés associés aux orbitales  $d$  des sites de cuivre forment dans ces plans un ordre antiferromagnétique de vecteur d'onde  $(\pi, \pi)$  [8]. Lorsque l'on dope le composé parent, les porteurs de charge vont se loger dans ces orbitales  $d$ , ce qui a pour effet de perturber l'ordre antiferromagnétique. A température très basse, l'ordre à longue portée survit jusqu'à des concentrations d'environ 1.15 électrons par site de Cu alors qu'il est détruit avec seulement 1.05 trous par site de Cu. En somme, l'antiferromagnétisme est plus robuste pour les systèmes dopés aux électrons. Notons enfin que cette phase est isolante. La figure 1.3 montre la structure de bande du composé parent  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  calculé à l'aide de la théorie fonctionnelle de la densité dans l'approximation LDA (Local Density Approximation) [10]. Visiblement, ce composé devrait être un métal bidimensionnel puisque le niveau de Fermi croise le milieu d'une bande électronique correspondante aux orbitales de cuivre et d'oxygène des plans  $\text{CuO}_2$ . Bien que la théorie des bandes électroniques prédit correctement le comportement anisotrope de la conductivité dans ce matériau, elle est incapable d'expliquer le caractère isolant de la phase antiferromagnétique. Le même phénomène se produit pour les autres composés parents. Les cuprates font partie des matériaux pour lesquels la théorie des bandes électroniques ne fonctionne pas.

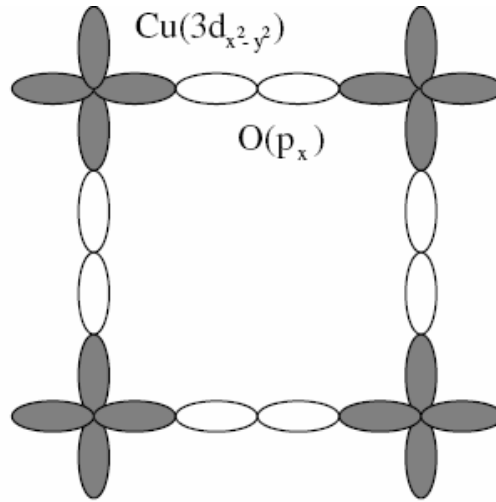
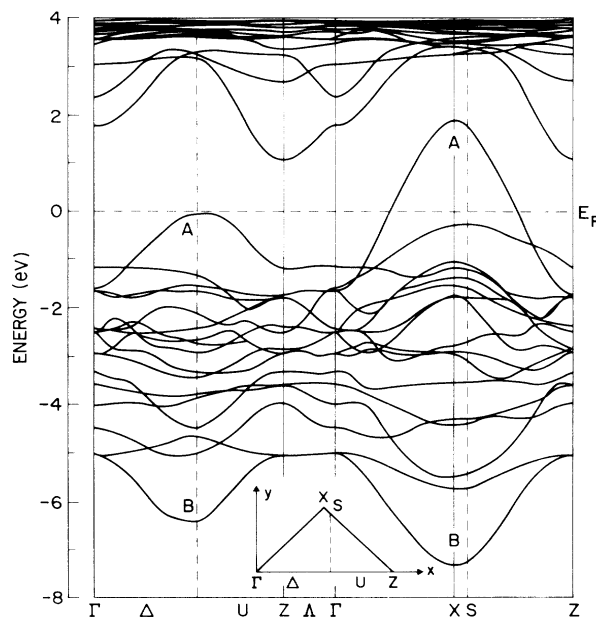


FIGURE 1.2: Orbitales  $d_{x^2-y^2}$  des atomes de cuivre et orbitales  $p_x$  et  $p_y$  des atomes d'oxygène dans les plans  $\text{CuO}_2$ . [9]

### 1.1.2 Phase supraconductrice

Les régions supraconductrices dans le diagramme de phase ont la forme d'un dôme dont le sommet correspond à la concentration de porteurs dite optimale. La région sous-dopée est définie par une concentration de porteurs inférieure à celle du dopage optimal alors que la région sur-dopée correspond à des concentrations supérieures au dopage optimal. Le diagramme de phase montre clairement que le paramètre d'ordre supraconducteur est plus fort pour les composés dopés aux trous puisque les températures critiques sont plus élevées.

Dans les cuprates comme dans les supraconducteurs conventionnels, les électrons situés près du niveau de Fermi forment, sous l'effet d'une force attractive, un état lié singulet que l'on appelle paire de Cooper. La formation des paires a pour effet de créer un gap dans le spectre électronique, que l'on associe au paramètre d'ordre de la phase supraconductrice. Dans les supraconducteurs conventionnels, le gap possède une symétrie de type  $s$  car il est invariant sous une rotation spatiale quelconque. Dans les cuprates par contre, le scénario est différent. C'est une expérience ARPES sur le composé  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  qui a d'abord mis en évidence le caractère anisotrope du paramètre d'ordre supracon-

FIGURE 1.3: Structure de bande du composé  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  calculée par LDA. [10]

ducteur [11]. Alors que le spectre électronique montrait bien la présence du gap supraconducteur pour les vecteurs d'onde associés à la direction des liens Cu-O (direction antinodale), aucun gap significatif n'était observé dans la direction nodale, à  $45^\circ$  des liens Cu-O. Deux possibilités pouvaient alors expliquer ces observations ; soit que le gap possédait une symétrie d avec des nœuds dans les directions nodales, soit il s'agissait d'une symétrie s étendue. C'est une expérience permettant de mesurer la phase du gap supraconducteur qui permet de trancher. Wollman et ses collègues mirent au point un dispositif expérimental composé d'un SQUID formé de deux jonctions Josephson YBCO-Pb selon deux directions perpendiculaires le long des liens Cu-O. Leurs résultats montrèrent un changement de phase de  $\pi$  entre ces deux directions [12]. Il était alors clair que, contrairement aux supraconducteurs conventionnels, les supraconducteurs à haute température critique possédaient un paramètre d'ordre ayant une symétrie de type  $d_{x^2-y^2}$ .

### 1.1.3 Phase pseudogap

La phase pseudogap est observée principalement chez les composés dopés aux trous dans le régime sous-dopé pour des températures supérieures à la température de transition supraconductrice. La phase persiste au dopage optimal mais disparaît dans le régime sur-

dopé. Pour les composés dopés aux trous, la phase pseudogap est définie par la disparition du poids spectral au niveau de Fermi dans les directions antinodales alors que le poids spectral reste bien définie dans la direction nodale (figure 1.4). Pour les composés dopés aux électrons, la disparition du poids spectral s'effectue dans la direction nodale avec cependant un caractère moins prononcé. En somme, dans les dopés aux trous, la phase pseudogap correspond à une ouverture partielle d'un gap ayant une symétrie  $d_{x^2-y^2}$  dans la phase normale.

L'apparition d'un gap partiel selon des directions bien déterminées dans le spectre électronique est complètement contradictoire avec les prédictions de la théorie des bandes électroniques. Selon cette théorie, uniquement deux situations sont possibles. Si le niveau de Fermi croise une bande électronique, il existe une surface de Fermi fermée à l'intérieur de la zone de Brillouin (ou qui relie un bord de la zone à un autre) et le matériau est conducteur. Dans le cas où le niveau de Fermi est situé à l'intérieur d'un gap, aucune surface de Fermi n'est présente et le matériau est isolant. Le phénomène du pseudogap est aussi en contradiction avec la théorie des liquides de Fermi. Selon cette approche, soit le matériau est isolant et aucun état à une particule n'est occupé à l'énergie de Fermi, soit le matériau est conducteur et il existe des quasiparticules au niveau de Fermi, peu importe la direction des vecteurs d'onde [13].

#### 1.1.4 Phase métallique

La phase métallique des cuprates correspond en réalité à un métal plutôt étrange. En effet, les fonctions de réponse électroniques comme la conductivité optique, la conductivité thermique et la résistivité sont caractérisées par des lois de puissance, en fonction de la température, différentes de celles observées dans les métaux ordinaires. En particulier, la résistivité électronique n'est pas  $\propto T^2$ . Ces observations sont contraires aux prédictions de la théorie des liquides de Fermi qui s'appliquent à la majorité des métaux.

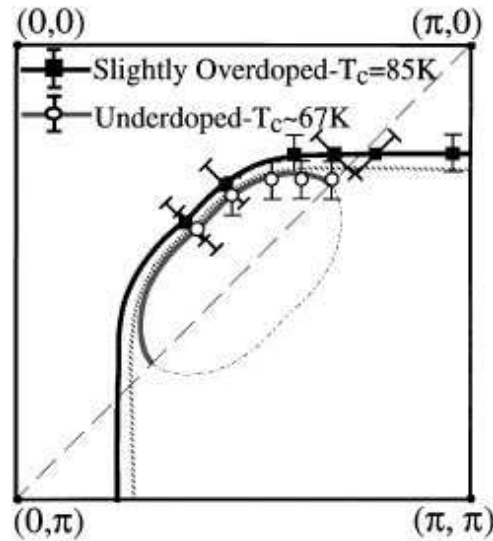


FIGURE 1.4: Poids spectral du composé  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  tel qu'observé par ARPES. [13] Aucun poids spectral est observé dans la direction antinodale pour le composé sous-dopé  $T_c = 67\text{K}$ .

## 1.2 Physique des électrons corrélés

Nous avons vu à la section précédente que la théorie des bandes électroniques et la théorie des liquides de Fermi sont toutes les deux incapables de décrire correctement le comportement électronique expérimentalement observé dans les cuprates. Ces théories ont pourtant été appliquées avec succès à la majorité des semiconducteurs et des métaux. Cet échec est principalement attribuable au fait que l'interaction électron-électron est incluse de façon minimale dans ces approches.

En effet, dans la théorie des bandes électroniques qui s'applique principalement aux semiconducteurs, le terme dominant de l'hamiltonien est le potentiel périodique créé par le réseau ionique. L'interaction électron-électron est incluse de façon minimale à l'aide d'approximations du type champ moyen ou Hartree Fock, ce qui a pour effet de remplacer le potentiel périodique ionique par un potentiel périodique effectif qui tient compte de l'interaction électron-électron moyenne. Les électrons se propagent de façon indépendante dans ce potentiel et occupent des états quantiques à une particule spécifiés par le vecteur d'onde et l'indice de bande. La théorie des liquides de Fermi, quant à elle, tient compte de l'interaction électron-électron par des considérations géométriques de l'espace des phases qui, combinées au principe de Pauli, limite grandement les interactions

entre électrons. Essentiellement, l'effet des interactions est de transformer les excitations électroniques en quasi-particules avec une masse renormalisée et un temps de vie fini. Cette approche prédit correctement la dépendance en température de la résistivité et de la chaleur spécifique électronique de la majorité des métaux, en plus d'expliquer pourquoi le modèle du gaz d'électrons constitue une bonne approximation malgré sa grande simplicité. Dans les deux cas, les électrons sont délocalisés dans le cristal et le principe d'incertitude de Heisenberg nous dit que le vecteur d'onde est un bon nombre quantique.

A l'autre extrême, les différentes phases magnétiques observées dans les matériaux à basse température sont attribuables aux fortes interactions électron-électron qui contraignent les spins électroniques à s'ordonner afin de minimiser l'énergie. Les principaux modèles théoriques permettant de décrire ces systèmes sont l'hamiltonien de Heisenberg et l'hamiltonien d'Ising dans lesquels les électrons sont localisés sur les sites du cristal et interagissent via un terme de couplage entre les spins. Fondamentalement, cette interaction origine du potentiel de Coulomb répulsif entre les électrons combiné à l'antisymétrisation de la fonction d'onde électronique à N-corps [14]. Ces modèles décrivent adéquatement les transitions de phase magnétiques ainsi que les excitations magnétiques mais leur application demeure restreinte aux matériaux isolants puisqu'aucun terme permettant aux électrons de se déplacer n'est inclu dans les hamiltoniens.

Dans les supraconducteurs à haute température critique, la faible largeur de la bande fait en sorte d'augmenter l'importance relative du terme répulsif de Coulomb entre les électrons. De plus, le fait que les électrons de conduction soient restreints à se déplacer en deux dimensions dans les plans  $\text{CuO}_2$  augmente l'importance de l'interaction électron-électron. La grande variété des phases dans le diagramme de phase est aussi un indice de la présence de fortes corrélations électroniques. Dans les cuprates, les électrons se comportent comme étant délocalisés dans la phase supraconductrice alors qu'ils exhibent un caractère localisé dans la phase isolante antiferromagnétique. Cette dualité onde-particule est au coeur du comportement électronique non-conventionnel observé dans les cuprates. Afin de décrire correctement ces systèmes, il est essentiel de considérer un hamiltonien qui prend en compte la répulsion électron-électron et qui permet à la fois aux électrons de se déplacer. Nous verrons dans ce qui suit que l'hamiltonien de Hubbard tient compte de cette physique.

### 1.2.1 Le modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard est le système le plus simple qui soit permettant de décrire le comportement des électrons en interaction sur un réseau cristallin. Cet hamiltonien a été introduit par John Hubbard en 1963 pour décrire les effets de l'interaction électron-électron dans les bandes  $d$  des métaux de transition. Il est possible de résoudre exactement ce modèle en une dimension à l'aide de l'ansatz de Bethe mais les quantités physiques pertinentes sont difficiles à extraire de la solution. L'hamiltonien de Hubbard est habituellement exprimé dans la base de Wannier où les nombres quantiques représentent des états centrés sur les sites du cristal. Pour le cas à une seule bande, celui-ci prend la forme suivante :

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.1)$$

où  $c_{j\sigma}$  est un opérateur qui détruit un électron de spin  $\sigma$  dans l'orbitale de Wannier centrée sur le site  $j$  alors que  $n_{i\downarrow} = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$  représente le nombre d'électrons de spin down dans l'orbitale  $i$ . L'amplitude de saut de l'orbitale  $i$  à l'orbitale  $j$  est représentée par l'élément de matrice symétrique  $t_{ij}$ , alors que  $U$  est le potentiel de Coulomb écranté qui correspond à l'énergie de répulsion associée à la présence de deux électrons de spins opposés dans la même orbitale. Malheureusement, les deux termes de l'hamiltonien ne commutent pas entre eux si bien qu'il est impossible de trouver une base commune dans laquelle ceux-ci sont diagonaux. Le terme à un corps permet aux électrons d'être délocalisés sur le réseau et les amplitudes de saut entre les sites sont calculées à partir de la structure de bande du matériau :

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} t_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \quad (1.2)$$

où  $N$  représente le nombre de sites du réseau. L'année suivant la découverte des cuprates supraconducteurs, P.W. Anderson suggéra l'hamiltonien de Hubbard 2-D comme modèle microscopique pertinent pour décrire le comportement des électrons dans les plans  $\text{CuO}_2$ . Pour la majorité des supraconducteurs à haute température critique, une seule bande croise le niveau de Fermi (figure 1.3) et le principe d'exclusion de Pauli nous autorise à utiliser l'hamiltonien de Hubbard à une bande pour étudier les excitations de basse énergie du système. Ce modèle est utile pour modéliser la dynamique des électrons sur le réseau associé aux orbitales  $d$  des atomes de cuivre. Les orbitales  $p$  des atomes d'oxygène

étant pleinement occupées, leur effet est simplement de renormaliser les termes de sauts et le terme de répulsion.

L'hamiltonien de Hubbard a l'avantage de donner une explication naturelle à la phase isolante antiferromagnétique des cuprates. En effet, le terme de Hubbard augmente l'énergie du système d'une quantité  $U$  lorsque deux électrons occupent le même état de Wannier. Afin de minimiser l'énergie totale, les électrons vont choisir une configuration permettant d'éviter cette double occupation, ce qui est toujours possible pour des concentrations électroniques inférieures ou égales à 1 par site de cuivre. Lorsque la bande est demi-remplie, le potentiel répulsif contraint le mouvement des électrons afin d'éviter la double occupation, ce qui a pour effet de localiser les électrons et de rendre le matériau isolant. Les matériaux ayant une bande électronique demi-remplie et isolants en raison de ce processus sont qualifiés d'isolants de Mott.

Ce modèle a de plus le mérite d'expliquer pourquoi cette phase isolante est antiferromagnétique. Considérons le cas d'une seule bande demi-remplie avec des sauts aux premiers voisins uniquement et appliquons la théorie des perturbations dégénérée à fort couplage afin de déterminer la valeur moyenne de l'énergie. Le terme de perturbation au premier ordre possède la forme suivante :

$$E^{(1)} \propto \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \langle \alpha | t c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} | \alpha \rangle \quad (1.3)$$

où le ket  $|\alpha\rangle$  représente un des nombreux états propres dégénérés du terme de Hubbard au demi-remplissage et la somme est restreinte aux premiers voisins. On constate que la correction en énergie au premier ordre est nulle puisque le terme de saut engendre nécessairement un état avec une double occupation dont le recouvrement est nul avec un état sans double occupation. Considérons maintenant la correction en énergie au deuxième ordre de la théorie des perturbations :

$$E^{(2)} \propto \sum_m \frac{\langle \alpha | t c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} | m \rangle \langle m | t c_{i'\sigma'}^\dagger c_{j'\sigma'} | \alpha \rangle}{E_\alpha - E_m} \propto \frac{t^2}{U} \quad (1.4)$$

On montre en réarrangeant les opérateurs que l'hamiltonien de Hubbard devient équivalent

à l'hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétique [15] :

$$H = \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j \quad (1.5)$$

Pour les systèmes en deux dimensions à température nulle et pour les systèmes en trois dimensions pour des températures inférieures à la température de Néel, cet hamiltonien mène à une phase antiferromagnétique ayant une valeur non nulle de la projection du spin selon l'axe de quantification sur chaque site :

$$\langle \vec{S}_i \rangle \propto e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}_i} \quad (1.6)$$

où  $\vec{Q} = (\pi, \pi)$  en deux dimensions. L'ordre antiferromagnétique permet aux électrons d'effectuer des sauts virtuels et de gagner une énergie d'échange  $J \propto t^2/U$ .

# Chapitre 2

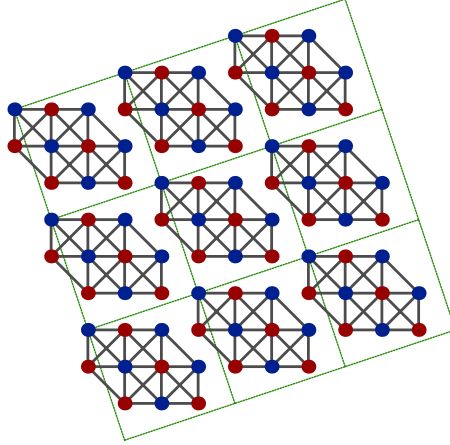
## Méthodologie

Le présent chapitre vise à décrire en détail la méthode de calcul que nous avons utilisée pour solutionner de façon approximative le modèle de Hubbard. Il s'agit de la VCPT (Variational Cluster Perturbation Theory) qui consiste à appliquer un principe variationnel rigoureux à la théorie des perturbations inter-amas. Nous présentons dans ce qui suit les principales étapes de sa dérivation en plus d'expliquer la façon de calculer les quantités pertinentes. Afin d'alléger la notation, nous allons restreindre la discussion au cas à une seule bande électronique et les indices de spin seront implicites.

### 2.1 Théorie des perturbations inter-amas

La théorie des perturbations inter-amas [16] [17] ou CPT (Cluster Perturbation Theory) est une méthode perturbative permettant le calcul approché de la fonction de Green à une particule pour l'hamiltonien de Hubbard dans la limite thermodynamique. En premier lieu, le réseau initial  $\gamma$  invariant sous translation  $\mathbf{r}$  dans l'espace réel,  $\mathbf{r} \in \gamma$ , est divisé en une série d'amas tous identiques de façon à créer un super-réseau  $\Gamma$  invariant sous translation  $\tilde{\mathbf{r}}$ ,  $\tilde{\mathbf{r}} \in \Gamma$ . Cette partition du réseau original permet de réécrire l'hamiltonien de Hubbard sous la forme suivante :

$$H = \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} H^{intra}(\tilde{\mathbf{r}}) + \sum_{\substack{\tilde{\mathbf{r}} \neq \tilde{\mathbf{r}}' \\ \tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}'}} H^{inter}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}') \quad \tilde{\mathbf{r}} \in \Gamma \quad (2.1)$$


 FIGURE 2.1: Partition du réseau original  $\gamma$  en super-réseau  $\Gamma$ .

Le premier terme représente la contribution indépendante de l'ensemble des amas à l'énergie du système. L'hamiltonien de l'amas situé à la position  $\tilde{\mathbf{r}}$  est :

$$H^{intra}(\tilde{\mathbf{r}}) = - \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} t_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} c_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}'} + U \sum_{\mathbf{R}} n_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}\uparrow} n_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}\downarrow} \quad (2.2)$$

où les nombres quantiques  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{R}'$  représentent les états de Wannier centrés autour des sites de l'amas. Le second terme de l'expression (2.1) représente les sauts entre les amas :

$$H^{inter}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}') = - \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} V_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}'} c_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}}^\dagger c_{\tilde{\mathbf{r}}'\mathbf{R}'} \quad (2.3)$$

En raison de la localité de l'interaction de Hubbard, seul le terme de saut couple les amas entre eux,  $V_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}'}$  étant l'amplitude de saut entre l'orbitale  $\mathbf{R}$  de l'amas  $\tilde{\mathbf{r}}$  et l'orbitale  $\mathbf{R}'$  de l'amas  $\tilde{\mathbf{r}}'$  (figure 2.1).

La stratégie utilisée consiste alors à choisir les amas suffisamment petits pour permettre la diagonalisation exacte de leur hamiltonien et ainsi obtenir la fonction de Green à une particule exacte de l'amas. Le terme de saut inter-amas est ensuite traité à l'aide de la théorie des perturbations. Dans la limite où les amas ne contiennent qu'un seul site, cette approche coïncide avec la théorie des perturbations à fort couplage pour l'hamiltonien de Hubbard [18]. A l'ordre le plus bas de ce développement perturbatif, la fonction de

Green à une particule du réseau  $\gamma$  s'exprime en fonction de  $\hat{G}'(\omega)$ , la fonction de Green à une particule exacte d'un amas, et du terme de saut inter-amas  $V_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$  par une expression du type RPA (Random Phase Approximation) :

$$\boxed{\hat{G}(\omega)^{-1} = \hat{G}'(\omega)^{-1} - \hat{V}} \quad (2.4)$$

où les matrices sont  $\hat{G}(\omega) \equiv \mathcal{G}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}^{\tilde{\mathbf{r}},\tilde{\mathbf{r}}'}(\omega)$ ,  $\hat{G}'(\omega) \equiv \delta_{\tilde{\mathbf{r}},\tilde{\mathbf{r}}'} G'_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\omega)$  et  $\hat{V} \equiv V_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}^{\tilde{\mathbf{r}},\tilde{\mathbf{r}}'}$ . En utilisant la propriété d'invariance sous translation du super-réseau  $\Gamma$ , on obtient l'élément de matrice :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)^{-1} = G'_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\omega)^{-1} - V_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (2.5)$$

où  $\tilde{\mathbf{k}} \in \text{ZB}_\Gamma$  et

$$V_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\tilde{\mathbf{r}}} V_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}^{0,\tilde{\mathbf{r}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \quad (2.6)$$

### 2.1.1 Rétablissement de l'invariance sous translation

La fonction de Green (2.5) est écrite dans une représentation mixte ; l'espace direct pour les amas et l'espace réciproque pour le super-réseau  $\Gamma$ . Ceci est une conséquence du traitement perturbatif qui brise l'invariance sous translation du réseau  $\gamma$ . On présente dans ce qui suit la procédure permettant de rétablir cette invariance sous translation et ainsi obtenir une fonction de Green pour le réseau original  $\gamma$  en fonction d'un seul vecteur d'onde  $\mathbf{k} \in \text{ZB}_\gamma$ . L'opérateur d'annihilation associé au site  $\mathbf{R}$  de l'amas  $\tilde{\mathbf{r}}$  s'écrit :

$$c_{\tilde{\mathbf{r}}\mathbf{R}} = \frac{1}{\sqrt{NL}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R})} \quad \mathbf{k} \in \text{ZB}_\gamma \quad (2.7)$$

où  $N$  est le nombre d'amas et  $L$  le nombre de sites dans l'amas. En l'absence d'invariance sous translation  $\mathbf{r} \in \gamma$ , la fonction de Green à un corps doit dépendre de deux vecteurs d'onde éléments de la zone de Brillouin originale  $\text{ZB}_\gamma$ , avec la restriction que  $\mathbf{k} - \mathbf{k}' \in \Gamma^*$ , le réseau réciproque de  $\Gamma$ . En laissant tomber la dépendance en fréquence, on peut écrire :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{NL} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}}'} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \mathcal{G}_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}^{\tilde{\mathbf{r}},\tilde{\mathbf{r}}'} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R})} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\tilde{\mathbf{r}}' + \mathbf{R}')} \quad \mathbf{k} \in \text{ZB}_\gamma \quad (2.8)$$

En utilisant la propriété d'invariance sous translation du super-réseau :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{N^2 L} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}'}} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\tilde{\mathbf{q}}} \mathcal{G}_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{q}}) e^{i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}'})} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R})} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\tilde{\mathbf{r}'} + \mathbf{R}')} \quad \tilde{\mathbf{q}} \in \text{ZB}_\Gamma \quad (2.9)$$

En effectuant les sommes sur  $\tilde{\mathbf{r}}$  et  $\tilde{\mathbf{r}'}$ , on obtient :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\tilde{\mathbf{q}}} \mathcal{G}_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{q}}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}'} \delta(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{q}}) \delta(\tilde{\mathbf{k}'} - \tilde{\mathbf{q}}) \quad (2.10)$$

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \mathcal{G}_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}'} \delta(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}'} \quad (2.11)$$

Chaque vecteur  $\mathbf{k}$  peut être décomposé de façon unique comme  $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$  où  $\tilde{\mathbf{k}} \in \text{ZB}_\Gamma$  et  $\mathbf{K} \in \Gamma^*$ , par conséquent :

$$\delta(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}'}) = \sum_{s=1}^L \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}_s) \quad (2.12)$$

Le vecteur d'onde  $\mathbf{q}_s$  fait partie à la fois au réseau réciproque  $\Gamma^*$  et de la zone de Brillouin originale  $\text{ZB}_\gamma$  (L valeurs possibles). Uniquement les termes diagonaux de l'équation (2.12) sont retenus. Il a été vérifié que le poids spectral associé aux vecteurs d'onde  $\mathbf{q}_s \neq 0$  est autant négatif que positif si bien que la somme de leur contribution est nulle. Étant donné que  $V(\tilde{\mathbf{k}}) = V(\mathbf{k})$  implique que  $\mathcal{G}_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}) = \mathcal{G}_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\mathbf{k})$ , on obtient alors la fonction de green CPT :

$$\boxed{\mathcal{G}_{\text{CPT}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'=1}^L \mathcal{G}_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \quad (2.13)}$$

### 2.1.2 Diagonalisation exacte d'un amas

L'avantage d'inclure la fonction de Green exacte des amas dans le formalisme de la CPT est de permettre un traitement adéquat des corrélations à courte portée. Ceci est très important puisque ce sont les corrélations à courte portée qui dominent lorsque le potentiel d'interaction est local. Pour calculer la fonction de Green d'un amas à température nulle, on doit d'abord déterminer l'état fondamental  $|\Omega\rangle$  ainsi que son énergie  $E_0$ . Or, étant donné que l'hamiltonien de Hubbard commute avec le nombre de particules de

chaque spin :  $[H, N_\uparrow] = 0$  et  $[H, N_\downarrow] = 0$ , l'état fondamental de l'amas appartient à un secteur de l'espace de Hilbert associé à un nombre précis de particules de chaque spin. La dimension de ce sous-espace pour un amas de  $L$  sites ayant  $N_\uparrow$  spins up et  $N_\downarrow$  spins down est :

$$d = \left( \frac{L!}{N_\uparrow!(L - N_\uparrow)!} \right) \left( \frac{L!}{N_\downarrow!(L - N_\downarrow)!} \right) \quad (2.14)$$

Le secteur est choisi de façon à représenter le mieux possible le remplissage du réseau. On utilise ensuite l'algorithme de Lanczos afin de déterminer les propriétés de l'état fondamental. En premier lieu, on construit une base réduite orthogonale  $|\phi_n\rangle$  à l'aide de la relation de récurrence :

$$|\phi_{n+1}\rangle = H |\phi_n\rangle - a_n |\phi_n\rangle - b_n^2 |\phi_{n-1}\rangle \quad (2.15)$$

avec

$$a_n = \frac{\langle \phi_n | H | \phi_n \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle} \quad \text{et} \quad b_n^2 = \frac{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}{\langle \phi_{n-1} | \phi_{n-1} \rangle} \quad (2.16)$$

où les conditions initiales sont  $b_0 = 0$  et  $|\phi_{-1}\rangle = 0$ , alors que  $|\phi_0\rangle$  est un état à N-corps de l'amas choisi au hasard dans le secteur considéré. L'hamiltonien possède alors une représentation tridiagonale dans cette nouvelle base lorsque celle-ci est normalisée.

$$H = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_N \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Après quelques itérations, la matrice (2.17) est successivement construite puis diagonalisée jusqu'à ce que sa plus petite valeur propre converge. L'état fondamental de l'amas  $|\Omega\rangle$  et son énergie  $E_0$  correspondent alors à la plus petite valeur propre et au vecteur propre correspondant. On doit ensuite reconstruire progressivement  $|\Omega\rangle$  à l'aide des coefficients  $\langle \Omega | \phi_n \rangle$  pour l'exprimer dans la base originale du nombre d'occupation. Une fois les propriétés de l'état fondamental obtenues, on procède au calcul de la fonction de Green à une particule de l'amas. Il est avantageux d'utiliser cette fois l'algorithme de Lanczos de bande qui est plus rapide que l'algorithme de Lanczos habituel mais qui demande beaucoup plus de mémoire [19]. Pour ce faire, il est utile de décomposer la fonction de

Green en une partie électron et une partie trou :  $G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}(z) = G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) + G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',t}(z)$  :

$$\begin{aligned} G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) &= \langle \Omega | c_{\mathbf{R}} \frac{1}{z - H + E_0} c_{\mathbf{R}'}^\dagger | \Omega \rangle \\ G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',t}(z) &= \langle \Omega | c_{\mathbf{R}'}^\dagger \frac{1}{z + H - E_0} c_{\mathbf{R}} | \Omega \rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

Ces fonctions possèdent un nombre fini de pôles situés sur l'axe réel positif et sur l'axe réel négatif respectivement. L'algorithme de Lanczos de bande est utilisé pour calculer séparément les deux parties de la fonction de Green. Cet algorithme permet de construire une base dans laquelle l'hamiltonien est représenté par une matrice  $T$  facilement diagonalisable, et ayant une structure en bande. Considérons tout d'abord l'élément de matrice suivant de la partie électron :

$$G'_{\mathbf{R}\mathbf{R}',e}(z) = \langle \Psi_{\mathbf{R}} | \frac{1}{z - H + E_0} | \Psi_{\mathbf{R}'} \rangle \quad (2.19)$$

où nous avons défini  $|\Psi_{\mathbf{R}'}\rangle \equiv c_{\mathbf{R}'}^\dagger |\Omega\rangle$ . Pour un amas composé de  $L$  sites, il existe  $L$  états  $|\Psi_{\mathbf{R}'}\rangle$  pour chaque état de spin. Une fois ces  $L$  vecteurs normalisés, on utilise ceux-ci comme vecteurs de départ dans l'algorithme Lanczos de bande pour générer une base réduite  $|\phi_i\rangle$  ainsi que les éléments de la matrice  $T$  à l'aide de la relation de récurrence [20] :

$$T_{i,i+L} |\phi_{i+L}\rangle = H |\phi_i\rangle - \sum_{j=i-L}^{i+L-1} T_{ij} |\phi_j\rangle \quad (2.20)$$

où

$$T_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle \quad (2.21)$$

Notons que contrairement à l'algorithme (2.15), on suppose ici que les états  $|\phi_i\rangle$  sont normalisés. L'hamiltonien possède la forme suivante après  $k$  itérations :



CPT s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{G}}_{\text{CPT}}(\omega) &\equiv \frac{1}{\hat{\mathcal{G}}_0^{-1} - \Sigma} = \frac{1}{\hat{G}'^{-1} - \mathbf{A}} \\ &= \frac{1}{(\mathbf{Q}\mathbf{g}\mathbf{Q}^\dagger)^{-1} - \mathbf{A}}\end{aligned}\quad (2.25)$$

où  $\hat{\mathcal{G}}_0^{-1}$  est la fonction de Green CPT sans interaction et  $\hat{G}'$ , la fonction de Green de l'amas. En utilisant la propriété matricielle  $(\mathbf{BC})^{-1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}$ , on obtient après quelques manipulations :

$$\boxed{\hat{\mathcal{G}}_{\text{CPT}}(\omega) = \mathbf{Q} \frac{1}{\mathbf{g}^{-1} - \mathbf{Q}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{Q}} \mathbf{Q}^\dagger} \quad (2.26)$$

Puisque  $\mathbf{g}^{-1} = \omega - \mathbf{\Lambda}$  avec  $\Lambda_{mn} = \delta_{mn}\omega'_m$ , les pôles de la fonction de Green CPT sont alors donnés par les valeurs propres de la matrice  $\mathbf{M} = \mathbf{\Lambda} + \mathbf{Q}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{Q}$  ayant la dimension  $2k \times 2k$  ou  $k$  est de l'ordre de 100 en pratique. Notons que pour la suite, notamment pour les équations (2.48) et (2.52), c'est à la fonction de Green (2.26) que nous ferons référence en parlant de la fonction de Green CPT puisque c'est elle qui est calculée dans la pratique.

### 2.1.4 Évaluation des quantités physiques pertinentes

Nous montrons dans ce qui suit comment calculer la valeur moyenne d'un opérateur à un corps comme le nombre de particules ou l'énergie cinétique à partir de la fonction de Green CPT. La valeur moyenne d'un opérateur à une particule quelconque est :

$$\langle O \rangle = \sum_{\beta\alpha} O_{\beta\alpha} \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle \quad (2.27)$$

Pour évaluer la valeur moyenne des opérateurs, il suffit d'intégrer la fonction de Green CPT dans le plan complexe sur un demi-cercle qui passe le long de l'axe imaginaire et qui entoure tous les pôles situés sur l'axe réel négatif (figure 2.2). De façon générale, une fonction de Green à une particule peut s'exprimer comme suit :

$$G_{\alpha\beta}(z) = \left\langle c_\alpha \frac{1}{z - H + E_0} c_\beta^\dagger \right\rangle + \left\langle c_\beta^\dagger \frac{1}{z + H - E_0} c_\alpha \right\rangle \quad (2.28)$$

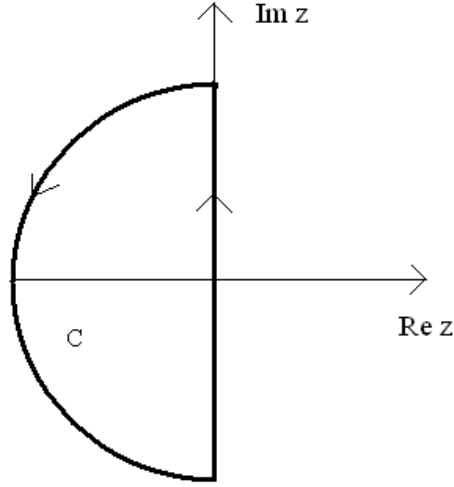


FIGURE 2.2: Contour d'intégration dans le plan complexe pour le calcul des observables.

L'application du théorème des résidus pour le contour suggéré donne directement :

$$\oint_c \frac{dz}{2\pi i} G_{\alpha\beta}(z) = \langle c_\beta^\dagger c_\alpha \rangle \quad (2.29)$$

La valeur moyenne de l'opérateur à un corps est alors :

$$\langle O \rangle = \oint_c \frac{dz}{2\pi i} \text{Tr} [OG(z)] \quad (2.30)$$

Cependant, ce contour n'est pas pratique puisque dans la limite où  $z \rightarrow \infty$ , la fonction de Green se comporte comme  $1/z$  ce qui est mal défini pour les bornes d'intégration choisies. Pour remédier à ce problème, on définit la fonction de Green suivante :

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(z) = G_{\alpha\beta}(z) - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{z - a} \text{ avec } a > 0 \quad (2.31)$$

où  $a$  est arbitraire. Cette nouvelle fonction de Green se comporte alors comme  $1/z^2$  dans la limite où  $z \rightarrow \infty$ . Le terme ajouté en (2.31) n'a pas d'effet car le pôle supplémentaire est en-dehors du contour. De plus, une fois ce terme ajouté, le demi-cercle ne contribue pas à l'intégrale dans la limite de rayon infini. Ainsi, l'intégrale peut se limiter à l'axe imaginaire. Pour simplifier, il est utile de diviser l'intégrale en une contribution de l'axe imaginaire positive et une contribution de l'axe imaginaire négative. On effectue ensuite le changement de variable  $z = i\omega$  pour le domaine positif et  $z = -i\omega$  pour le domaine

négatif et en utilisant la propriété  $G_{\alpha\beta}^*(z) = G_{\alpha\beta}(z^*)$ , on obtient alors :

$$\langle O \rangle = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \text{Tr} [O \text{Re}\{\tilde{G}(i\omega)\}] \quad (2.32)$$

### 2.1.5 Succès de la CPT

Le plus grand succès de la théorie des perturbations inter-amas est sans aucun doute l'accord avec les observations ARPES de l'évolution du poids spectral au niveau de Fermi en fonction du dopage [21]. En effet, la CPT reproduit adéquatement la disparition de l'intensité du poids spectral aux points  $(\pi, 0)$  et  $(0, \pi)$  pour les systèmes dopés aux trous ainsi que la disparition du poids spectral à l'intersection de la zone de Brillouin antiferromagnétique pour les systèmes dopés aux électrons. Ces résultats sont remarquables et suggèrent fortement que la physique des porteurs de charge dans les plans  $\text{CuO}_2$  est décrite par le modèle de Hubbard  $t - t' - t'' - U$ . De plus, les calculs du poids spectral pour le modèle de Hubbard 1-d reproduisent clairement la signature de la séparation spin-charge propre au liquide de Luttinger [16]. La CPT est exacte dans les limites  $U \rightarrow 0$  et  $t \rightarrow 0$  ainsi que dans la limite  $N_c \rightarrow \infty$ ,  $N_c$  étant le nombre de sites dans un amas. Cette approche ne permet toutefois pas l'étude des différentes phases ordonnées de l'hamiltonien de Hubbard puisque la méthode est basée sur la solution exacte d'un système fini dans lequel une brisure spontanée de la symétrie ne peut survenir. En effet, les brisures spontanées de symétrie ont lieu seulement pour les systèmes qui se trouvent dans la limite thermodynamique.

## 2.2 Principes variationnels pour systèmes corrélés

Nous avons discuté au chapitre 1 de l'inefficacité des approches à couplage faible pour sonder les systèmes électroniques fortement corrélés comme les cuprates. Les approches fonctionnelles basées sur des principes variationnels offrent une alternative en permettant de construire des approximations non perturbatives. Nous présentons dans cette section deux approches fonctionnelles adaptées aux systèmes avec interactions.

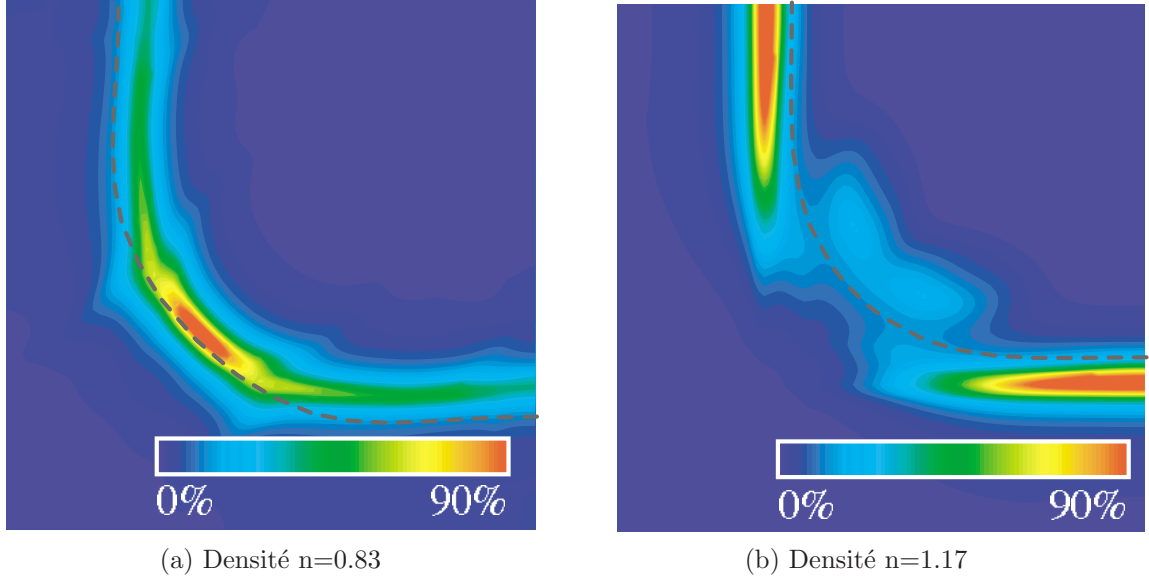


FIGURE 2.3: Poids spectral obtenu à l'aide de la CPT. Les paramètres utilisés sont :  $U = 8t$ ,  $t' = -0.3t$ ,  $t'' = 0.2t$ . On constate la disparition du poids spectral la direction antinodale du côté dopé aux trous et dans la direction nodale du côté dopé aux électrons [21].

## 2.2.1 Fonctionnelle de Luttinger-Ward

J.M. Luttinger et J.C. Ward ont publié en janvier 1960 un article [22] dans lequel ils montrent par une technique d'intégration de la constante de couplage que le grand potentiel thermodynamique à l'équilibre d'un hamiltonien avec interaction peut être calculé à partir des excitations à une particule par l'expression :

$$\Omega(\mu, T) = \Phi + \text{tr} \ln \{ \mathbf{G}_{t,U} \} - \text{tr} \{ \mathbf{\Sigma}_{t,U} \mathbf{G}_{t,U} \} \quad (2.33)$$

où  $\mu$ ,  $T$ ,  $\mathbf{G}_{t,U}$  et  $\mathbf{\Sigma}_{t,U}$  sont respectivement le potentiel chimique, la température, la fonction de Green exacte et la self-énergie exacte du système. Le premier terme  $\Phi \equiv \hat{\Phi}_U[\mathbf{G}_{t,U}]$  représente la fonctionnelle de Luttinger-Ward évaluée à la fonction de Green exacte. Originellement, cette fonctionnelle provient d'un développement perturbatif à couplage faible et prend la forme d'une série infinie de diagrammes squelettes (figure 2.4). Notons que M. Potthoff a montré en 2004 qu'il était possible de définir la fonctionnelle de Luttinger-Ward sans utiliser la théorie des perturbations [23]. L'absence de fonction de Green sans interaction  $\mathbf{G}_{t,0}$  dans cette série diagrammatique nous indique que la

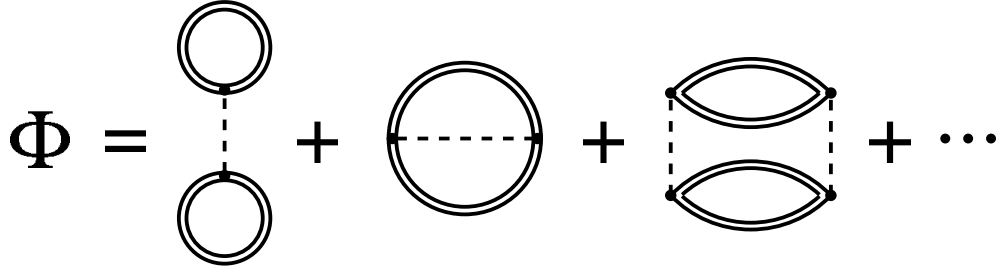


FIGURE 2.4: Développement diagrammatique de la fonctionnelle de Luttinger-Ward. Les lignes doubles représentent la fonction de Green avec interaction exacte et la ligne hachurée représente le potentiel d'interaction [23].

fonctionnelle de Luttinger-Ward est uniquement déterminée par le terme d'interaction de l'hamiltonien et complètement indépendante du potentiel à un corps. Cette propriété est connue sous le nom d'universalité et a comme conséquence que deux hamiltoniens ayant le même terme d'interaction mais des termes à un corps différents posséderont exactement la même fonctionnelle  $\widehat{\Phi}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}]$ . Dans ce qui suit, les quantités fonctionnelles sont indiquées par un chapeau alors que leur dépendance explicite est indiquée en indice.

Une seconde propriété fort utile de la fonctionnelle de Luttinger-Ward est que sa dérivée fonctionnelle par rapport à une fonction de Green à un corps définit une fonctionnelle  $\widehat{\Sigma}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}]$  elle aussi universelle à tous les ordres du développement perturbatif et qui donne la self-énergie exacte du système lorsqu'évaluée à la fonction de Green exacte.

$$\frac{1}{T} \frac{\delta \widehat{\Phi}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}} = \widehat{\Sigma}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}] \quad \Sigma_{\mathbf{t},\mathbf{U}} = \widehat{\Sigma}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}] \quad (2.34)$$

Si le système n'est pas à un point critique d'une transition de phase, la série des diagrammes squelettes est bien définie ; il n'y a pas de divergence, et cette fonctionnelle peut s'inverser localement afin d'obtenir la fonctionnelle  $\mathbf{G}_{\mathbf{U}}[\Sigma]$ . Notons que cette relation est totalement indépendante de l'équation de Dyson :

$$\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}^{-1} = \mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1} - \Sigma_{\mathbf{t},\mathbf{U}} \quad (2.35)$$

où  $\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1} = i\omega + \mu - \mathbf{t}$  est la fonction de Green sans interaction. Cette dernière équation

nous permet de réécrire le grand potentiel thermodynamique comme :

$$\Omega_{\mathbf{t},\mathbf{U}}(\mu, T) = \widehat{\Phi}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}] + \text{tr} \ln \{\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}\} - \text{tr} \{(\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1} - \mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}^{-1})\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}\} \quad (2.36)$$

Cette expression permet d'établir une approche variationnelle rigoureuse pour les systèmes avec interactions. En effet, on peut définir le grand potentiel thermodynamique comme une fonctionnelle exacte de la fonction de Green avec interaction dans laquelle  $\mathbf{G}$  est considérée comme une variable libre.

$$\boxed{\widehat{\Omega}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\mathbf{G}] = \widehat{\Phi}_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}] + \text{tr} \ln \{\mathbf{G}\} - \text{tr} \{(\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1} - \mathbf{G}^{-1})\mathbf{G}\}} \quad (2.37)$$

Lorsque cette fonctionnelle est évaluée à la fonction de Green avec interaction exacte du système, celle-ci donne le grand potentiel exact.

$$\widehat{\Omega}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}[\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}] = \Omega(\mu, T) = -T \text{tr} \ln e^{-(H(\mathbf{t},\mathbf{U}) - \mu N)/T} \quad (2.38)$$

En utilisant l'équation de Dyson et les égalités (2.34), on montre facilement que le grand potentiel est stationnaire à la solution exacte :

$$\frac{\delta \widehat{\Omega}[\mathbf{G}_{\mathbf{t},\mathbf{U}}]}{\delta \mathbf{G}} = 0 \quad (2.39)$$

C'est l'équation d'Euler de cette fonctionnelle car elle détermine la solution physique du système à partir d'un principe variationnel.

### 2.2.2 Fonctionnelle de la self-énergie

Une approche similaire permet d'utiliser ce formalisme en considérant cette fois le grand potentiel thermodynamique comme une fonctionnelle de la self-énergie. Pour ce faire, il suffit de constater que la relation (2.34) permet d'effectuer une transformation de Legendre de la fonctionnelle de Luttinger-Ward vers une fonctionnelle  $\widehat{F}_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]$  qui dépend de  $\boldsymbol{\Sigma}$  comme suit :

$$\widehat{F}_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}] \equiv \Phi_{\mathbf{U}}[\mathbf{G}_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]] - \text{tr}(\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{G}_{\mathbf{U}}[\boldsymbol{\Sigma}]) \quad (2.40)$$

La transformée de Legendre de la fonctionnelle de Luttinger-Ward définit donc une nouvelle fonctionnelle universelle de la self-énergie. En remplaçant cette dernière expression

dans (2.36) et en utilisant l'équation de Dyson, on obtient :

$$\Omega_{t,U}(\mu, T) = \text{tr} \ln \left\{ \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma_{t,U}} \right\} + \widehat{F}_U[\Sigma_{t,U}] \quad (2.41)$$

Le grand potentiel thermodynamique peut donc être considéré comme une fonctionnelle de la self-énergie.

$$\widehat{\Omega}_{t,U}[\Sigma] = \text{tr} \ln \left\{ (\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma)^{-1} \right\} + \widehat{F}_U[\Sigma] \quad (2.42)$$

Cette fonctionnelle donne alors le grand potentiel exact du système lorsque évaluée à la self-énergie physique du système  $\Omega(\mu, T) = \widehat{\Omega}_{t,U}[\Sigma_{t,U}]$ . De plus, on montre facilement que cette fonctionnelle est stationnaire à la self-énergie exacte du système.

$$\frac{\delta \widehat{\Omega}[\Sigma_{t,U}]}{\delta \Sigma} = 0 \quad (2.43)$$

C'est l'équation d'Euler de cette fonctionnelle.

### 2.2.3 Stratégies d'approximation

Ces approches variationnelles, bien qu'élégantes et rigoureuses, sont difficiles à mettre en pratique pour la majorité des hamiltoniens avec interaction car la forme de la fonctionnelle de Luttinger-Ward est inconnue. Il est en effet généralement impossible pour ces systèmes de sommer à l'infini la série de diagrammes squelettes. On doit donc se résoudre à utiliser une stratégie d'approximation.

Un premier type d'approximation consiste à remplacer la fonctionnelle exacte par une fonctionnelle approchée  $\Omega[\mathbf{X}] \rightarrow \widetilde{\Omega}[\mathbf{X}]$  sur laquelle on applique l'équation de Euler. On peut par exemple remplacer la fonctionnelle de Luttinger-Ward par une fonctionnelle connue construite par une sommation partielle des diagrammes de Feynman. On retrouve l'approximation Hartree-Fock lorsque les deux premiers diagrammes de la figure 2.4 sont conservés. Ce type d'approximation a l'avantage d'être cohérent au point de vue de la thermodynamique mais demeure restreint au régime de faible couplage. De plus, il n'existe aucun principe général permettant de favoriser un type d'approximation par rapport à un autre.

Une meilleure stratégie d'approximation récemment proposée [23] permet, par l'intro-

duction du concept de système de référence, de conserver la forme exacte de la fonctionnelle. Considérons un système qu'il est possible de résoudre exactement et ayant le même potentiel d'interaction que le système à l'étude mais un potentiel à un corps arbitraire. Ce système de référence est alors décrit par l'hamiltonien  $H = H_0(\mathbf{t}') + H_1(\mathbf{U})$  et la fonctionnelle de la self-énergie pour ce système s'écrit alors

$$\Omega_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}[\Sigma] = \text{tr} \ln \left\{ (\mathbf{G}_{\mathbf{t}', 0}^{-1} - \Sigma)^{-1} \right\} + \widehat{F}_{\mathbf{U}}[\Sigma] \quad (2.44)$$

Le système considéré et le système de référence partageront la même fonctionnelle  $\widehat{F}_{\mathbf{U}}[\Sigma]$  puisque celle-ci est universelle. En isolant  $\widehat{F}_{\mathbf{U}}[\Sigma]$  dans (2.44) et en remplaçant dans (2.42), on obtient :

$$\boxed{\widehat{\Omega}_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\Sigma] = \text{tr} \ln \left\{ (\mathbf{G}_{\mathbf{t}, 0}^{-1} - \Sigma)^{-1} \right\} + \widehat{\Omega}_{\mathbf{t}', \mathbf{U}}[\Sigma] - \text{tr} \ln \left\{ (\mathbf{G}_{\mathbf{t}', 0}^{-1} - \Sigma)^{-1} \right\}} \quad (2.45)$$

Jusqu'ici, la forme de la fonctionnelle est toujours exacte et  $\widehat{\Omega}_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\Sigma]$  demeure stationnaire à la solution physique du système. L'approximation retenue consiste alors à restreindre le domaine de variation de la self-énergie aux self-énergies physiques du système de référence. Puisque  $\mathbf{U}$  est fixe, la self-énergie dépendra uniquement du terme à un corps du système de référence,  $\Sigma(\mathbf{t}')$ . Varier la self-énergie pour trouver les points stationnaires est équivalent à varier  $\mathbf{t}'$ . En pratique, il est seulement possible de varier  $\mathbf{t}'$  sur un nombre fini de paramètres. La fonctionnelle devient donc une fonction et la dérivée fonctionnelle devient une dérivée partielle.

$$\widehat{\Omega}_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}[\Sigma(\mathbf{t}')] \longrightarrow \Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}(\mathbf{t}') \quad (2.46a)$$

$$\frac{\delta \widehat{\Omega}[\Sigma_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}]}{\delta \Sigma} = 0 \longrightarrow \frac{\partial \Omega_{\mathbf{t}, \mathbf{U}}(\mathbf{t}')}{\partial \mathbf{t}'} = 0 \quad (2.46b)$$

On cherche alors la valeur des termes à un corps du système de référence permettant d'obtenir les points stationnaires du potentiel thermodynamique. Conceptuellement, ce type d'approximation est meilleur car il permet de conserver la forme exacte de la fonctionnelle et qu'il existe une façon systématique d'améliorer l'approximation, soit en augmentant le domaine de variation de la fonctionnelle.

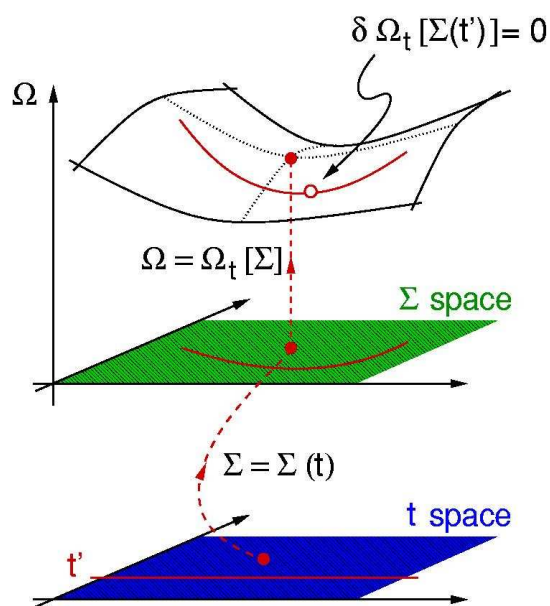


FIGURE 2.5: Un point stationnaire du grand potentiel correspond à un point précis dans l'espace des paramètres variationnels.

## 2.3 Théorie des perturbations inter-amas variationnelle

L'objectif principal du projet fut d'étudier la compétition entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle de Hubbard appliqué aux cuprates, en fonction du dopage. Pour solutionner approximativement ce modèle, nous avons utilisé la théorie des perturbations inter-amas variationnelle ou VCPT (Variational Cluster Perturbation Theory) [24]. Cette approche consiste à appliquer, à la théorie des perturbations inter-amas, la seconde approximation proposée à la sous-section 2.2.3. La méthode CPT constitue en effet un cadre adéquat pour ce type d'approximation puisqu'elle incorpore déjà dans son formalisme la solution exacte d'un amas pouvant être considéré comme le système de référence. L'application de l'expression (2.45) au système CPT permet alors d'exprimer le grand potentiel  $\gamma$  comme une fonctionnelle exacte de la self-énergie de l'amas :

$$\Omega_{t,U}[\Sigma] = \text{tr} \ln \{(\mathcal{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma)^{-1}\} + \widehat{\Omega}'_{t,U}[\Sigma] - \text{tr} \ln \{(\mathbf{G}'_{t,0}^{-1} - \Sigma)^{-1}\} \quad (2.47)$$

où  $\mathcal{G}_{\mathbf{t},0}$  et  $\mathbf{G}'_{\mathbf{t}',0}$  sont respectivement les fonctions de Green sans interaction du réseau et de l'amas. Comme nous l'avons expliqué, l'approximation retenue consiste à restreindre le domaine de variation de la fonctionnelle aux self-énergies physiques du système de référence, ce qui revient en pratique à définir l'espace variationnel comme étant l'espace multidimensionnel obtenu en variant l'ensemble des termes à un corps de l'amas, tous rassemblés sous le symbole  $\mathbf{t}'$ . La fonctionnelle de la self-énergie devient alors une fonction d'un nombre fini de paramètres.

$$\boxed{\Omega(\mu, \mathbf{t}') = \text{tr} \ln \{\mathcal{G}_{\text{CPT}}(\mu, \mathbf{t}')\} + \Omega'(\mathbf{t}') - \text{tr} \ln \{\mathbf{G}'(\mathbf{t}')\}} \quad (2.48)$$

Pour améliorer la qualité de l'approximation, on doit nécessairement élargir l'espace variationnel du grand potentiel. On peut alors ajouter à l'hamiltonien des amas, des hamiltoniens à un corps champs de Weiss simulant différentes phases à symétrie brisée. Cette option est avantageuse puisqu'elle permet d'étudier les phases à symétrie brisée du modèle de Hubbard tout en tenant compte des corrélations à courte portée. De plus, pour un espace variationnel donné, on est en droit de s'attendre à ce que la solution trouvée soit plus proche de la solution exacte lorsque la taille de l'amas augmente.

### 2.3.1 Paramètres variationnels

Pour notre étude, nous avons utilisé 3 hamiltoniens champs de Weiss différents ce qui donnent accès à 4 phases distinctes; soit une phase normale, antiferromagnétique, supraconductrice, ainsi qu'une phase de coexistence homogène antiferromagnétique et supraconductrice. La phase normale consiste à introduire un hamiltonien représentant l'énergie associée au nombre d'électrons de l'amas :

$$W_N(\mu') = -\mu' \sum_{\mathbf{R}\sigma} n_{\mathbf{R}\sigma} \quad (2.49)$$

Le potentiel chimique correspondant est alors traité de façon variationnelle. Nous allons montrer à la section 3.1 que ce terme permet d'assurer la cohérence thermodynamique du nombre moyen de particules sur le réseau. La seconde solution considérée correspond à un état antiferromagnétique de vecteur d'onde  $\mathbf{Q}=(\pi, \pi)$ , tel qu'observé expérimentalement dans les cuprates. L'hamiltonien champ de Weiss pour cette phase prend la forme sui-

vante :

$$W_{AF}(M') = M' \sum_{\mathbf{R}\sigma} (n_{\mathbf{R}\sigma} - n_{\mathbf{R}-\sigma}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \quad (2.50)$$

où la variable  $M'$  représente l'amplitude du champ de Weiss. Pour la phase supraconductrice, l'hamiltonien champ de Weiss s'exprime comme suit :

$$W_{SC}(\Delta') = \Delta' \sum_{\mathbf{R},\mathbf{R}'} \frac{\eta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}}{2} (c_{\mathbf{R}\uparrow} c_{\mathbf{R}'\downarrow} + c_{\mathbf{R}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{R}\uparrow}^\dagger) \quad (2.51)$$

où  $\Delta'$  est l'amplitude du champ de Weiss et où la somme est restreinte aux premiers voisins. Le terme  $\eta_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$  représente le facteur de forme de symétrie  $d_{x^2-y^2}$ , égale à  $+1(-1)$  selon que la direction  $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$  est selon  $x(y)$ . Finalement, la dernière solution considérée correspond à un état de coexistence homogène antiferromagnétique et supraconducteur où les trois champs de Weiss précédents sont variés simultanément. Nous résumons au tableau 2.1 les paramètres variationnels pour les quatre solutions considérées.

| Solutions           | $W_N$ | $W_{AF}$ | $W_{SC}$ |
|---------------------|-------|----------|----------|
| Normale             | ×     |          |          |
| Antiferromagnétique | ×     | ×        |          |
| Supraconductrice    | ×     |          | ×        |
| Coexistence         | ×     | ×        | ×        |

TABLEAU 2.1: Spécification des paramètres variationnels présents dans chaque solution.

### 2.3.2 Modélisation des cuprates

Les paramètres microscopiques de l'hamiltonien de Hubbard que nous avons utilisés pour nos calculs ont été choisis de façon à modéliser le plus correctement possible le comportement des électrons dans la bande électronique croisant le niveau de Fermi des cuprates. Nous avons vu que cette bande provient de l'hybridation des orbitales de cuivre et d'oxygène des plans  $\text{CuO}_2$ . Nos calculs visent donc à modéliser le comportement électronique dans cette bande à fort caractère 2-D en considérant un réseau  $\gamma$  bidimensionnel infini. Pour la partie à une particule de l'hamiltonien, nous avons utilisé des termes de saut allant jusqu'au troisième voisin qui sont extraits d'un calcul LDA de la structure de bande du composé  $\text{YBaCuO}$  [25]. Le terme de saut au second voisin est

essentiel puisqu'il permet de briser la symétrie particule-trou de l'hamiltonien de Hubbard. De plus, l'étude utilisant la CPT, citée à la sous-section 2.1.5, a montré que le terme de saut au troisième voisin doit nécessairement être pris en compte pour reproduire adéquatement les données expérimentales du pseudogap. Pour ce qui est du terme de Hubbard, nous avons utilisé la valeur généralement admise  $U = 8t$  [26] qui correspond à une énergie de répulsion coulombienne comparable à la largeur de bande. Le tableau 2.2 résume la valeur des paramètres utilisés.

| $U/t$ | $t'/t$ | $t''/t$ |
|-------|--------|---------|
| 8     | -0.3   | 0.2     |

TABLEAU 2.2: Paramètres utilisés dans le modèle de Hubbard

### 2.3.3 Aspects techniques

Dans la pratique, les calculs sont effectués comme suit : pour une solution donnée et un potentiel chimique fixe du réseau  $\gamma$ , on cherche la configuration des champs de Weiss qui rend stationnaire l'équation (2.48). Le grand potentiel est alors évalué à ces points stationnaires pour ce potentiel chimique.

$$\Omega(\mu) = \text{Tr} \ln \{ \mathcal{G}_{\text{CPT}}(\mu, \mathbf{t}_s) \} + \Omega'(\mathbf{t}_s) - \text{tr} \ln \{ \mathbf{G}'(\mathbf{t}_s) \} \quad (2.52)$$

Les calculs sont effectués pour plusieurs potentiels chimiques ce qui permet d'obtenir les solutions pour différentes concentrations d'électrons dans le système. En comparant finalement le grand potentiel de chaque solution, on peut déterminer le diagramme de phase du système. Lorsqu'une solution possède un champ de Weiss non nul, le paramètre d'ordre associé est alors calculé en prenant la valeur moyenne de l'hamiltonien champ de Weiss divisé par l'amplitude de ce dernier :  $\langle W(h)/h \rangle$ . Cette valeur moyenne s'obtient directement de la fonction de Green CPT par la méthode décrite à la sous-section 2.1.4. Notons enfin qu'en présence de supraconductivité, il convient d'utiliser le formalisme de Nambu en définissant des nouveaux opérateurs comme suit :

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow} &\equiv c_{i1} \\ c_{i\downarrow}^\dagger &\equiv c_{i2} \end{aligned} \quad (2.53)$$

Formellement, il s'agit d'une transformation canonique qui préserve les relations d'anti-commutation et qui permet de redonner une forme normale à l'hamiltonien. Par ailleurs, on peut conjecturer, à partir de principes thermodynamiques que le grand potentiel aux points stationnaires doit être concave dans la direction du potentiel chimique de l'amas et convexe dans la direction des champs de Weiss pour assurer la stabilité des solutions. Cependant, aucune preuve formelle permettant de démontrer cette conjecture n'a été formulée et la théorie prédit que tous les points stationnaires doivent être considérés. Néanmoins, nous avons pris soin d'indiquer sur les figures les régions où la nature de la courbure des points stationnaires change et nous discuterons de cet aspect lors de l'analyse des résultats.

### Diagonalisation de l'amas

La diagonalisation exacte de l'amas dans le cadre de la VCPT est quelque peu modifiée par rapport à la séquence proposée à la sous-section 2.1.2 pour la méthode CPT. Tout d'abord, puisque la méthode VCPT utilise le formalisme grand-canonique, il est nécessaire pour les solutions normale et antiferromagnétique de varier la concentration d'électrons dans l'amas à mesure que le potentiel chimique du réseau varie. On doit alors diagonaliser l'ensemble des secteurs de l'espace de Hilbert et choisir celui ayant le plus bas grand potentiel pour construire l'état fondamental. D'autre part, pour la solution supraconductrice et la solution de coexistence, le nombre de particules n'est pas conservé mais la projection du spin selon l'axe de quantification  $S_z$  l'est. L'espace de Hilbert considéré est alors la somme directe des espaces à  $N_\uparrow = N_\downarrow$ , pour des valeurs paires de  $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ . L'état fondamental de l'amas appartient alors au secteur  $S_z = 0$  de l'espace de Hilbert et l'état de départ dans l'algorithme de Lanczos est choisi de façon aléatoire parmi ce secteur.

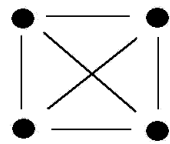
### Les amas

Les calculs ont été effectués en utilisant 4 amas bidimensionnels composés de 4, 8, 10 et 12 sites qui sont illustrés à la figure 2.6. Le tableau 2.3 résume les différents termes de saut présents dans chaque amas. On constate notamment que l'amas de 4 sites ne contient aucun terme de saut aux deuxièmes voisins alors que les autres amas en contiennent quelques uns. Ceci n'influence cependant pas énormément les résultats puisque ces termes de saut

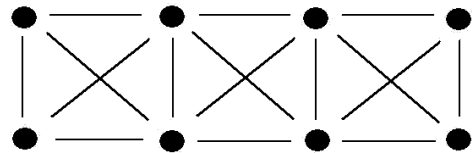
sont de toutes manières présent dans  $\mathcal{G}_{t,0}^{-1}$ . Notons que l'utilisation d'amas plus grands ne signifie pas nécessairement une amélioration de la qualité du système de référence. En effet, la façon dont l'amas s'insère dans le réseau a aussi une importance. On peut définir le facteur de qualité  $Q$  de l'amas comme étant la somme de la valeur des liens au carré dans les amas qui forment le réseau, divisée par le carré de la somme des liens reliant l'amas au réseau. Ce facteur est indiqué au tableau 2.3 pour chaque amas. Puisque ces amas sont relativement petits, on peut s'attendre à ce que des effets de taille finie influencent nos résultats. Un effet important survient pour les solutions normale et antiferromagnétique puisque ces hamiltoniens conservent le nombre de particules et l'état fondamental du système de référence possède alors un nombre de particules fixe et pair. Cependant, la taille finie des amas impose des restrictions sur les remplissages disponibles et limite le nombre de secteurs présents dans l'espace de Hilbert. Pour un amas de  $L$  sites,  $(L - 1)$  choix de remplissage sont disponibles lorsqu'on exclu les secteurs où l'état fondamental est dégénéré. On peut donc s'attendre à ce que cette restriction affecte l'énergie de ces solutions. En effet, l'évolution du grand potentiel de l'amas en fonction de son potentiel chimique devrait normalement avoir la forme d'une courbe continue dont la pente locale est  $-n'$ . Cependant, la restriction sur le remplissage des amas nous force à modéliser ce grand potentiel par un nombre limité de droites ayant une pente proportionnelle au nombre de particules du secteur :  $\partial\Omega'/\partial\mu' = -n'$ . Nous discuterons en détail de cet aspect lors de l'analyse des grands potentiels.

|          | $t_x$ | $t_y$ | $t'_1$ | $t'_2$ | $t''_x$ | $t''_y$ | Q        |
|----------|-------|-------|--------|--------|---------|---------|----------|
| 4 sites  | 2     | 2     | 1      | 1      | 0       | 0       | 0.426531 |
| 8 sites  | 6     | 4     | 3      | 3      | 4       | 0       | 0.590508 |
| 10 sites | 7     | 6     | 4      | 4      | 4       | 2       | 0.639241 |
| 12 sites | 9     | 8     | 6      | 6      | 6       | 4       | 0.6875   |

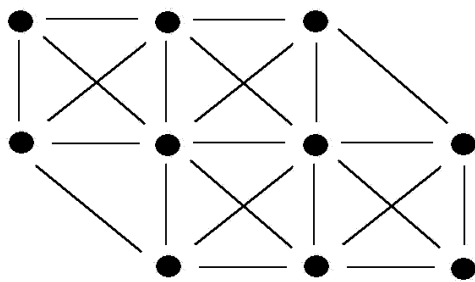
TABLEAU 2.3: Résumé des intégrales de saut présentes dans chaque amas. L'abscisse a été choisi selon la direction horizontale à la figure 2.6 et nous avons défini le terme  $t'_2$  selon la direction sud-ouest nord-est. La colonne Q représente le facteur de qualité de l'amas.



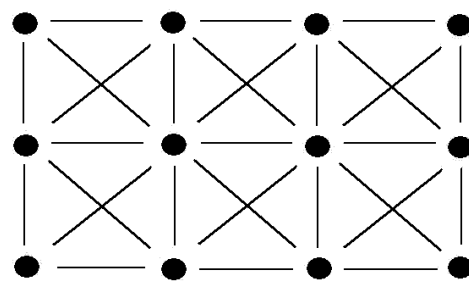
(a) Amas de 4 sites



(b) Amas de 8 sites



(c) Amas de 10 sites



(d) Amas de 12 sites

FIGURE 2.6: Géométrie des différents systèmes de référence utilisés.

# Chapitre 3

## Analyse des résultats

Le présent chapitre vise essentiellement à effectuer l'analyse des résultats que nous avons obtenus en solutionnant, avec la méthode VCPT, le modèle de Hubbard appliqué aux cuprates. Nous montrons en premier lieu que le traitement variationnel du potentiel chimique de l'amas permet d'assurer la cohérence thermodynamique de la densité moyenne d'électrons sur le réseau. Par la suite, nous examinerons en détail les solutions obtenues en utilisant les différents amas afin de déterminer le diagramme de phase prédit par chaque système. Nous discuterons à la section 3.3 de l'évolution des solutions en fonction de la taille des amas et nous terminerons enfin ce chapitre en comparant nos résultats avec d'autres calculs semblables ayant fait l'objet de publications.

### 3.1 Cohérence thermodynamique du nombre moyen de particules

Nous avons vu au chapitre 1 que la supraconductivité apparaît dans les cuprates en variant la concentration d'électrons dans les plans  $\text{CuO}_2$ . Pour décrire correctement l'évolution du comportement électronique en fonction du remplissage, il est nécessaire d'effectuer les calculs dans l'ensemble statistique grand-canonique où le système est en contact avec un réservoir de particules. Le grand potentiel;  $\Omega(\mu) = \langle H \rangle - \mu \langle N \rangle$ , représente alors l'énergie du système tandis que le potentiel chimique constitue la variable thermodynamique qui contrôle le nombre moyen de particules. Bien que la théorie

des perturbations inter-amas variationnelle soit exprimée en terme du potentiel thermodynamique, son formalisme permet de calculer la densité électronique moyenne sur le réseau selon deux façons indépendantes ; soit à partir de la dérivée du grand potentiel :

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Omega(\mu)}{\partial \mu} \quad (3.1)$$

ou à partir de la fonction de Green CPT par l'entremise du poids spectral :

$$\langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \quad (3.2)$$

où  $f(\omega)$  est la distribution de Fermi-Dirac. Le poids spectral,  $A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega)$ , est la partie imaginaire de la fonction de Green et représente la probabilité qu'un électron de spin  $\sigma$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  ait une énergie  $\hbar\omega$ . Pour garantir la cohérence thermodynamique de nos résultats, il est impératif que ces deux façons de calculer la densité électronique donnent le même résultat. En novembre 2005, M. Potthoff et al. ont montré que les expressions (3.1) et (3.2) sont équivalentes lorsque le potentiel chimique de l'amas est considéré comme un paramètre variationnel [27]. La preuve mathématique est présentée à l'annexe 1. Notons que la cohérence thermodynamique du système de référence est automatiquement satisfaite puisque ce système est résolu de façon exacte.

La figure 3.1a montre la densité d'électrons calculée à partir des équations (3.1) et (3.2) pour la solution supraconductrice de l'amas de 10 sites sans varier le potentiel chimique du système de référence. On constate que les deux méthodes donnent des résultats fort différents. La figure 3.1b montre la densité électronique pour le même système en traitant cette fois de façon variationnelle le potentiel chimique de l'amas. Les deux façons de calculer la densité donnent alors exactement le même résultat et la cohérence thermodynamique est atteinte. De plus, lorsque l'on compare les figures 3.1a et 3.1b, on constate que dans le cas où le potentiel chimique de l'amas n'est pas traité de façon variationnel, le calcul de la densité par la fonction de Green CPT est plus près du résultat thermodynamiquement cohérent que le calcul par la dérivée du grand potentiel. Ceci indique que la fonction de Green CPT constitue une bonne approximation. Les grands potentiels des deux solutions présentées à la figure 3.1 sont illustrés à la figure 3.2. On constate que le traitement variationnel du potentiel chimique de l'amas a pour effet d'augmenter le grand potentiel du système lorsque le dopage devient important.

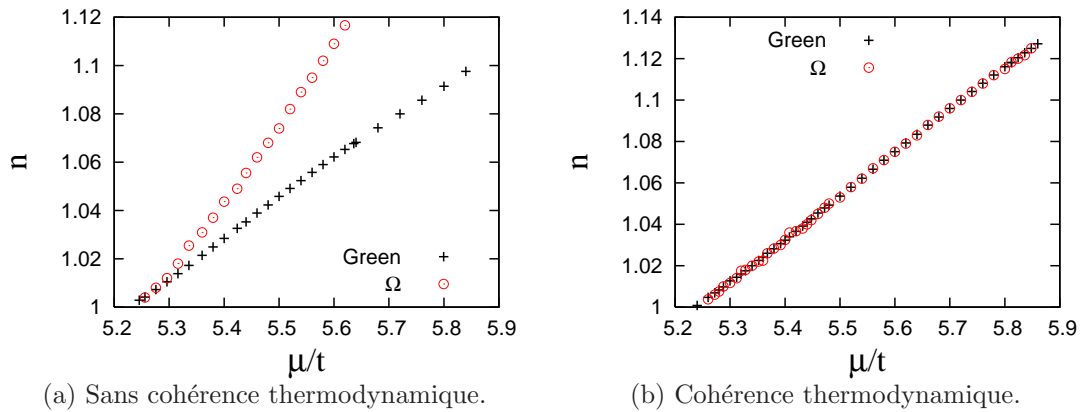


FIGURE 3.1: Densité d'électrons sur le réseau, calculée en utilisant l'équation (3.1) :  $\Omega$ , et l'équation (3.2) : Green, en fonction du potentiel chimique. Les résultats proviennent de la solution supraconductrice de l'amas de 10 sites dopée aux électrons. Le potentiel chimique de l'amas est égal au potentiel chimique du réseau à la figure a) alors que celui-ci a été traité de façon variationnelle à la figure b).

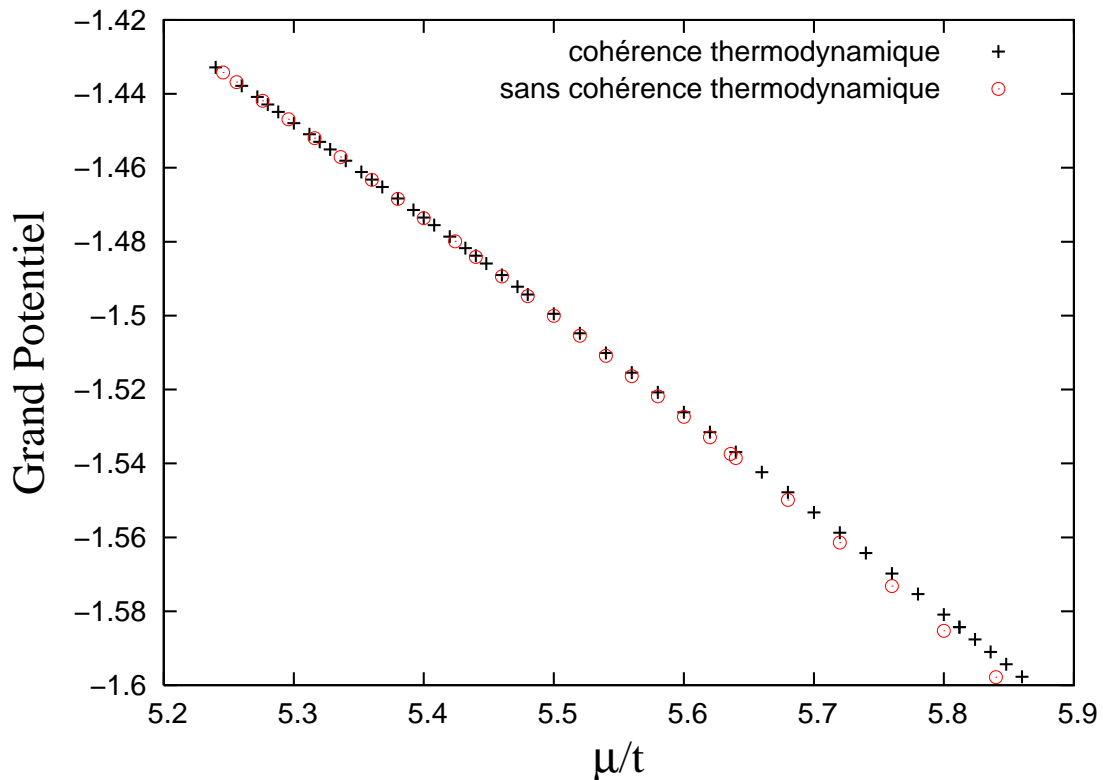


FIGURE 3.2: Comparaison entre le grand potentiel de la solution thermodynamiquement cohérente et la solution sans cohérence thermodynamique. Le traitement variationnel du potentiel chimique de l'amas a pour effet d'augmenter le grand potentiel du système.

## 3.2 Diagramme de phase des systèmes étudiés

Nous présentons dans cette section les solutions obtenues en utilisant les amas de la figure 2.6 comme systèmes de référence. Nous analyserons en détail le comportement des champs de Weiss, des paramètres d'ordre ainsi que des grands potentiels afin de déterminer le diagramme de phase prédit par chaque système. Nous avons aussi pris soin d'indiquer sous la plupart des figures, les régions où la courbure du grand potentiel aux points stationnaires, dans une direction donnée, change de signe. On peut se référer à la section nommée Notation à la page xiii pour comprendre la signification des symboles. Par exemple, à la figure 3.3, le symbole  $\chi_M(\text{AFSC}) < 0$  signifie que le grand potentiel de la solution de coexistence possède une courbure négative dans la direction du champ de Weiss antiferromagnétique  $M$ , lorsque  $n < 0.91$  et  $n > 1.27$ .

### 3.2.1 Système avec amas de 4 sites

Considérons tout d'abord les solutions obtenues en utilisant l'amas de 4 sites comme système de référence. On peut s'attendre à ce que les résultats montrent des effets de taille finie importants puisqu'il s'agit de l'amas le plus petit que nous ayons utilisé. Notons qu'uniquement trois remplissages sont disponibles pour cet amas, soit :  $n' = 0.5$ ,  $n' = 1$  et  $n' = 1.5$ . La figure 3.3 montre le comportement des paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique du réseau. On observe que la solution antiferromagnétique ne chute pas à zéro malgré un dopage important en trous et qu'aucune solution n'a été trouvée dans le secteur  $n' = 0.5$ . Du côté dopé aux électrons, la solution change de secteur autour de  $n = 1.29$  et le paramètre d'ordre chute à zéro après un dopage élevé en électrons de 48%. Essentiellement, la solution antiferromagnétique obtenue n'est pas en accord avec la phase antiferromagnétique observée dans les cuprates, voir figure 1.1. Par contre, le paramètre d'ordre antiferromagnétique de la solution de coexistence réussit à reproduire l'allure générale de la phase antiferromagnétique des cuprates. En effet, celui-ci survit jusqu'à un dopage de 11% en trous et 28% en électrons. La différence majeure entre les deux paramètres d'ordre antiferromagnétiques s'explique par le fait que l'état fondamental de la solution de coexistence est décrit par une superposition d'états appartenants

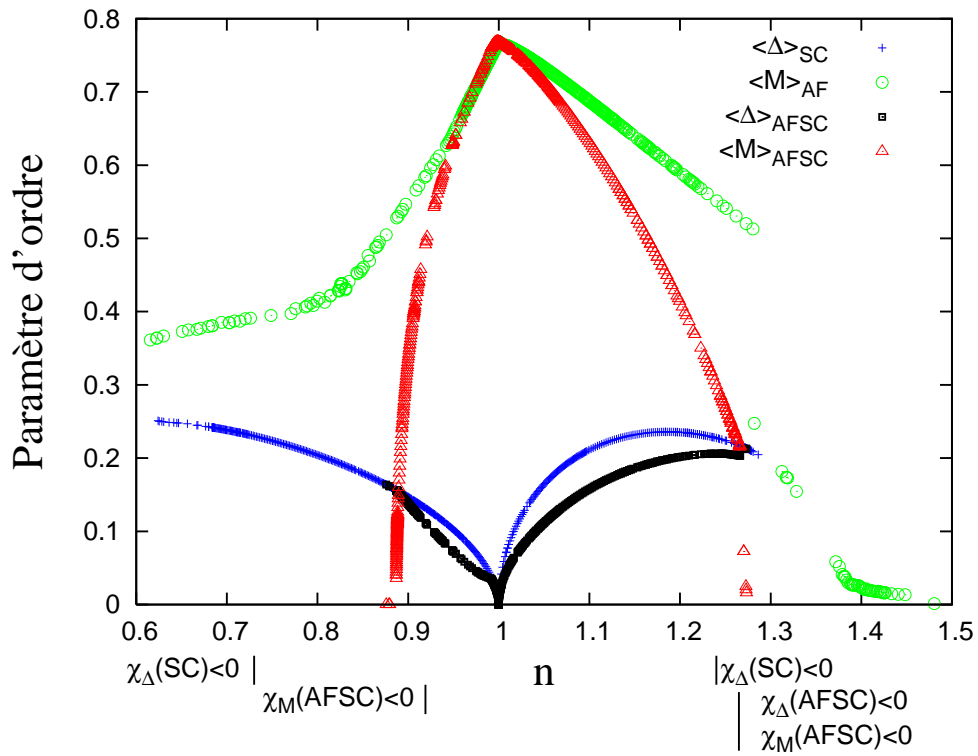


FIGURE 3.3: Paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique du réseau en utilisant l'amas de 4 sites. Nous avons indiqué sous la figure les régions où la courbure du grand potentiel aux points stationnaires change de signe.

aux différents secteurs de l'espace de Hilbert :  $n' = 0.5$ ,  $n' = 1$  et  $n' = 1.5$ . La densité de l'amas varie alors continûment ce qui permet de mieux simuler l'effet du remplissage du réseau. Par ailleurs, on remarque du côté dopé aux électrons que le paramètre d'ordre antiferromagnétique de la solution de coexistence chute à zéro à une densité légèrement supérieure à celle où le paramètre d'ordre supraconducteur est maximum. La supraconductivité est atténuée par la coexistence avec l'antiferromagnétisme. On remarque aussi, pour la solution supraconductrice et celle de coexistence, que la courbure des grands potentiels change de signe dans la direction d'un ou de plusieurs champs de Weiss un peu avant que les solutions prennent fin en fonction du dopage. Selon la conjecture, citée à la sous-section 2.3.3, sur la nature de la courbure du grand potentiel, ce comportement indique la fin de la validité de ces solutions. Notons enfin que la solution supraconductrice est présente dès que le système n'est plus demi-rempli, ce qui est contraire aux observations expérimentales.

Les figures 3.4 et 3.5 montrent respectivement le comportement des champs de Weiss et du potentiel chimique de l'amas. Le champ de Weiss de la solution antiferromagnétique demeure constant lorsque le potentiel chimique du réseau est situé à l'intérieur du gap de Mott. La solution antiferromagnétique est caractérisée du côté dopé aux électrons par un changement de secteur autour de  $\mu/t = 7.38$ , ce qui crée une discontinuité très importante dans l'évolution du champ de Weiss. Concernant la solution supraconductrice, celle-ci prend fin en raison de la divergence simultanée du champ de Weiss et du potentiel chimique de l'amas autour de  $\mu/t = 0.45$  et  $\mu/t = 6.39$ . Aucune solution n'a été trouvée au-delà de ces potentiels chimiques. Il est raisonnable de croire que ces divergences sont causées par des effets de bord attribuables à la taille finie de l'amas puisque la figure 3.5 montre que ce phénomène se produit loin des potentiels chimiques critiques où la solution normale change de secteur. On remarque aussi que le grand potentiel devient concave dans la direction du champ de Weiss supraconducteur un peu avant la divergence. A la figure 3.4, la solution de coexistence est particulièrement intéressante puisque l'on observe, lors de la transition vers la phase purement supraconductrice, que deux solutions différentes sont trouvées pour un même potentiel chimique. Ce comportement particulier indique la présence d'une séparation de phase dans le système. Nous analysons en détail la signification physique de ce phénomène dans ce qui suit.

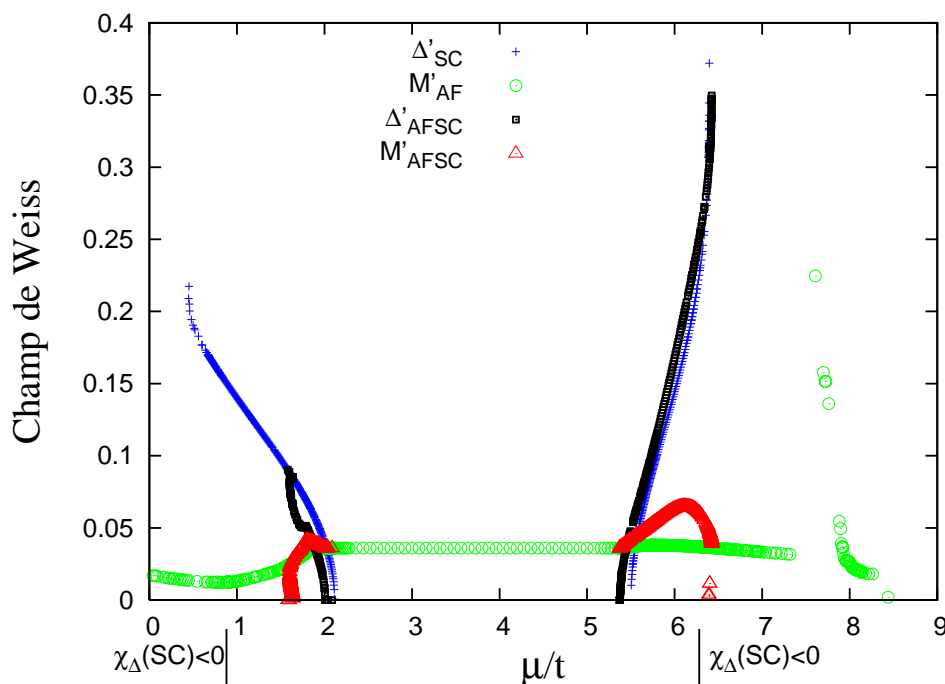


FIGURE 3.4: Champs de Weiss en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas de 4 sites.

### Séparation de phase et construction de Maxwell

Lors de la présence d'une transition de phase, il est habituellement nécessaire d'effectuer, à la transition, une construction de Maxwell afin d'assurer la stabilité des solutions. Selon les principes thermodynamiques, l'énergie d'un système doit nécessairement être une fonction convexe de la densité. Cependant, en présence d'une transition de phase, cette condition est violée et il est nécessaire d'effectuer une construction de Maxwell afin de rétablir la convexité de l'énergie à la transition 3.6. De plus, selon les principes thermodynamiques, l'inverse de la compressibilité électronique, défini à l'équation (3.3), doit nécessairement être positif ou nul afin d'assurer la stabilité d'une densité homogène de particules dans un système.

$$\kappa^{-1} \propto \frac{\partial n}{\partial \mu} \geq 0 \quad (3.3)$$

La figure 3.7 montre le comportement typique du potentiel chimique lors d'une séparation de phase. On constate que la compressibilité électronique négative fait en sorte que l'on peut associer à un même potentiel chimique, deux densités différentes, ce qui signifie que la phase est inhomogène. On doit alors procéder à une construction de Maxwell qui

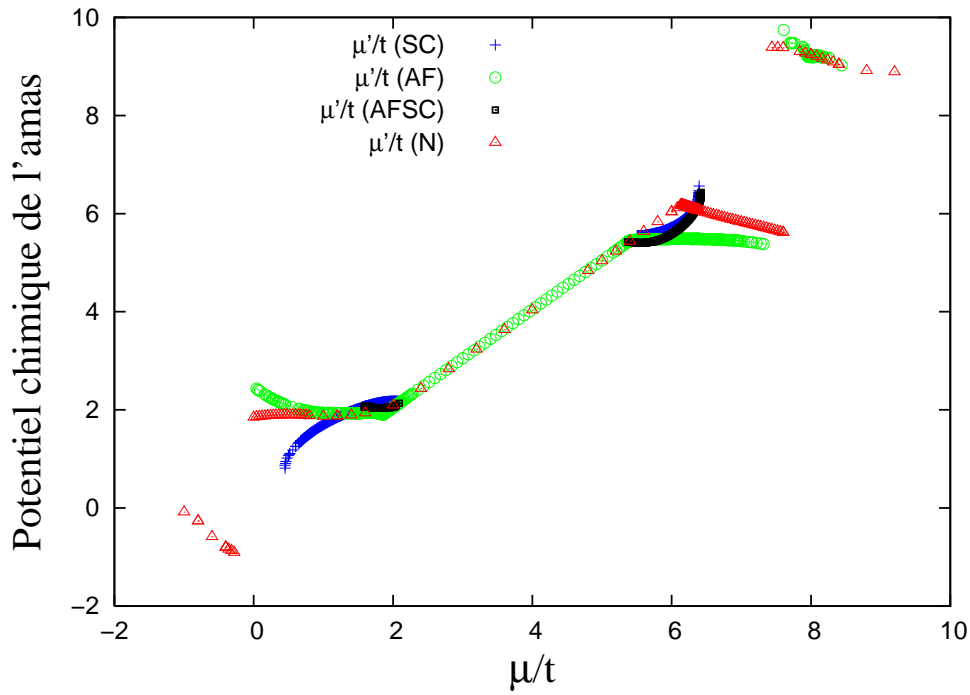


FIGURE 3.5: Potentiels chimiques de l'amas en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas de 4 sites. On remarque que la solution supraconductrice prend fin loin des potentiels chimiques critiques où la solution normale change de secteur.

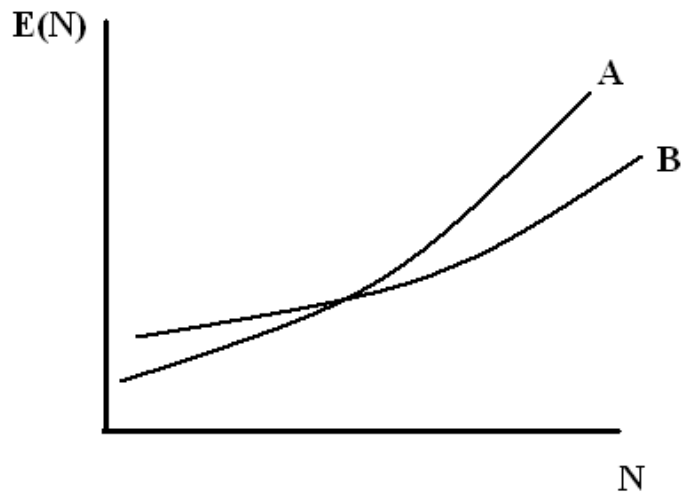


FIGURE 3.6: Comportement de l'énergie lors d'une transition de phase. On constate que l'énergie devient concave à la transition.

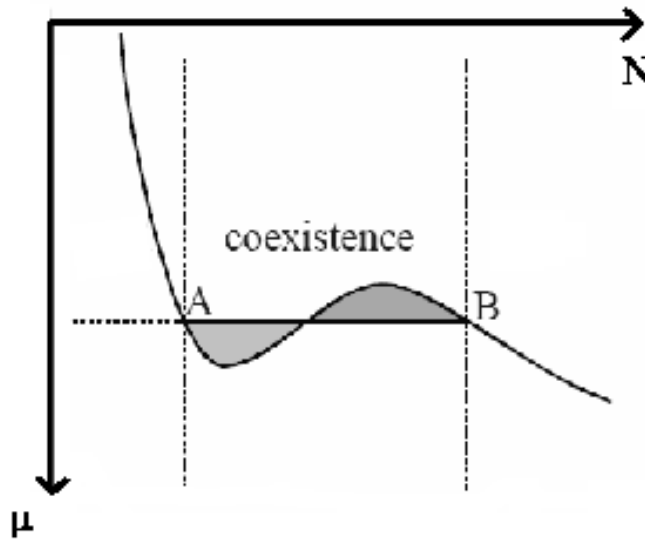


FIGURE 3.7: Construction de Maxwell en présence d'une séparation de phase.

consiste à définir le potentiel chimique de la transition par le potentiel chimique associé à la ligne AB sur la figure 3.7. Celui-ci est déterminé de façon à ce que l'aire foncée au-dessus de la droite AB soit égale à l'aire foncée en-dessous, ce qui équivaut à exiger que les deux densités associées aux points A et B sur la figure 3.7 correspondent à la même valeur du grand potentiel.

Les figures 3.8a et 3.8b montrent comment le potentiel chimique du réseau de la solution de coexistence rejoint celui de la solution supraconductrice à la transition entre les deux phases. Du côté dopé aux trous, la construction de Maxwell permet d'établir que le potentiel chimique à la transition est approximativement  $\mu \approx 1.62$ . Il est intéressant de remarquer que le grand potentiel devient concave dans la direction du champ de Weiss antiferromagnétique lorsque la compressibilité électronique est négative. Du côté dopé aux électrons, il n'est pas possible d'effectuer la construction de Maxwell puisque la solution supraconductrice se termine, en raison de la divergence simultanée du champ de Weiss et du potentiel chimique de l'amas, à un potentiel chimique inférieur au potentiel chimique maximum de la solution de coexistence. On constate néanmoins que les champs de Weiss antiferromagnétique et supraconducteur deviennent des maximums du grand potentiel pour la région où la compressibilité électronique est négative. Ces deux exemples suggèrent donc fortement que la courbure du grand potentiel aux points stationnaires est un bon indicateur de la validité des solutions, en accord avec la conjecture proposée à la sous-section 2.3.3.

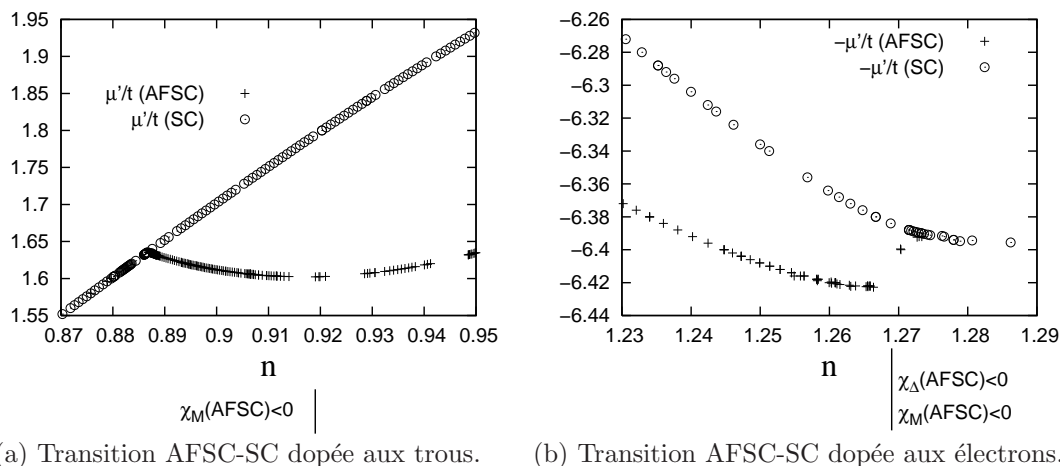


FIGURE 3.8: Potentiel chimique en fonction de la densité d'électron à la transition AFSC-SC. On constate que la courbure du grand potentiel aux points stationnaires est un bon indicateur de la validité de la solution.

Analysons comme exemple le comportement de la densité lorsque la transition est effectuée de la phase de coexistence vers la phase supraconductrice. Lorsque le système atteint le potentiel chimique de la construction de Maxwell, il est énergétiquement favorable pour celui-ci de se séparer en deux phases spatialement distinctes, soit : une phase de coexistence et une phase purement supraconductrice. Ces deux phases auront le même potentiel chimique mais posséderont chacune une densité de particules bien définie ;  $n_{AFSC}$  et  $n_{SC}$ , tel que la densité totale demeure conservée  $n = \alpha_{AFSC} n_{AFSC} + (1 - \alpha_{AFSC}) n_{SC}$ . Si la transition s'effectue à température constante, l'ajout d'électrons ou de trous dans le système permettra de varier les proportions relatives de chaque phase, tout en gardant le potentiel chimique constant, jusqu'à ce que la totalité des particules soient dans la phase purement supraconductrice [28]. Ce phénomène de séparation de phase correspond à une transition du premier ordre puisque le paramètre d'ordre antiferromagnétique n'est pas nul à la transition. Notons enfin que la séparation de phase est une conséquence de la taille finie de l'amas de 4 sites et nous verrons que ce phénomène n'est pas présent dans les autres systèmes étudiés.

### Analyse des grands potentiels

Comparons maintenant les grands potentiels des différentes solutions afin de déterminer le diagramme de phase du système. Pour illustrer le plus clairement possible les grands

potentiels, nous avons présenté les solutions, à la figure 3.9, par domaine de potentiel chimique et nous avons additionné une constante fois le potentiel chimique aux grands potentiels,  $\Omega(\mu) + \alpha\mu$ , ce qui permet d'écarter les courbes.

Lorsque le potentiel chimique est situé approximativement à l'intérieur du gap de Mott, figure 3.9c, uniquement la solution normale et la solution antiferromagnétique sont présentes et la solution antiferromagnétique est celle ayant la plus basse énergie. La région dopée aux trous est présentée aux figures 3.9a et 3.9b. À mesure que le potentiel chimique diminue par rapport à la région du gap, on constate que les solutions de plus basse énergie sont successivement : AF-AFSC-SC-AF-N. La figure 3.9a montre que la pente du grand potentiel n'est pas continue lors du changement de secteur de la solution normale. Les grands potentiels pour la région dopée aux électrons sont illustrés aux figures 3.9d et 3.9e. Lorsque le potentiel chimique augmente par rapport à la région du gap de Mott, les solutions de plus basse énergie sont successivement : AF-AFSC-AF-N. On observe à la figure 3.9e que les solutions antiferromagnétique et normale changent de secteur mais que l'état antiferromagnétique demeure de plus basse énergie.

En somme, le système utilisant l'amas de 4 sites prédit une phase isolante antiferromagnétique au demi-remplissage en accord avec les observations expérimentales sur les cuprates. Le système prédit aussi l'existence d'une phase de coexistence pour les deux types de dopage. Cependant, le fait que la phase antiferromagnétique s'étale trop loin en dopage ainsi que l'impossibilité d'obtenir une solution supraconductrice à fort dopage en raison de la divergence des champs de Weiss font en sorte que le diagramme de phase obtenu n'est globalement pas en accord avec celui des cuprates.

### 3.2.2 Système avec amas de 8 sites

Analysons maintenant les solutions obtenues en utilisant l'amas de 8 sites comme système de référence. La figure 3.10 montre le comportement des différents paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique du réseau. On constate que la solution antiferromagnétique s'étend plus loin en dopage du côté dopé aux électrons ce qui est en accord avec les observations expérimentales. Le paramètre d'ordre chute à zéro après un dopage de 9% en trou et 28% en électrons. Concernant la solution de coexistence, celle-ci est présente du côté dopé aux trous uniquement lorsque le dopage est supérieur à 1%. Du côté dopé aux électrons, le paramètre d'ordre antiferromagnétique chute à zéro à une

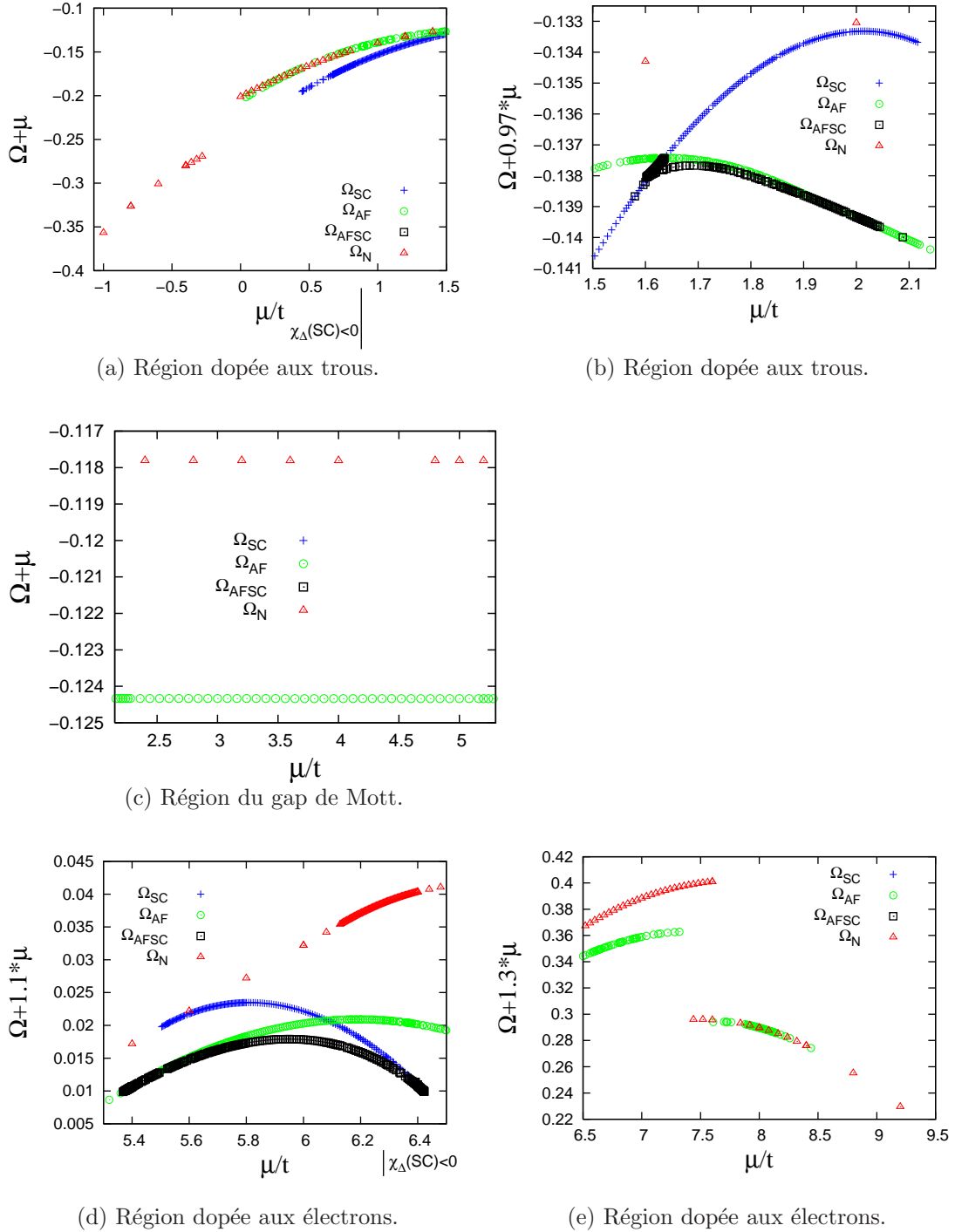


FIGURE 3.9: Grands potentiels pour les solutions obtenues en utilisant l'amas de 4 sites.

densité légèrement supérieure à celle où le paramètre d'ordre supraconducteur atteint son maximum. Pour ce qui est de la solution supraconductrice, plusieurs indications suggèrent que celle-ci n'est plus valide lorsque le dopage en trous est important. Nous avons par conséquent décidé de ne pas continuer la solution plus loin en dopage. On remarque tout d'abord que le grand potentiel devient concave dans la direction du champ de Weiss supraconducteur lorsque la densité du réseau est inférieure à  $n = 0.72$ . De plus, la figure 3.13 montre que le nombre d'électrons dans l'amas augmente lorsque le nombre d'électrons du réseau est plus petit que  $n = 0.53$ . La densité de l'amas ne représente alors plus correctement le remplissage du réseau, ce qui laisse croire que la solution cesse d'être une bonne approximation. La figure 3.14 est particulièrement instructive puisque l'on constate que le potentiel chimique critique où le comportement de la densité de l'amas cesse d'être valide coïncide exactement avec un changement de secteur de la solution normale.

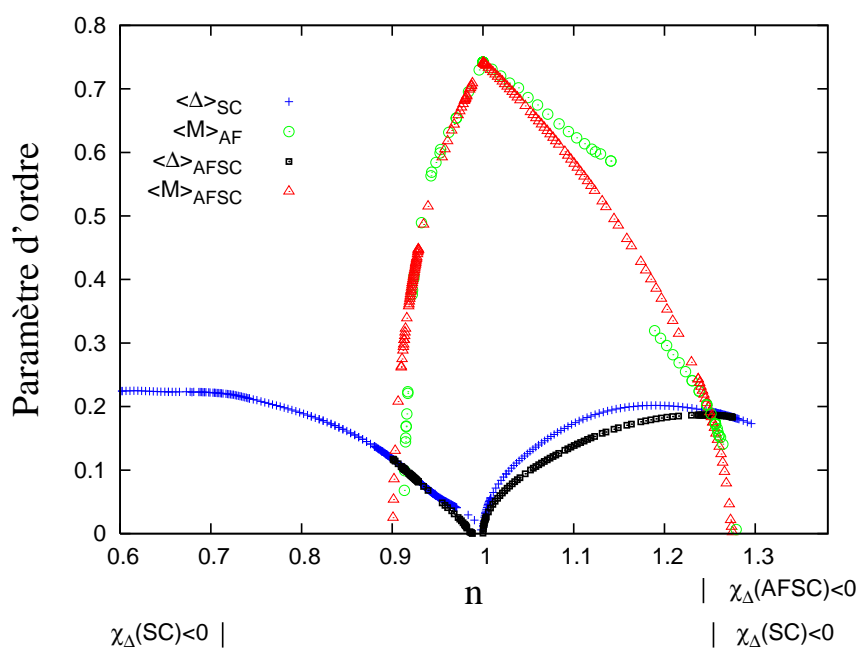


FIGURE 3.10: Paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique en utilisant l'amas de 8 sites.

Les figures 3.11 et 3.12 montrent respectivement l'évolution des champs de Weiss et du potentiel chimique de l'amas en fonction du potentiel chimique du réseau. Le champ de Weiss de la solution antiferromagnétique est constant à l'intérieur du gap de Mott et il chute rapidement à zéro du côté dopé aux trous dans le secteur  $n' = 1$ . Du côté

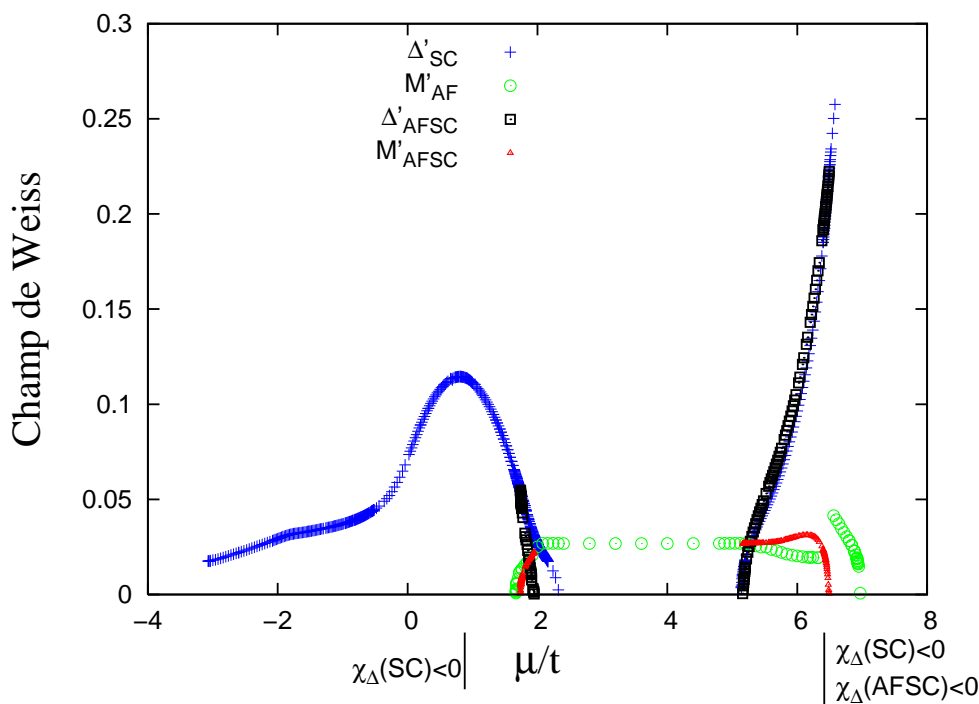


FIGURE 3.11: Champs de Weiss en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas de 8 sites.

dopé aux électrons, la solution antiferromagnétique est caractérisée par un changement de secteur autour de  $\mu/t = 6.36$ , ce qui engendre une discontinuité importante à la transition. Il est donc remarquable de constater à la figure 3.10 que le paramètre d'ordre antiferromagnétique se comporte presque exactement de la même façon que celui de la solution de coexistence malgré cette discontinuité. La solution supraconductrice, quant à elle, est caractérisée par la divergence simultanée du champ de Weiss et du potentiel chimique de l'amas du côté dopé aux électrons. On remarque que le grand potentiel devient concave dans la direction du champ de Weiss supraconducteur avant la divergence. Du côté dopé aux trous par contre, le champ de Weiss supraconducteur atteint plutôt un maximum puis diminue. La figure 3.11 montre que la solution de coexistence est présente sur une plus grande plage de potentiel chimique du côté dopé aux électrons et le champ de Weiss supraconducteur y est beaucoup plus fort.

### Analyse des grands potentiels

Les grands potentiels pour ce système sont illustrés à la figure 3.15. On observe, à la figure 3.15c, que la solution antiferromagnétique est celle ayant la plus basse énergie

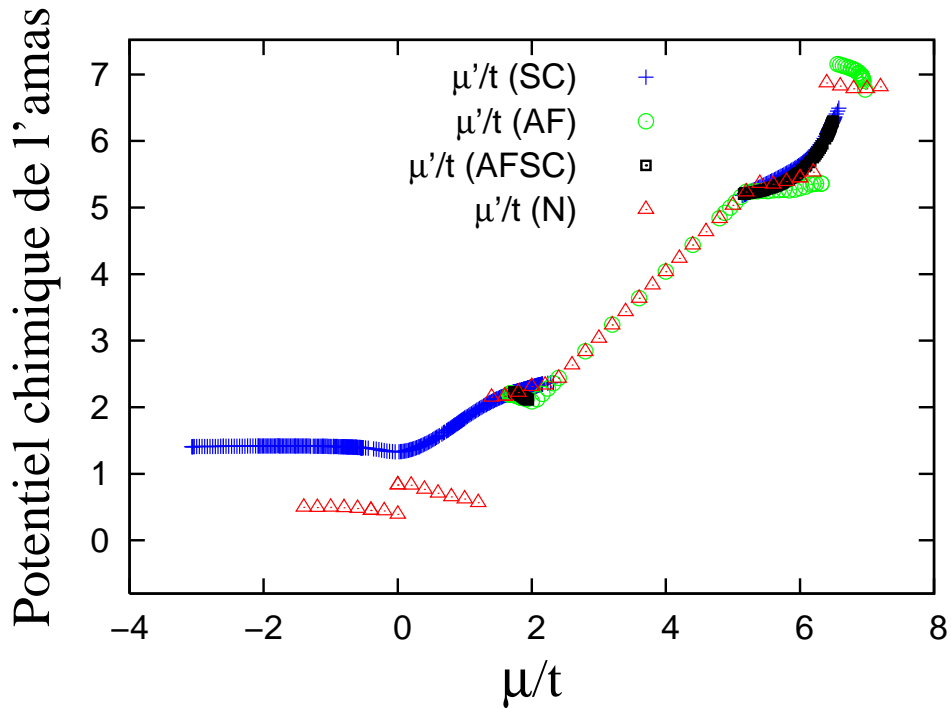


FIGURE 3.12: Potentiels chimiques de l'amas en fonction du potentiel chimique du réseau pour l'amas 8 sites. Le potentiel chimique de la solution antiferromagnétique rejoint celui de la solution normale associée au secteur  $n' = 10/8$ , lorsque le paramètre d'ordre chute à zéro.

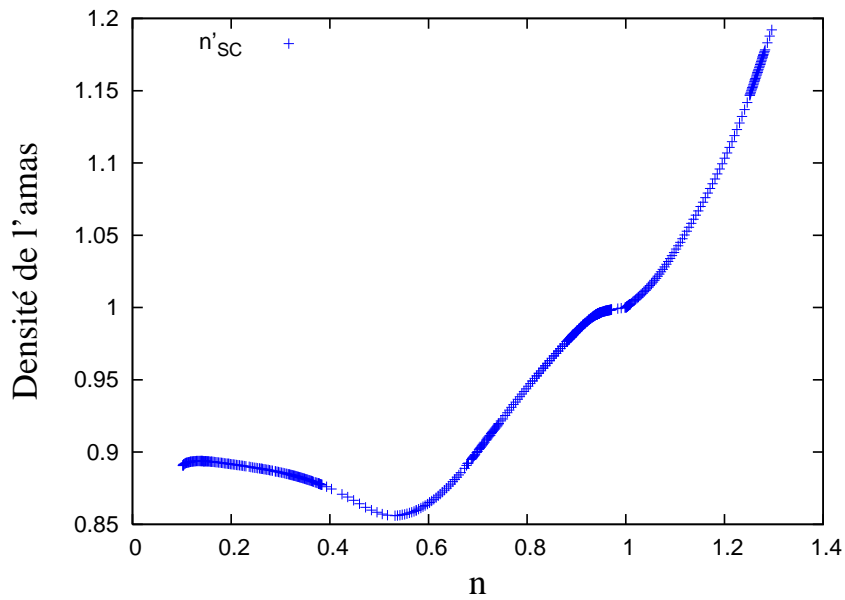


FIGURE 3.13: Densité d'électrons de l'amas en fonction de la densité d'électrons du réseau pour la solution supraconductrice en utilisant l'amas 8 sites. Lorsque  $n < 0.53$ , la densité de l'amas augmente alors que la densité du réseau diminue.

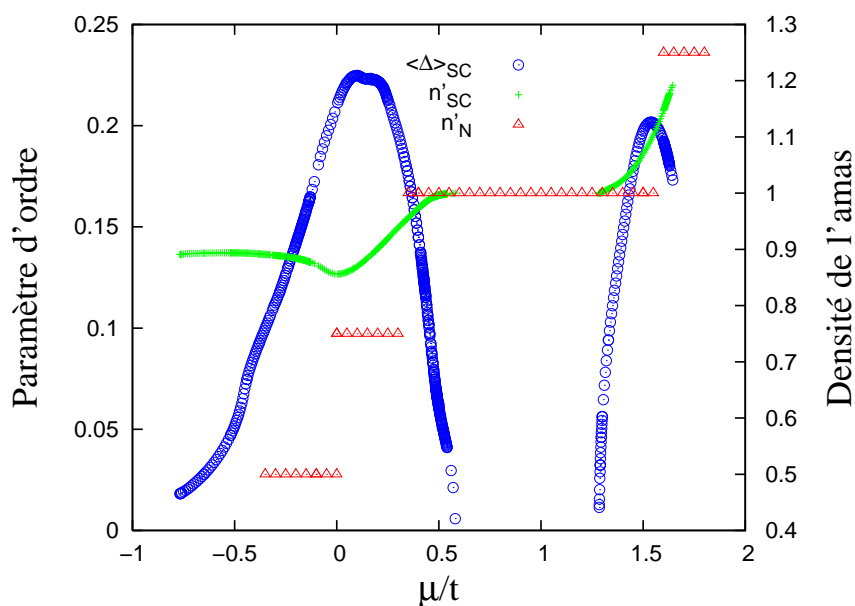


FIGURE 3.14: Paramètre d'ordre et densité du système de référence pour la solution supraconductrice et la solution normale. On constate que la densité de l'amas de la solution supraconductrice cesse d'être valide exactement où la solution normale change de secteur du côté dopé aux trous.

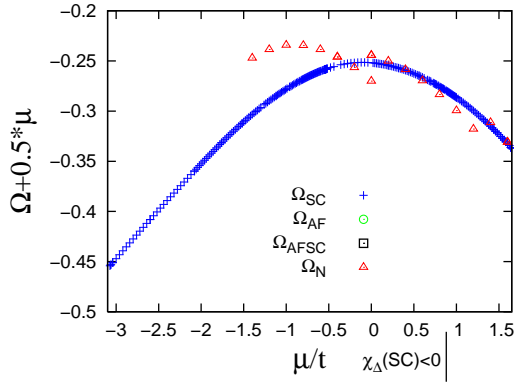
dans la région du gap de Mott. La région dopée aux trous est présentée aux figures 3.15a et 3.15b. A mesure que le potentiel chimique diminue par rapport au gap, on constate que les solutions de plus basse énergie sont successivement : AF-AFSC-SC-N-SC-N-SC. Cette alternance entre les phases normale et supraconductrice à la figure 3.15b doit être interprétée comme un comportement non physique causé par les changements de secteur de la solution normale. On peut penser que le véritable grand potentiel de la solution normale passe par une moyenne entre les points et il est raisonnable d'affirmer que la solution supraconductrice est la phase de plus basse énergie dans cette région. Les figures 3.15d et 3.15e montrent les grands potentiels pour la région dopée aux électrons. Lorsque le potentiel chimique augmente par rapport à la région du gap de Mott, les solutions de plus basse énergie sont successivement : AF-AFSC-AF-N. On remarque à la figure 3.15d que les changements de secteur dans les solutions normale et antiferromagnétique, autour de  $\mu/t = 6.4$ , abaissent significativement l'énergie ce qui rend difficile la comparaison avec les solutions supraconductrice et de coexistence. Cependant, la courbure du grand potentiel de ces deux dernières solutions suggère que celles-ci ne sont plus valides à partir de ce potentiel chimique critique. La solution de coexistence est néanmoins plus favorable

que la solution antiferromagnétique avant le changement de secteur ce qui nous permet d'affirmer que cette phase est présente dans le système.

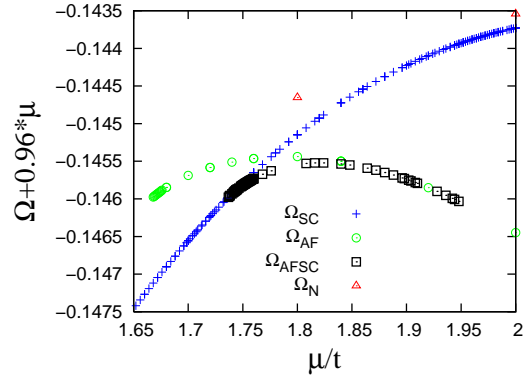
En utilisant la figure 3.10, on voit que le système prédit l'existence d'une phase isolante antiferromagnétique au demi-remplissage. Du côté dopé aux trous, cette phase s'étend jusqu'à 1% de dopage suivie d'une phase de coexistence, d'une phase supraconductrice et d'une phase normale. Du côté dopé aux électrons, le système prédit une phase de coexistence jusqu'à ce que le paramètre d'ordre supraconducteur atteigne son maximum. Cependant, la divergence du champ de Weiss supraconducteur nous empêche d'obtenir une phase supraconductrice lorsque le dopage en électrons est important.

### 3.2.3 Système avec amas de 10 sites

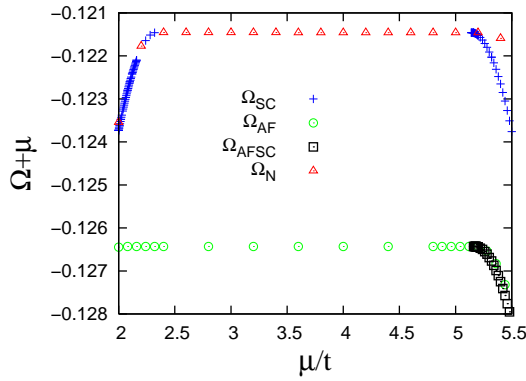
Analysons maintenant les solutions obtenues en utilisant l'amas de 10 sites. La figure 3.16 illustre le comportement des paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique du réseau. Contrairement aux résultats obtenus avec les amas précédents, la solution supraconductrice du côté dopé aux trous est décalée par rapport au demi-remplissage et le paramètre d'ordre est non nul uniquement pour une concentration d'électrons inférieure à environ  $n = 0.92$ , ce qui est clairement en accord avec les observations expérimentales sur les cuprates. Du côté dopé aux électrons, la solution supraconductrice est caractérisée par un long plateau au dopage optimal qui semble être causé par une augmentation soudaine de la densité de l'amas. En effet, la figure 3.19 montre que le paramètre d'ordre supraconducteur possède deux maximums du côté dopé aux électrons, et que le deuxième maximum est parfaitement synchronisé avec une augmentation du nombre d'électrons dans l'amas. D'autre part, comme l'indique le symbole  $\chi_{\Delta}(\text{SC})$  sous la figure 3.16, le grand potentiel possède une courbure négative dans la direction du champ de Weiss supraconducteur à partir du plateau ce qui est une indication supplémentaire que la solution supraconductrice n'est plus valide dans cette région. Par ailleurs, il est surprenant de constater sur cette même figure que le paramètre d'ordre antiferromagnétique de la solution de coexistence ne chute pas à la même densité que celui de la solution antiferromagnétique. Ce comportement semble être attribuable à un effet de taille finie particulier à l'amas de 10 sites plutôt qu'à un véritable comportement physique. Nous verrons en effet à la section 3.4 que des calculs indépendants utilisant le même amas ont montré un comportement semblable et nous verrons que la situation est



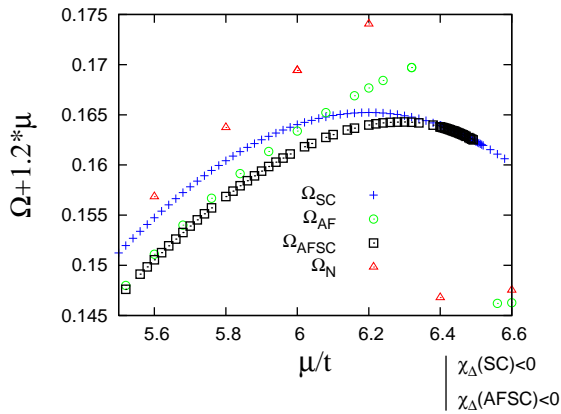
(a) Région dopée aux trous.



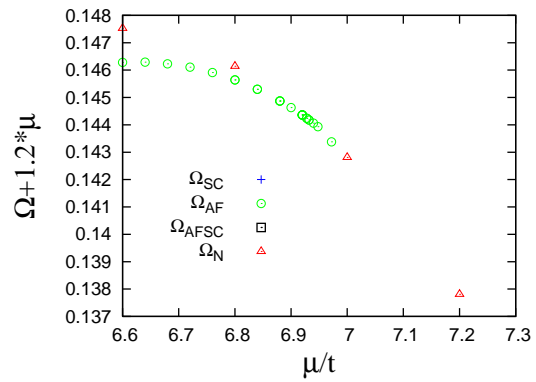
(b) Région dopée aux trous.



(c) Région du gap de Mott.



(d) Région dopée aux électrons.



(e) Région dopée aux électrons.

FIGURE 3.15: Grands potentiels pour les solutions obtenues en utilisant l'amas de 8 sites.



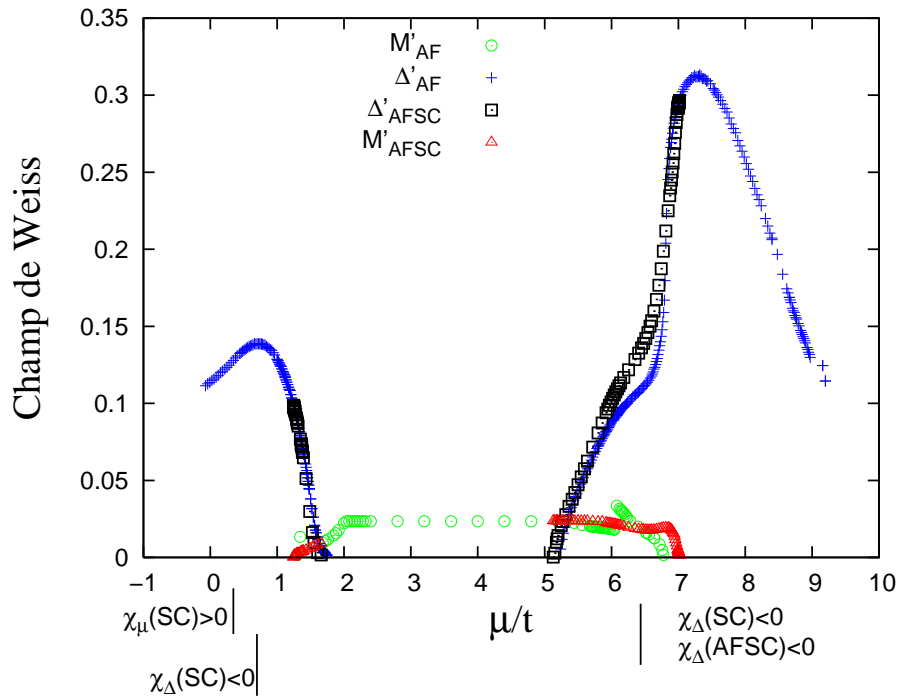


FIGURE 3.17: Champs de Weiss en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas de 10 sites.

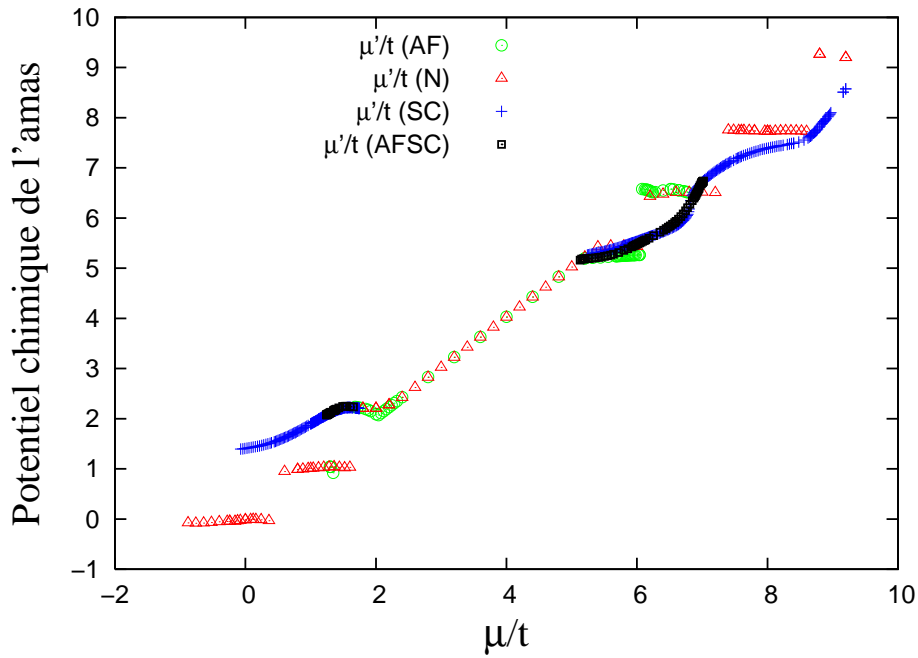


FIGURE 3.18: Potentiels chimiques de l'amas en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas de 10 sites.

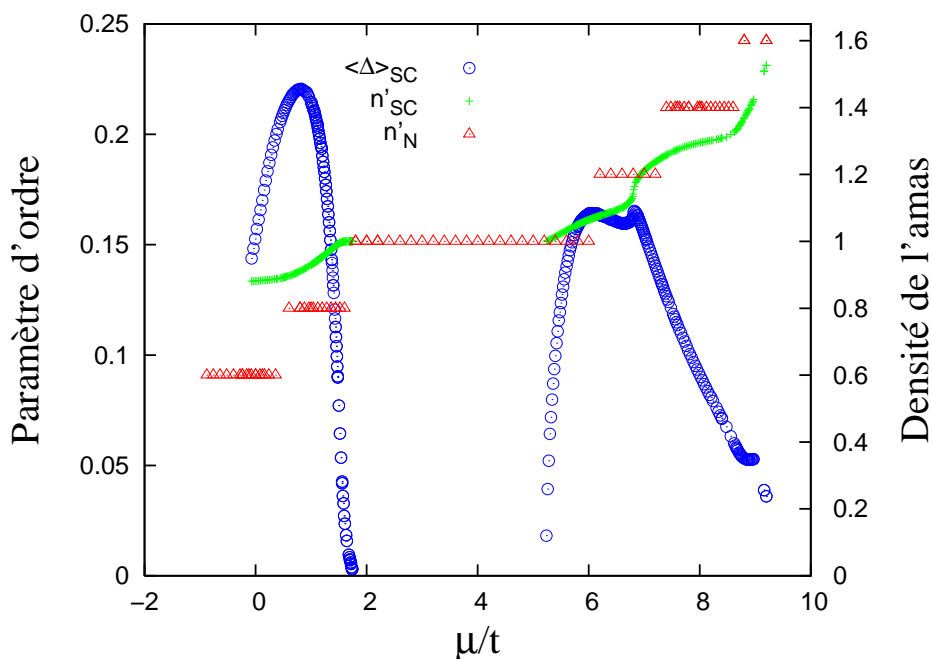


FIGURE 3.19: Paramètre d'ordre et densité de l'amas pour la solution supraconductrice et la solution normale. La densité de l'amas pour la solution supraconductrice possède un comportement semblable à un escalier et le paramètre d'ordre possède deux maximums.

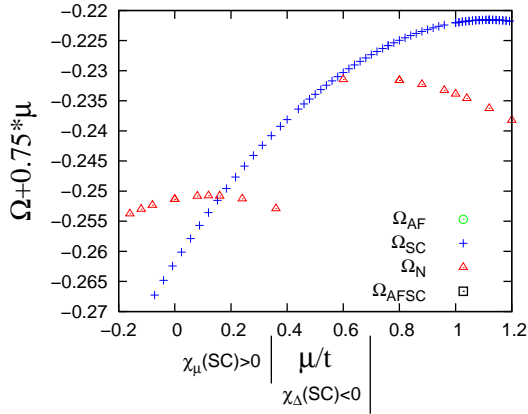
figure 3.20b, que la solution de coexistence est de plus basse énergie que la solution supraconductrice mais uniquement sur une petite plage de potentiel chimique. Les changements de secteur dans les solutions normale et antiferromagnétique abaissent significativement l'énergie ce qui rend difficile la comparaison avec les grands potentiels des autres solutions. On observe à la figure 3.20a que la solution supraconductrice devient la solution de plus basse énergie lorsque le dopage en trous est important, malgré le changement de secteur de la solution normale. Les figures 3.20d et 3.20e montrent les grands potentiels pour la région dopée aux électrons. Lorsque le potentiel chimique augmente par rapport à la région du gap, les solutions de plus basse énergie sont successivement, AFSC-AF-N-SC-N. On constate que la phase de coexistence est la solution de plus basse énergie jusqu'à ce qu'il se produise un changement de secteur dans les solutions antiferromagnétique et normale. La phase supraconductrice est de plus basse énergie lorsque le dopage en électrons devient important.

En somme, les changements de secteurs dans les solutions normale et antiferromagnétique abaissent artificiellement les énergies ce qui rend difficile la comparaison entre les différents grands potentiels. Clairement, la pente n'est pas conservée lors des

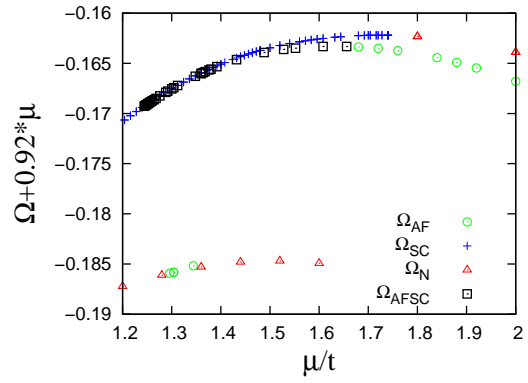
transitions ce qui indique que ces énergies ne sont pas correctement représentées. Le système prédit néanmoins du côté dopé aux trous, une phase antiferromagnétique jusqu'à 9% de dopage et une phase supraconductrice lorsque le dopage en trous dépasse 21%. Comme le montre la figure 3.16, la solution de coexistence est confinée essentiellement à la transition entre la phase antiferromagnétique et la phase supraconductrice. Du côté dopé aux électrons, le système prédit une phase de coexistence qui prend fin au maximum du dôme supraconducteur suivie d'une phase supraconductrice pour la région sur-dopée en accord avec la diagramme de phase des cuprates. Notons cependant que la courbure du grand potentiel aux points stationnaires suggère plutôt que la solution supraconductrice n'est pas valide pour la région sur-dopée.

### 3.2.4 Système avec amas de 12 sites

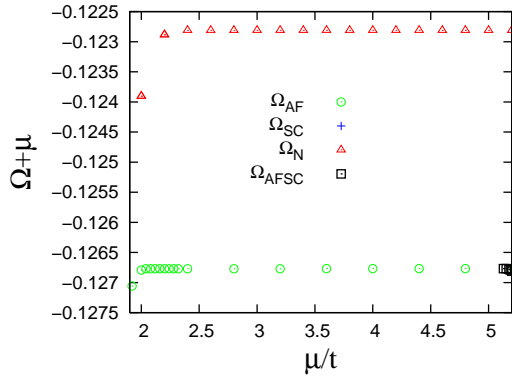
Analysons maintenant les résultats obtenus en utilisant l'amas de 12 sites. La figure 3.21 montre les paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique du réseau. Contrairement à tous les résultats obtenus jusqu'ici, on constate que la solution de coexistence est essentiellement inexistante du côté dopé aux trous. En effet, uniquement deux points ont été trouvés pour cette phase et nous verrons que ceux-ci ne correspondent pas à la solution de plus basse énergie. Du côté dopé aux électrons par contre, la solution de coexistence est bien présente et le paramètre d'ordre antiferromagnétique chute à zéro lorsque le paramètre d'ordre supraconducteur est maximum. La solution antiferromagnétique obtenue est en accord avec les observations expérimentales puisque la phase s'étale plus loin en dopage du côté dopé aux électrons. Concernant la solution supraconductrice, la figure 3.21 montre, du côté dopé aux trous, que le paramètre d'ordre est non nul uniquement pour une densité d'électrons inférieure à environ  $n = 0.91$ , ce qui est aussi en accord avec l'expérience. Du côté dopé aux électrons, il est surprenant de remarquer que le paramètre d'ordre supraconducteur chute à zéro à la densité  $n = 1.51$ , qui correspond à  $\mu/t = 8.4$ , alors que le champ de Weiss correspondant est non nul à la figure 3.22. La figure 3.24 montre que le paramètre d'ordre supraconducteur recommence à augmenter lorsqu'on continue la solution pour des potentiels chimiques plus élevés, ce qui laisse croire que l'approximation n'est plus valide dans cette région. Bien que le grand potentiel devienne concave dans la direction du champ de Weiss supraconducteur lorsque la densité est supérieure à  $n = 1.21$ , la phase supraconductrice obtenue pour la région sur-dopée est en accord avec les observations expérimentales sur les cuprates ce qui incite



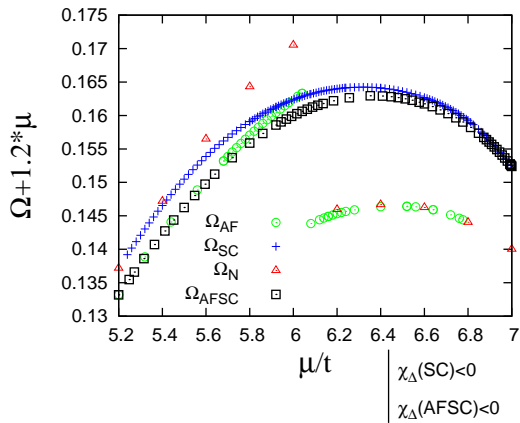
(a) Région dopée aux trous.



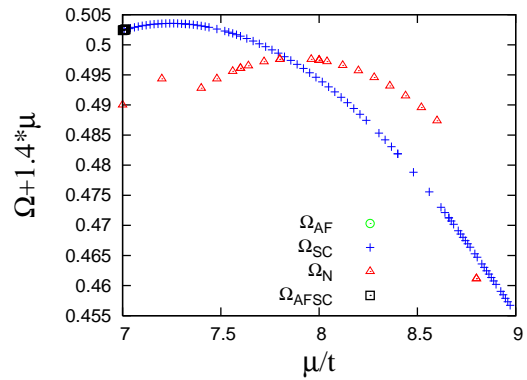
(b) Région dopée aux trous.



(c) Région du gap de Mott.



(d) Région dopée aux électrons.



(e) Région dopée aux électrons.

FIGURE 3.20: Grands potentiels des solutions obtenues en utilisant l'amas de 10 sites.

à croire que tous les points stationnaires sont valides.

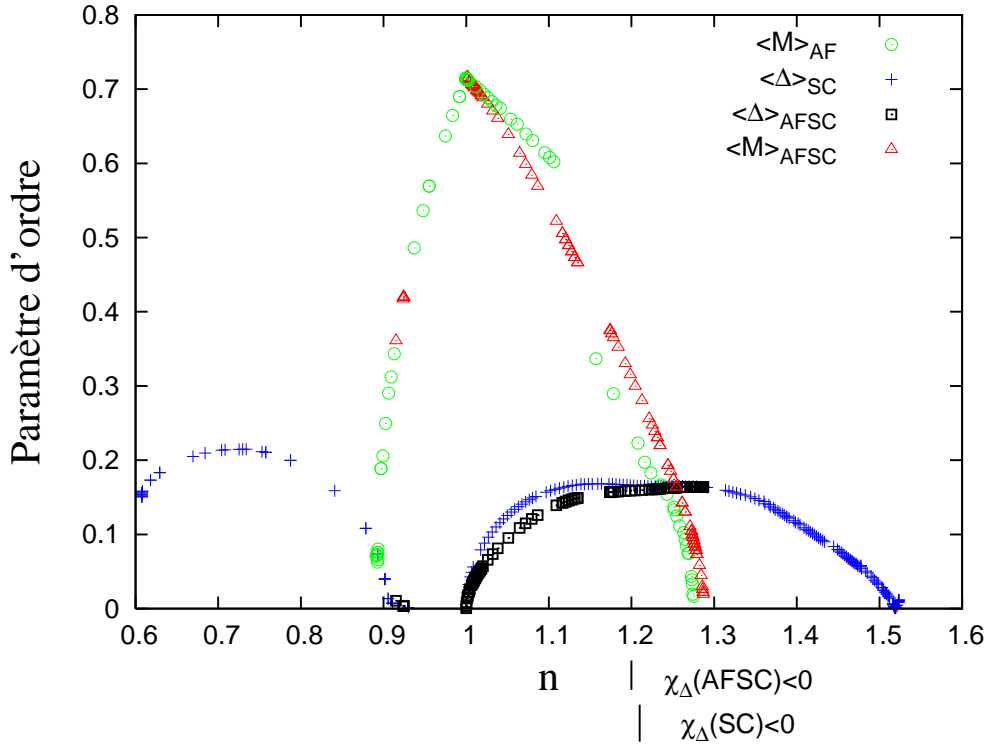


FIGURE 3.21: Paramètres d'ordre en fonction de la densité électronique du réseau en utilisant l'amas 12.

Les figures 3.22 et 3.23 illustrent respectivement l'évolution des champs de Weiss et du potentiel chimique de l'amas en fonction du potentiel chimique du réseau. Concernant la solution supraconductrice, la figure 3.22 montre que celle-ci prend fin du côté dopé aux trous autour de  $\mu/t = 0.43$ . A ce point, il n'est plus possible de poursuivre la solution puisque le champ de Weiss se dirige vers zéro avec une pente pratiquement infinie. On note aussi que le champ de Weiss antiferromagnétique est pratiquement continu, du côté dopé aux électrons, malgré la présence d'un changement de secteur.

### Analyse des grands potentiels

La figure 3.25 montre les grands potentiels du système. On constate à la figure 3.25b que l'antiferromagnétisme est la solution de plus basse énergie dans la région du gap de Mott. Lorsque le potentiel chimique diminue par rapport à cette région, figure 3.25a, les solutions de plus bas grand potentiel sont successivement AF-SC-N-SC. Encore une fois,

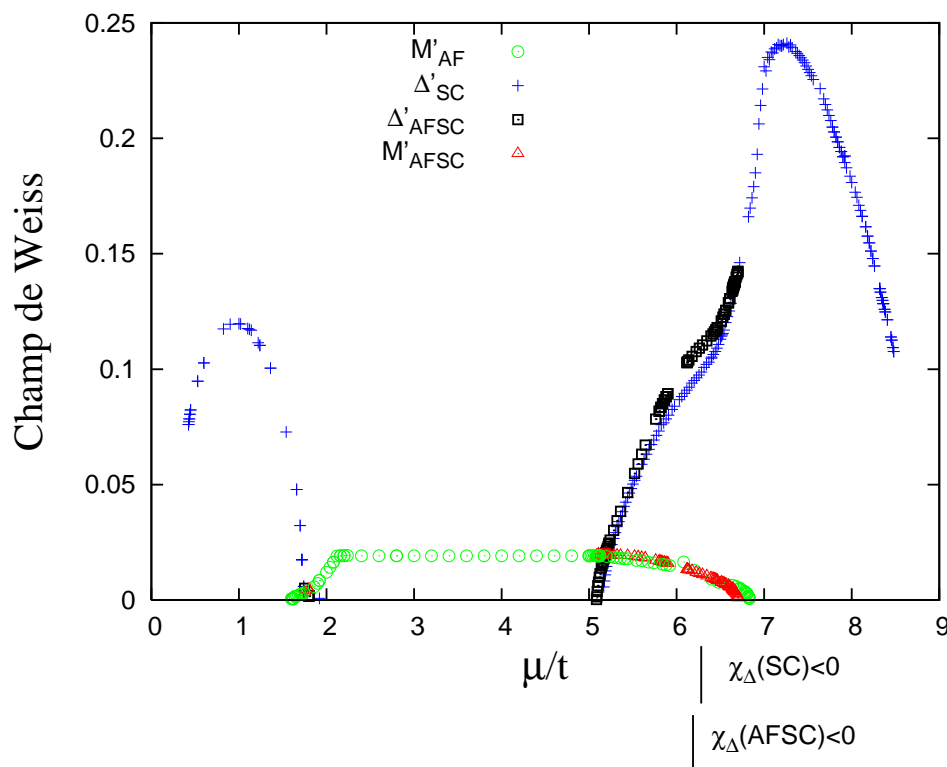


FIGURE 3.22: Champs de Weiss en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas 12 sites.

les changements de secteur de la solution normale créent des effets non physiques dans le grand potentiel et il est raisonnable d'affirmer que la solution supraconductrice est la solution stable. On remarque aussi que les deux points de la solution de coexistence sont de plus haute énergie que la solution supraconductrice ce qui confirme qu'aucune phase de coexistence n'est présente du côté dopé aux trous. Du côté dopé aux électrons par contre, la phase de coexistence est la solution de plus basse énergie jusqu'à ce qu'il se produise un changement de secteur dans les solutions normale et antiferromagnétique. La figure 3.25c est néanmoins forte intéressante puisque l'on constate que la solution normale change de secteur avant la solution antiferromagnétique ce qui crée artificiellement l'existence d'une phase normale sur une plage significative de potentiel chimique. En réalité, la phase normale ne devrait pas être favorable dans cette région puisque la phase antiferromagnétique est de plus basse énergie avant et après le changement de secteur. Ainsi, cet exemple montre clairement que les grands potentiels de ces deux solutions ne peuvent être interprétés à la lettre. La figure 3.25d montre que la solution supraconductrice est favorable lorsque le dopage en électrons est important.

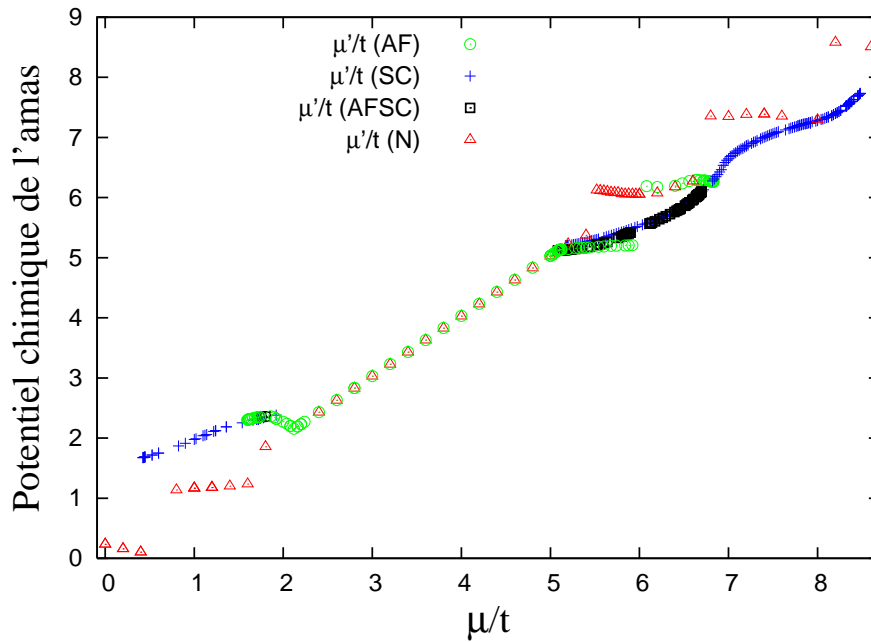


FIGURE 3.23: Potentiels chimiques de l'amas en fonction du potentiel chimique du réseau en utilisant l'amas 12 sites.

En somme, le système utilisant l'amas de 12 sites prédit une phase isolante antiferromagnétique au demi-remplissage. Du côté dopé aux trous, le système possède une phase antiferromagnétique jusqu'à environ  $n = 0.91$ , suivie d'une phase supraconductrice ayant la forme d'un dôme. Du côté dopé aux électrons, notre modèle prédit l'existence d'une phase de coexistence pour la région sous-dopée suivie d'une phase supraconductrice pour la région sur-dopée. Essentiellement, le diagramme de phase est remarquablement en accord avec les observations expérimentales sur les cuprates.

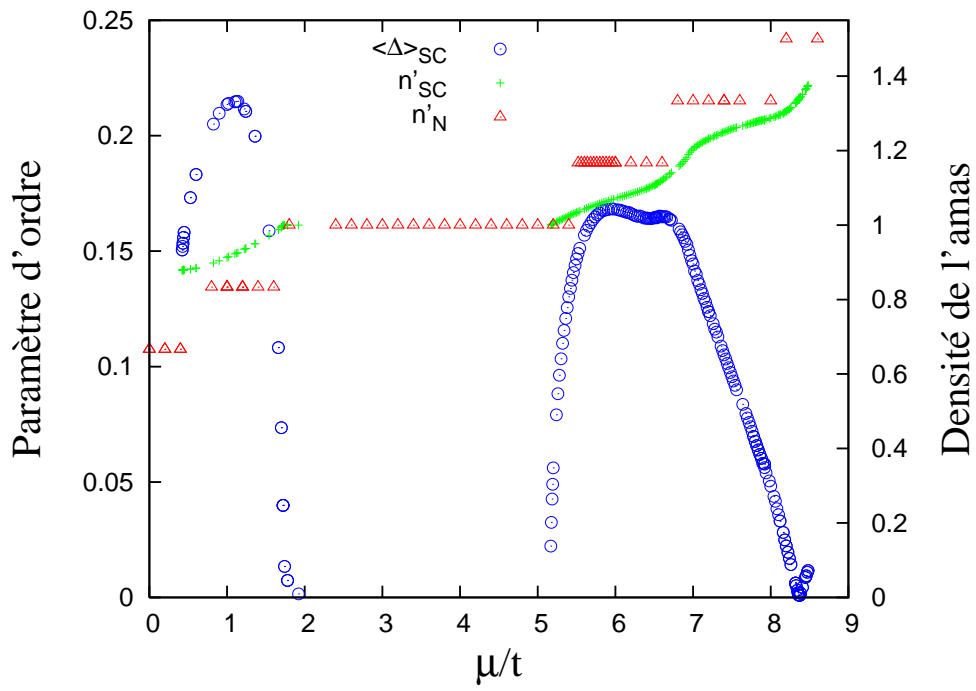


FIGURE 3.24: Paramètre d'ordre et densité du système de référence des solutions supraconductrice et normale.

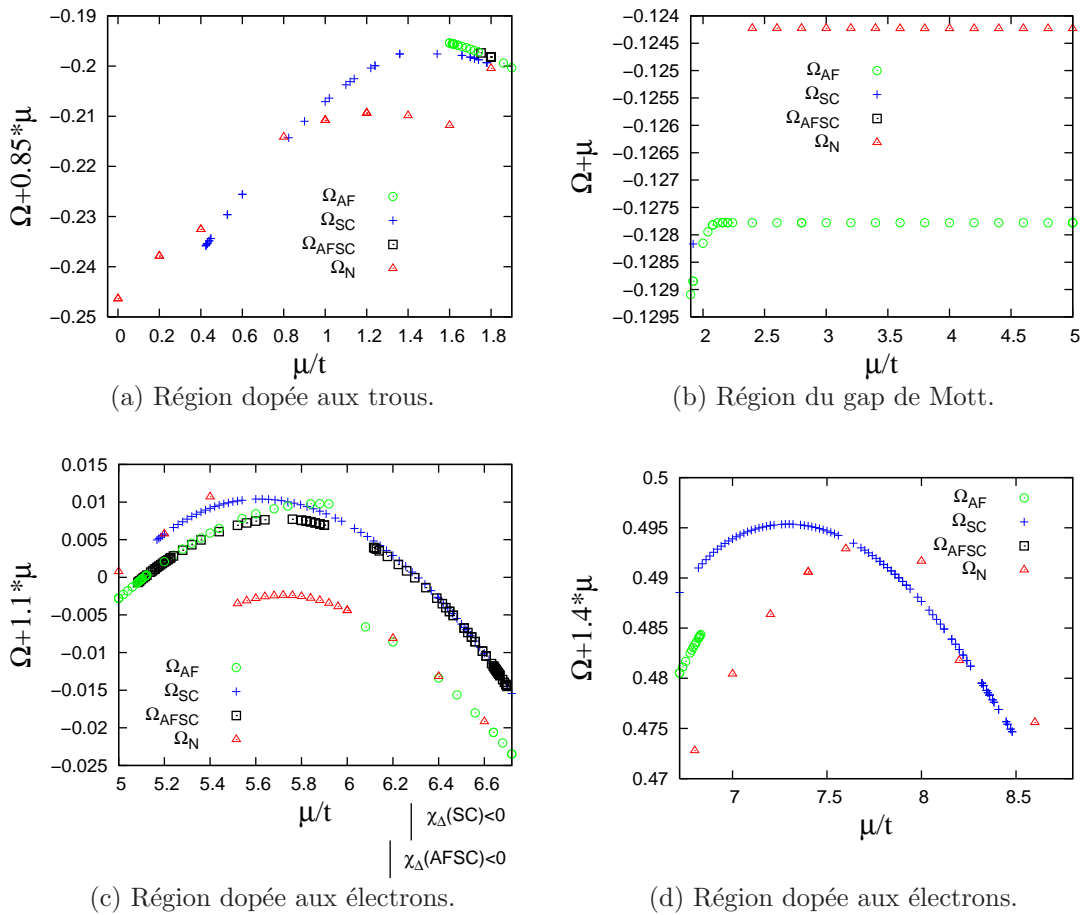


FIGURE 3.25: Grands potentiels des solutions obtenues en utilisant l'amas de 12 sites.

## 3.3 Évolution des solutions en fonction de la taille des amas

Nous présentons dans cette section une analyse de l'évolution des 4 solutions considérées en fonction de la taille des amas. Cette étude permettra de mieux cerner les effets de taille finie sur les résultats et d'identifier les tendances générales des solutions.

### 3.3.1 Solution normale

La principale conséquence de la taille finie des amas sur la solution normale est de limiter les remplissages accessibles au système de référence. Moins l'amas contient de sites, plus les remplissages sont éloignés les uns des autres et plus les discontinuités sont importantes lors des changements de secteur. Comme nous l'avons vu à la sous-section 2.3.3, ceci affecte particulièrement l'énergie des solutions puisque le grand potentiel du système de référence est modélisé par un nombre limité de segments de droite. La figure 3.26 montre les grands potentiels de la solution normale du côté dopé aux électrons. On observe la présence de sauts dans les grands potentiels aux changements de secteur mais l'amplitude de ces derniers diminue rapidement en fonction de la taille de l'amas. Cependant, comme nous l'avons clairement vu dans l'analyse des grands potentiels, il subsiste toujours une discontinuité importante dans la pente du grand potentiel lors des transitions. Néanmoins, dans la limite où les densités accessibles à l'amas sont très rapprochées, le grand potentiel tend vers une courbe continue.

### 3.3.2 Solution antiferromagnétique

Nous avons vu que pour tous les systèmes de références utilisés, il se produit un changement de secteur du côté dopé aux électrons pour la solution antiferromagnétique, ce qui crée des discontinuités parfois importantes. La figure 3.27 montre que l'amplitude et la pente du champ de Weiss, pour les amas de 4, 8 et 10 sites, sont grandement affectées par le changement de secteur. A cette échelle, le champ de Weiss de l'amas de 4 sites donne l'impression de diverger. Néanmoins, la discontinuité s'atténue systématiquement lorsque

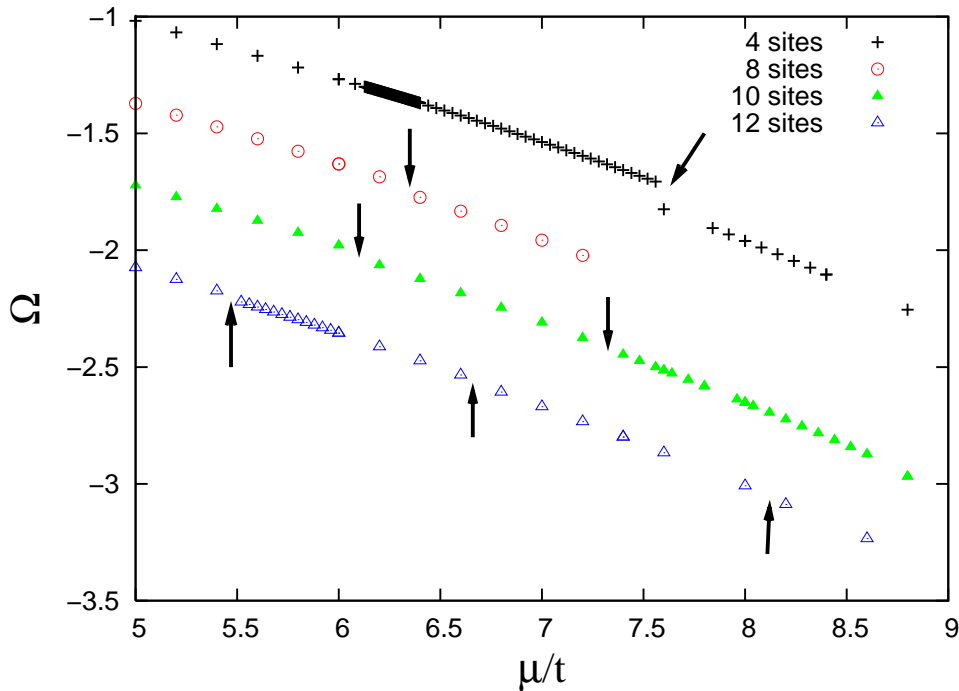


FIGURE 3.26: Discontinuités dans les grands potentiels pour la solution normale du côté dopé aux électrons. Les flèches indiquent les changements de secteur. Une constante a été ajoutée aux différents grands potentiels afin de décaler les courbes.

les densités accessibles à l'amas sont plus rapprochées. La solution de l'amas de 12 sites montre que le champ de Weiss converge et devient pratiquement continu à la transition. On peut donc conclure que l'utilisation d'amas de grande taille est nécessaire pour assurer la continuité des champs de Weiss aux changements de secteur. Par ailleurs, on observe à la figure 3.28, que ces discontinuités n'affectent pas significativement le comportement du paramètre d'ordre antiferromagnétique. En effet, dès l'utilisation de l'amas de 8 sites, le paramètre d'ordre converge vers une solution où l'antiferromagnétisme est présent jusqu'à environ 10% de dopage en trous et 28% de dopage en électrons. Les résultats du modèle reproduisent donc de façon remarquable l'allure générale de la phase antiferromagnétique des cuprates en confirmant que cette phase s'étale plus loin en dopage du côté dopé aux électrons.

Par ailleurs, on observe à la figure 3.27 que l'amplitude du champ de Weiss diminue lorsque la qualité de l'amas augmente. Les corrélations électroniques à courte portée sont alors davantage prises en compte dans les calculs ce qui favorise l'établissement d'un ordre antiferromagnétique. L'utilisation d'un champ de Weiss devient ainsi de moins en

moins nécessaire puisque l'ordre antiferromagnétique est davantage présent à l'intérieur de l'amas. La figure 3.29 est particulièrement instructive sur cette tendance. Celle-ci montre par extrapolation que dans la limite où le facteur de qualité de l'amas est idéal, aucun champ de Weiss n'est nécessaire pour obtenir un paramètre d'ordre antiferromagnétique fini.

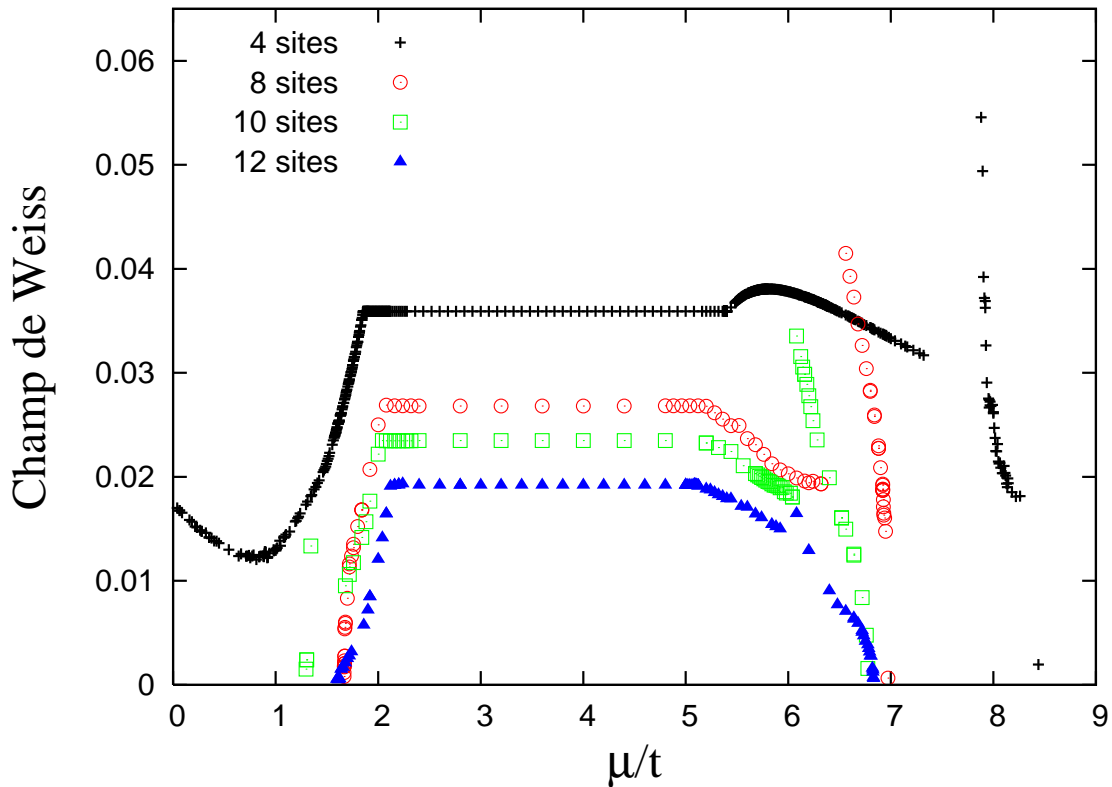


FIGURE 3.27: Champ de Weiss antiferromagnétique en fonction de la taille des amas. La solution devient continue uniquement pour l'amas de 12 sites.

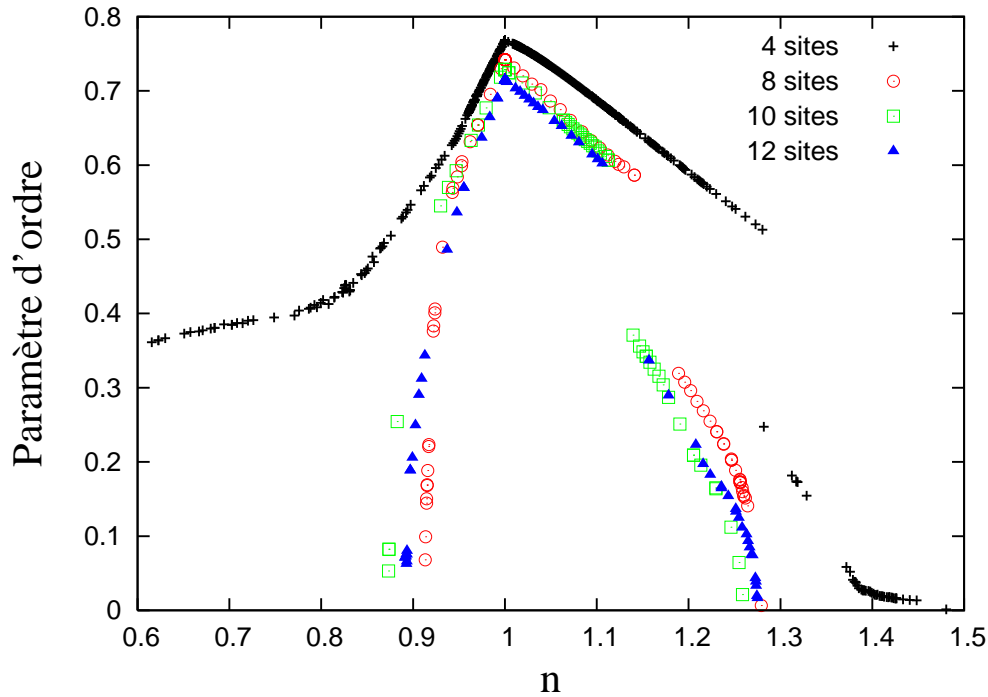


FIGURE 3.28: Paramètre d'ordre antiferromagnétique en fonction de la taille des amas. La solution converge à partir de l'amas de 8 sites.

### 3.3.3 Solution supraconductrice

Considérons maintenant la solution supraconductrice. La figure 3.30 montre l'évolution du champ de Weiss supraconducteur en fonction de la taille des amas. On constate que les résultats des amas de 4 et 8 sites sont caractérisés par une divergence du champ de Weiss, ce qui nous empêche d'obtenir des solutions à fort dopage. Cependant, ce phénomène disparaît du côté dopé aux trous à partir de l'amas de 8 sites et aucune divergence n'est observée pour les amas plus grands. On peut donc affirmer que ce phénomène de divergence est un effet de taille finie se produisant uniquement lorsque les amas sont très petits. La figure 3.30 montre aussi que de façon générale, l'amplitude du champ de Weiss diminue lorsque la taille de l'amas augmente. Les corrélations électroniques sont alors mieux prises en compte dans les calculs, ce qui favorise l'état supraconducteur. Notons enfin que pour tous les amas utilisés, le champ de Weiss supraconducteur est systématiquement plus fort du côté dopé aux électrons que du côté dopé aux trous.

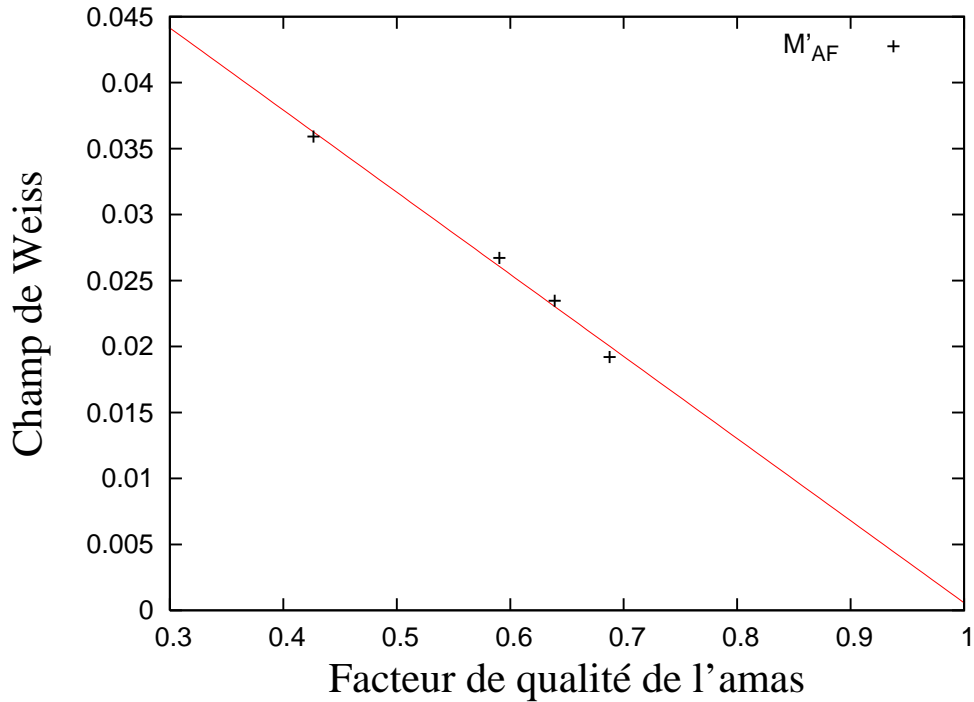


FIGURE 3.29: Lissage de l'évolution du champ de Weiss antiferromagnétique dans la région du gap de Mott, en fonction du facteur de qualité de l'amas.

La figure 3.31 montre l'évolution du paramètre d'ordre supraconducteur en fonction de la densité électronique du réseau pour les différents systèmes. Du côté dopé aux trous, on observe clairement une tendance à un déplacement du paramètre d'ordre, loin du demi-remplissage, lorsque la taille de l'amas augmente. Le début de la solution converge vers une densité égale à  $n = 0.91$  pour les amas de 10 et 12 sites. Par ailleurs, on remarque que plus la taille de l'amas augmente, plus l'écart entre le maximum du paramètre d'ordre du côté dopé aux trous et le maximum du côté dopé aux électrons s'accroît. Nos résultats indiquent donc une tendance claire à obtenir un paramètre d'ordre supraconducteur plus fort lorsque le système est dopé avec des trous, en accord avec les observations expérimentales. Essentiellement, il semble que l'utilisation d'amas de petite taille ne permette pas de traiter adéquatement l'asymétrie particule-trou pour la solution supraconductrice. Il est aussi intéressant de constater que, malgré une différence importante dans les champs de Weiss du côté dopé aux électrons pour les amas de 10 et 12 sites, les paramètres d'ordre sont pratiquement identiques, ce qui laisse croire que la solution a convergé. De même, le dopage optimal converge du côté dopé aux trous autour d'un dopage de 27%.

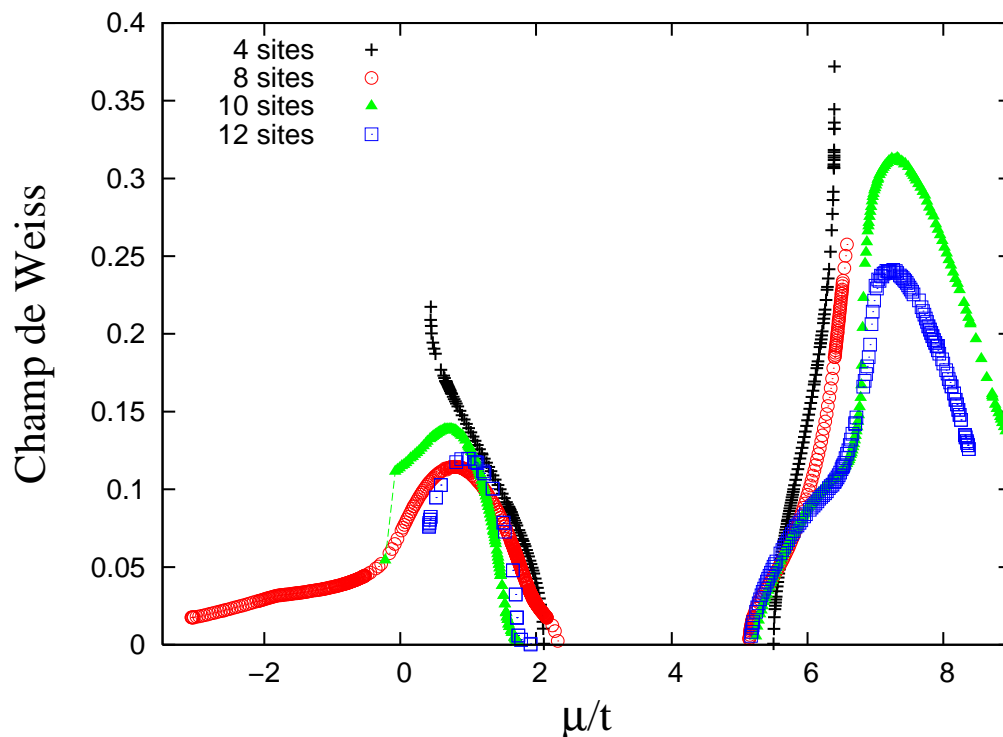


FIGURE 3.30: Champs de Weiss supraconducteur pour les différents de amas.

### 3.3.4 Solution de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice

La figure 3.32 montre l'évolution des champs de Weiss antiferromagnétique et supraconducteur de la solution de coexistence en fonction de la taille des amas utilisés. Pour tous les cas, les champs de Weiss sont plus forts du côté dopé aux électrons et la solution est présente sur une plus grande plage de potentiel chimique pour ce type de dopage. On observe aussi que l'amplitude des champs de Weiss diminue à mesure que la taille des amas augmente en raison d'un meilleur traitement des corrélations électroniques. Notons enfin que la solution de l'amas de 4 sites est caractérisée par une instabilité de la densité électronique dans la région où le paramètre d'ordre antiferromagnétique chute à zéro. Cependant, ce comportement n'est pas observé pour les amas plus grands ce qui confirme qu'il s'agit d'un comportement non physique causé par la taille finie de l'amas.

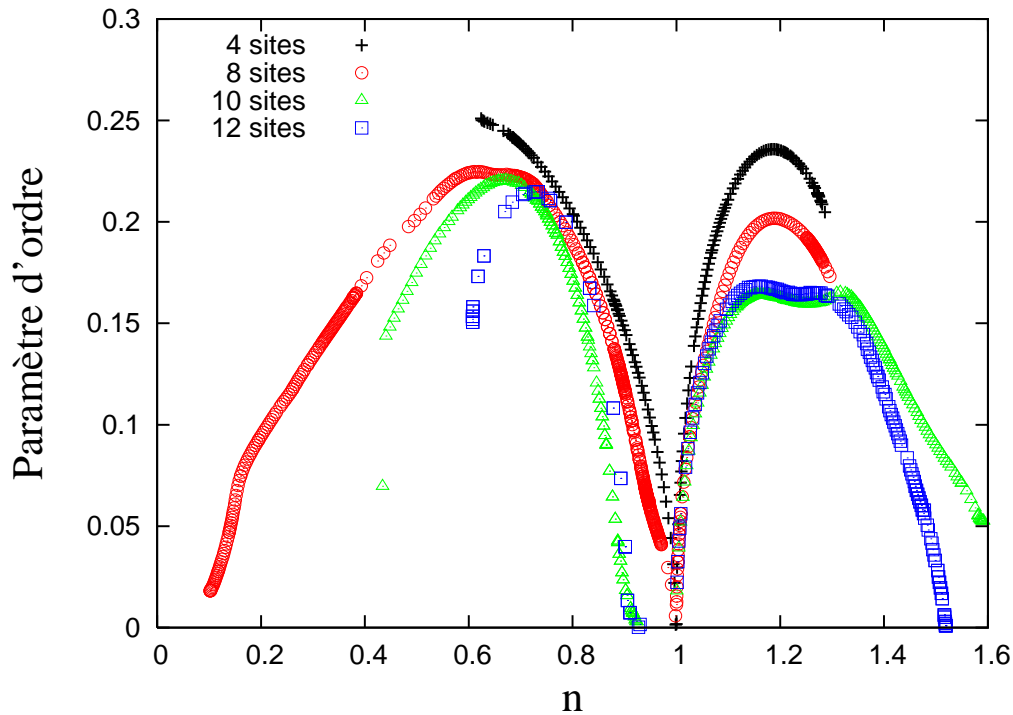


FIGURE 3.31: Paramètre d'ordre supraconducteur pour les différents de amas.

Le comportement le plus important de la solution de coexistence en fonction de la taille de l'amas est sans doute l'absence de solution du côté dopé aux trous pour l'amas de 12 sites. Il semble que les amas plus petits ne permettent pas suffisamment de prendre en compte les fluctuations des paramètres d'ordre ce qui crée artificiellement l'existence d'une solution. Notons cependant que dans notre approche, les calculs ont été faits en mécanique quantique réelle ce qui nous empêche ici d'étudier les phases supraconductrice de symétrie  $s + id$ , où le paramètre d'ordre possède une composante réelle et une composante complexe. Il apparaît donc nécessaire d'étudier éventuellement la possibilité d'une telle phase supraconductrice avant d'affirmer que notre modèle ne possède pas de phase de coexistence du côté dopé aux trous. Du côté dopé aux électrons par contre, la figure 3.33 montre que la phase de coexistence est robuste et varie très peu en fonction de l'amas utilisé. Le paramètre d'ordre antiferromagnétique chute à zéro vers 28% de

dopage pour 3 des 4 amas. Nous verrons à la section 3.4, que le comportement particulier de la solution de l'amas de 10 sites semble attribuable à un effet de taille finie particulier à l'amas plutôt qu'à un véritable comportement physique. Par ailleurs, on remarque à la figure 3.33 que le paramètre d'ordre antiferromagnétique chute à zéro à une densité légèrement supérieure à celle où le paramètre d'ordre supraconducteur est maximal pour les amas de 4, 8, et 10 sites alors que pour l'amas de 12 sites, la solution prend fin au dopage optimal. Il semble donc que les solutions n'aient pas convergé sur ce point.

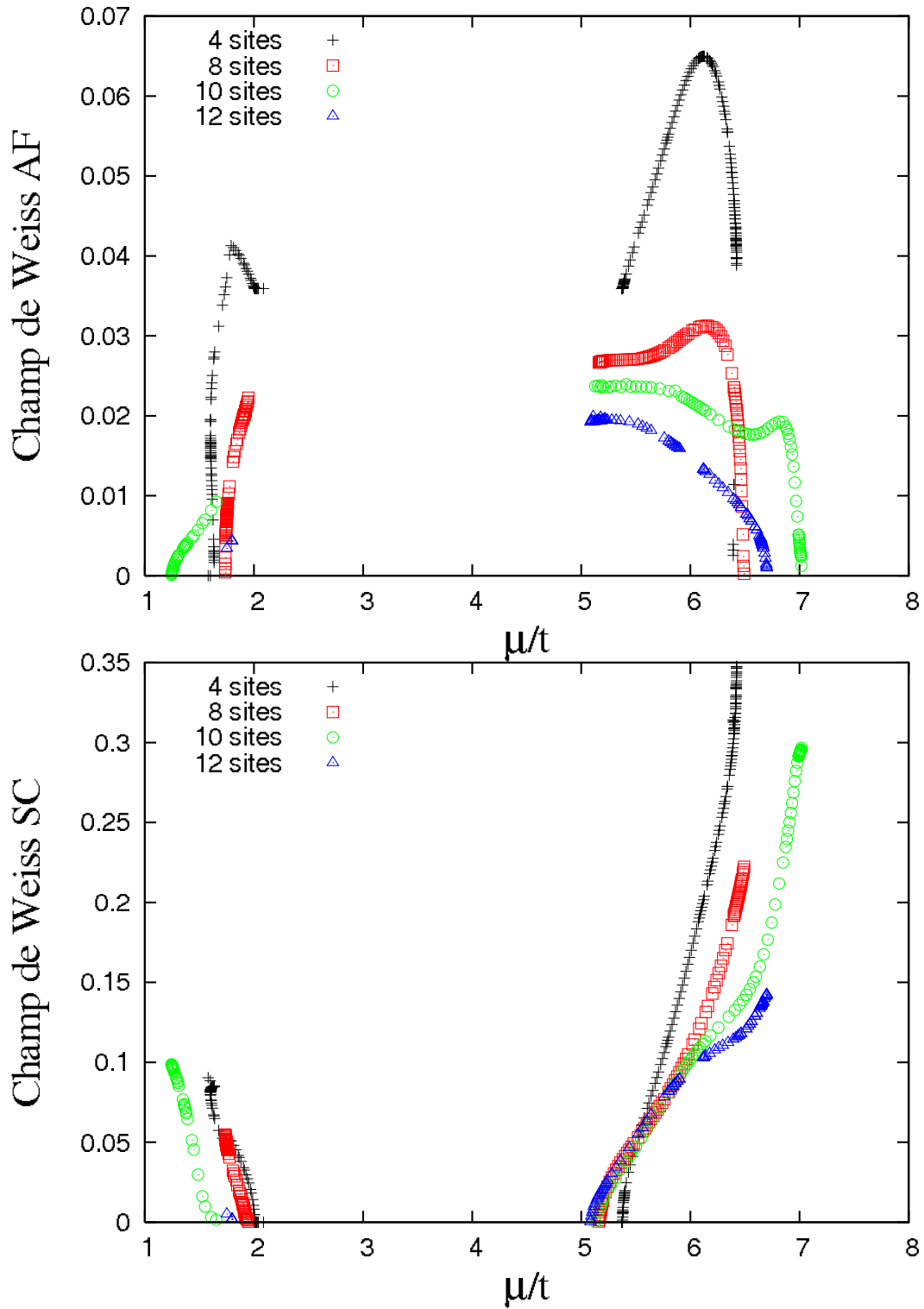


FIGURE 3.32: Champ de Weiss de la solution de coexistence pour les différents amas.

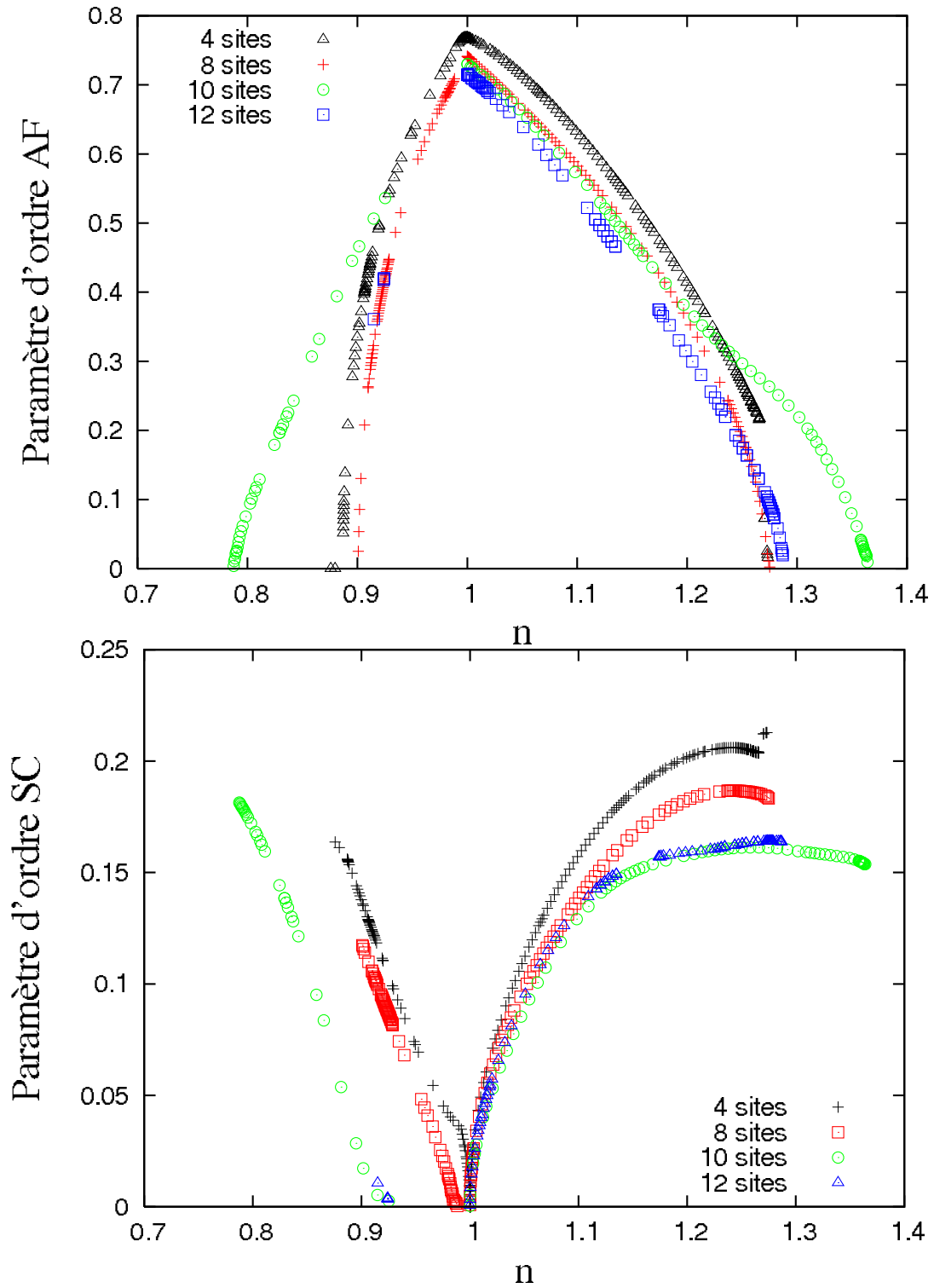


FIGURE 3.33: Paramètre d'ordre de la solution de coexistence pour les différents amas.

### 3.4 Comparaison des résultats

Il est utile de comparer nos solutions avec d'autres résultats obtenus par la même méthode et portant sur la phase de coexistence et la phase supraconductrice. Considérons tout d'abord les solutions de la figure 3.33, où contrairement à nos calculs, le potentiel chimique de l'amas n'a pas été traité de façon variationnelle [29]. Les paramètres de l'hamiltonien ainsi que l'amas de 8 sites sont identiques à ceux que nous avons utilisés.

Du côté dopé aux trous, on observe un déplacement du paramètre d'ordre supraconducteur loin du demi-remplissage ce qui est en accord avec nos résultats. La solution de coexistence est absente pour l'amas de 10 sites alors que ce comportement survient uniquement pour l'amas de 12 sites dans nos calculs. Du côté dopé aux électrons, la phase de coexistence est présente pour tous les amas utilisés mais on remarque que celle-ci prend fin dans le régime sur-dopé du dôme supraconducteur pour l'amas de 10 sites ce qui est différent de nos observations. On remarque aussi qu'uniquement la solution obtenue avec ce dernier amas prédit que le paramètre d'ordre supraconducteur est de plus forte amplitude du côté dopé aux trous. Par ailleurs, le traitement variationnel du potentiel chimique de l'amas a pour effet d'augmenter le domaine de remplissage où les solutions sont présentes. Dans nos résultats, les densités critiques où le paramètre d'ordre antiferromagnétique chute à zéro sont pratiquement doublées par rapport à celles de la figure 3.33. Bien que les remplissages semblent être davantage en accord avec l'expérience lorsque le potentiel chimique de l'amas n'est pas traité de façon variationnelle, nos résultats constituent une meilleure approximation en raison de la cohérence thermodynamique. En effet, étant donné la valeur plutôt approximative du terme de Hubbard par rapport aux valeurs réelles dans les matériaux, on ne peut s'attendre à obtenir un accord quantitatif avec l'expérience sur les remplissages.

La figure 3.35 montre les résultats pour la phase de coexistence et la phase supraconductrice dans lesquels le terme de saut au troisième voisin n'a pas été pris en compte [19]. Tous comme dans notre étude, le potentiel chimique de l'amas a été traité de façon variationnelle dans les calculs et les amas sont les mêmes que ceux que nous avons utilisés. Contrairement à nos résultats, leurs calculs prédisent l'existence d'une phase de coexistence pour les deux types de dopage et aucun déplacement du paramètre d'ordre

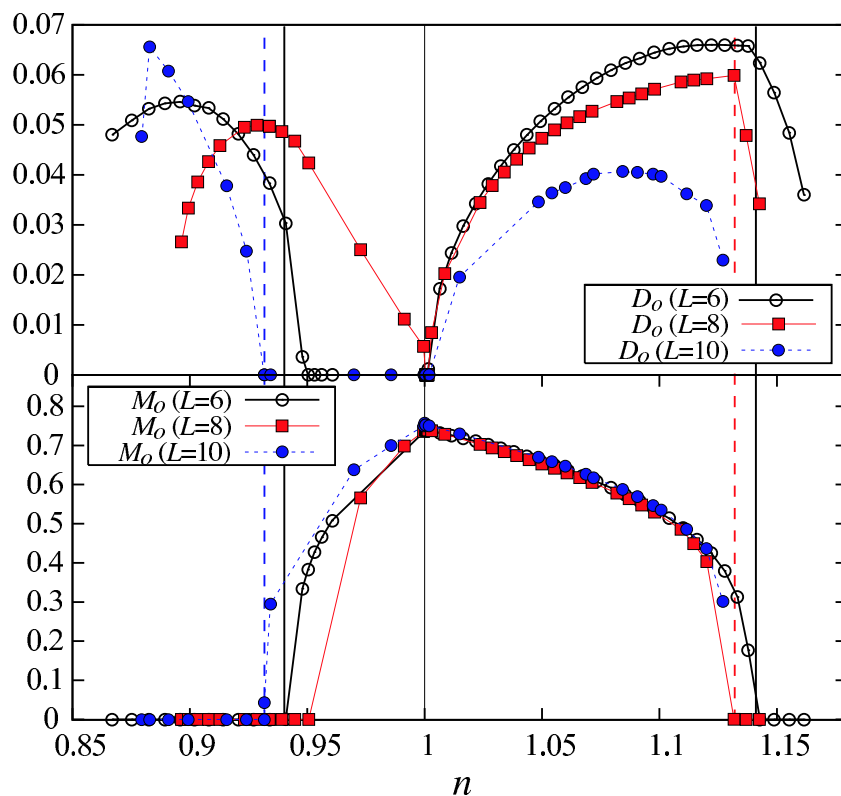


FIGURE 3.34: Paramètres d'ordre antiferromagnétique et supraconducteur de la solution de coexistence et la solution supraconductrice obtenus sans varier le potentiel chimique de l'amas [29]. La densité électronique du réseau est calculée à partir de la fonction de Green CPT.

supraconducteur par rapport au demi-remplissage n'est observé du côté dopé aux trous. Puisque nos résultats sont davantage en accord avec les observations expérimentales, nous concluons que le terme de saut au troisième voisin est essentiel pour reproduire adéquatement le diagramme de phase des cuprates du côté dopé aux trous. Ceci est en accord avec la conclusion de l'étude du pseudogap avec la méthode CPT que nous avons mentionnée à la sous-section 2.1.5 [21]. Notons cependant que la position des dopages critiques est plus conforme avec l'expérience à la figure 3.35 que dans nos résultats. Afin de vérifier si uniquement le terme de saut au troisième voisin est responsable de ces variations importantes des densités critiques, nous avons effectué en partie le calcul des solutions supraconductrice et de coexistence pour l'amas de 4 sites dopé aux électrons en variant le potentiel chimique de l'amas et en supprimant le terme de saut au troisième voisin. Nous avons ainsi été capable de reproduire les résultats de la figure 3.35 avec un accord autour de 2% pour les densités critiques. Du côté dopé aux électrons, la solution

de coexistence prend fin approximativement au dopage optimal ce qui est cohérent avec nos résultats. Par ailleurs, on remarque que le paramètre d'ordre antiferromagnétique obtenu avec l'amas de 10 sites s'étale plus loin que les autres solutions du côté dopé aux électrons. Ce comportement concorde avec nos observations et nous incite à croire qu'il s'agit d'un effet de taille finie particulier à l'amas de 10 sites.

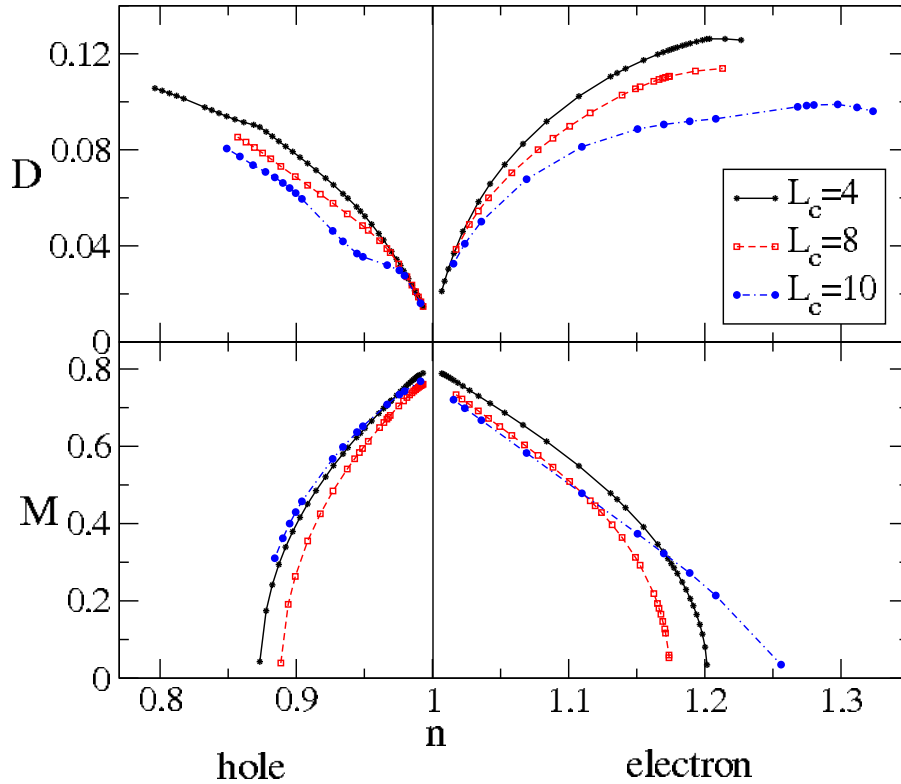


FIGURE 3.35: Paramètres d'ordre de la solution de coexistence et la solution supraconductrice obtenus par la méthode VCPT. Le terme de saut au troisième voisin n'est pas pris en compte dans les calculs [19].

# Conclusion

Dans ce travail, nous avons effectué le calcul du diagramme de phase de l'état fondamental du modèle de Hubbard à une bande appliqué aux cuprates, en fonction du dopage. Pour ce faire, nous avons utilisé l'approche VCPT avec 4 amas distincts allant jusqu'à 12 sites. Par rapport aux travaux antérieurs sur le sujet, ce projet contient plusieurs éléments originaux dont une étude systématique en taille en incluant comme paramètre variationnel le potentiel chimique de l'amas ainsi qu'une analyse des effets de taille finie particuliers apparaissant sous dopage. Il ressort de cette étude un accord qui se situe entre qualitatif et semi-quantitatif par rapport le diagramme de phase expérimental des cuprates.

Du côté dopé aux trous, nos résultats montrent la présence d'une phase antiferromagnétique allant jusqu'à 10% de dopage, suivie d'un dôme supraconducteur de forte amplitude. Nous concluons à l'absence de phase de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice de symétrie  $d_{x^2-y^2}$  pour ce type de dopage. Du côté dopé aux électrons, nos résultats prédisent l'existence d'une phase de coexistence antiferromagnétique et supraconductrice qui se termine près du dopage maximal suivie d'une phase supraconductrice pour la région sur-dopée. Nos calculs montrent que le paramètre d'ordre supraconducteur est de plus forte amplitude lorsque le système est dopé aux trous ce qui est en accord avec l'expérience. De plus, suite à l'analyse de nos résultats effectuée à la section 3.4, nous concluons que le terme de saut au troisième voisin est essentiel pour reproduire correctement le diagramme de phase des cuprates du côté dopé aux trous concernant les phases de coexistence et de supraconductivité.

Par ailleurs, nous avons vu que la taille finie des amas affecte les grands potentiels des solutions normale et antiferromagnétique ce qui rend difficile la comparaison des énergies. Les changements de secteur en fonction du dopage permettent d'assurer la concavité du

grand potentiel mais les solutions souffrent du fait que la pente n'est pas continue lors des transitions. Nous croyons néanmoins que nos résultats permettent de distinguer les solutions de plus basse énergie. Nous avons aussi vu que la solution supraconductrice de l'amas de 12 sites du côté dopé aux électrons est en accord avec le diagramme de phase des cuprates malgré le fait que la courbure du grand potentiel aux points stationnaires suggère que la solution ne constitue pas une approximation adéquate en raison de la conjecture proposée à la sous-section 2.3.3. Nos résultats ne permettent donc pas de confirmer cette hypothèse et une analyse théorique sur ce point semble nécessaire.

Présentement, des travaux sont en cours pour étendre la recherche de l'état fondamental de l'amas aux secteurs ayant un nombre impair d'électrons. Ceci permettra de mieux représenter le grand potentiel de la solution normale en doublant la fréquence des changements de secteur. Cependant, il serait important de trouver une condition permettant d'assurer la continuité de la pente du grand potentiel aux changements de secteur. Il serait aussi intéressant au cours de futurs travaux de procéder à l'analyse de l'évolution du poids spectral en fonction du remplissage en lien avec le diagramme de phase. Les données expérimentales sont disponibles et cette étude permettrait de mieux confirmer l'accord entre le modèle de Hubbard et les supraconducteurs à haute température critique. Notons enfin que l'approche utilisée devrait éventuellement être modifiée afin de permettre l'étude d'une phase supraconductrice de symétrie  $s+id$  où le paramètre d'ordre possède une composante réelle et une composante complexe.

# Annexe A

## Cohérence thermodynamique du nombre moyen de particules

Nous avons montré à l'équation 2.48 que le grand potentiel du réseau est une fonction du potentiel chimique du réseau  $\mu$ , du potentiel chimique de l'amas  $\mu'$ , ainsi que des termes à un corps de l'hamiltonien de l'amas  $\mathbf{t}'$ .

$$\Omega(\mu, \mu', \mathbf{t}') = \text{Tr} \ln(\omega - \mathbf{t} + \mu - \Sigma(\mu', \mathbf{t}'))^{-1} + \Omega' - \text{Tr} \ln(\omega - \mathbf{t}' + \mu' - \Sigma(\mu', \mathbf{t}'))^{-1} \quad (\text{A.1})$$

Le nombre moyen de particules peut être obtenu en calculant la trace de la fonction de Green :

$$\langle N \rangle = \text{Tr} G \quad (\text{A.2})$$

où  $G$  est la fonction de Green CPT évaluée au point stationnaire du grand potentiel  $\partial\Omega/\partial\mathbf{t}' = 0$ . Par ailleurs, la densité moyenne de particules peut aussi être obtenue en calculant la dérivée totale du grand potentiel en fonction du potentiel chimique du réseau. Lorsque le potentiel chimique de l'amas est traité comme un paramètre variationnel, on peut incorporer  $\mu'$  dans l'ensemble  $\mathbf{t}'$ . Le nombre moyen de particules s'exprime alors :

$$\langle N \rangle = -\frac{d\Omega}{d\mu} = -\left( \frac{\partial\Omega}{\partial\mu} + \frac{\partial\Omega}{\partial\mathbf{t}'} \cdot \frac{d\mathbf{t}'}{d\mu} \right) \quad (\text{A.3})$$

Puisque tous les termes à un corps de l'amas sont traités de façon variationnelle, le grand potentiel est toujours évalué à un point stationnaire,  $\partial\Omega/\partial\mathbf{t}' = 0$ , et la contribution du

deuxième terme dans l'équation A.3 est nulle. Il y a dans ce cas cohérence thermodynamique puisque  $\langle N \rangle = \text{Tr } G = -d\Omega/d\mu$ .

Considérons maintenant le cas où le potentiel chimique de l'amas n'est pas traité comme un paramètre variationnel. Le potentiel chimique de l'amas est dans ce cas posé égal à celui du réseau,  $\mu = \mu'$ . Lorsqu'on applique l'équation A.3 à l'équation A.1, on obtient :

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\text{Tr } G + \frac{\partial \Omega'}{\partial \mu'} + \text{Tr } G' + \text{Tr} \left( (G - G') \frac{\partial \Sigma}{\partial \mu} \right) \quad (\text{A.4})$$

Dans cette expression, le deuxième et le troisième terme se compensent car il y a cohérence thermodynamique dans l'amas, qui est solutionné exactement. Par contre, le dernier terme, impliquant la dérivée de la self-énergie par rapport à  $\mu' = \mu$ , n'est pas nul. La densité du réseau n'est plus alors égal à  $\text{Tr } G$ . Il n'y a donc pas de cohérence thermodynamique dans le cas où le potentiel chimique de l'amas n'est pas traité de façon variationnelle.

# Bibliographie

- [1] S. Brown C. Bourbonnais al.. S. Lefebvre, P. Wzietek. *cond-mat/0004455* Avril (2000).
- [2] Y. Kawasaki al Y. Kitaoka, K. Ishida. *J. Phys. Condens. Matter* **13**, 79 (2001).
- [3] K.A. Muller J.G. Bednorz. *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [4] M.K. Wu al. *Physical Review Letters* **58**, 908 (1987).
- [5] P. Dai. *Physica C* **243**(3), 201 (1995).
- [6] Gao. *Phys. Rev. B* **50**(6), 4260 (1994).
- [7] A. Damascelli et al. *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
- [8] W.E. Pickett. *Rev. Mod. Phys.* **61**, 433 (1989).
- [9] N. Bulut. *Advances in Physics* **51**(6) (2002).
- [10] L.F. Mattheiss. *Physical Review Letters* **58**, 1028 (1987).
- [11] Z.X. Shen et al. *Physical Review Letters* **70**, 1553 (1993).
- [12] D.A. Wollman et al. *Physical Review Letters* **71**, 2134 (1993).
- [13] P. Fournier D.S. Marshall. *Physical Review Letters* **76**, 4841 (1996).
- [14] N.D. Mermin N.W. Ashcroft. *SOLID STATE PHYSICS*. BROOKS/COLE, Belmont, (1976).
- [15] David Sénéchal. *Mécanique quantique*. Université de Sherbrooke, (2000).
- [16] M. Pioro-Ladrière D. Sénéchal, D. Perez. *Physical Review Letters* **84**, 522 (2000).
- [17] D. Plouffe D. Sénéchal, D. Perez. *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
- [18] A.-M.S. Tremblay S. Pairault, D. Sénéchal. *Eur. Phys. J. B* **16**, 85 (2000).
- [19] M. Potthoff W. Hanke M. Aichhorn, E. Arrigoni. *Phys. Rev. B* **74**, 235117 (2006).
- [20] S. Pal H.-D. Meyer. *J. Chem. Phys.* **91**, 10 (1989).
- [21] D. Sénéchal A.-M.S. Tremblay. *Physical Review Letters* **92**, 126401 (2004).
- [22] J.C. Ward J.M. Luttinger. *Phys. Rev.* **118**, 1417 (1960).
- [23] M. Potthoff. *Condens. Mat. Phys.* **9**, 557 (2006).

- [24] W. Hanke E. Arrigoni M. Potthoff J. Dahnken, M. Aichhorn. *Phys. Rev. B* **70**, 245110 (2004).
- [25] O. Jepsen F. Paulsen O.K. Andersen, A.I. Liechtensein. *Phys. Chem. Solids* **56**, 1573 (1995).
- [26] P.W. Anderson. *The theory of superconductivity in the High- $T_c$  Cuprates*. PRINCETON SERIES IN PHYSICS, (1997).
- [27] M. Potthoff W. Hanke M. Aichhorn, E. Arrigoni. *cond-mat/0511460* Décembre (2005).
- [28] Brian Cowan. *Statistical Mechanics*. Royal Holloway University of London, (2004).
- [29] M.-A. Marois A.-M.S. Tremblay D. Sénéchal, P.-L. Lavertu. *Physical Review Letters* **94**, 156404 (2005).