

Transition de Mott et supraconductivité dans les matériaux organiques

par

Louis Bourassa

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, 14 juin 2017

Le 14 juin 2017

le jury a accepté le mémoire de Monsieur Louis Bourassa dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Jeffrey Quilliam
Membre interne
Département de physique

Professeur David Sénéchal
Président rapporteur
Département de physique

The White Rabbit put on his spectacles. *"Where shall I begin, please your Majesty?"* He asked.

"Begin at the beginning," the King said gravely, *"and go on till you come to the end : then stop."*

Lewill Carroll, *Alice in Wonderland*

À mes parents et amis

Sommaire

Dans ces travaux, nous avons étudié la rigidité superfluide en CDMFT (*théorie du champ moyen dynamique sur amas*) dans les matériaux organiques supraconducteurs. Ceux-ci appartiennent à la catégorie des supraconducteurs à haute température. Nous obtenons des résultats, en accord qualitatif avec l'expérience, qui suivent la tendance suggérée par la loi dite de Homes $1/\lambda^2 = \sigma_{dc} T_c$. La température critique et la masse effective ont donc également été calculées à des fins d'analyses. Ces dernières quantités sont également en accord avec l'expérience et les travaux antérieurs.

Mots-clés : supraconductivité, organique, température critique, fonction de Green, Hubbard et Mott.

Remerciements

There is no such thing as a "self-made" man. We are made up of thousands of others. Everyone who has ever done a kind deed for us, or spoken one word of encouragement to us, has entered into the make-up of our character and of our thoughts, as well as our success.

George Burton Adams

Je remercie d'abord André-Marie Tremblay d'avoir accepté de superviser ce mémoire. Déjà tant a été dit sur les qualités d'André-Marie qu'il est difficile d'avoir une contribution originale. Je mentionnerai toutefois qu'il a toujours à coeur le bien être des gens qu'il supervise ce qui rend une atmosphère propice à l'exploration. Il m'a soutenu dans mes doutes et remises en question lors de ma maîtrise. Je tiens également à remercier Pierre Bénard, mon superviseur au baccalauréat, lui-même ancien étudiant au doctorat d'André-Marie. Tout deux ont cru en moi alors que j'avais moi-même de la difficulté à le faire.

Le 1 avril 2009, j'ai reçu ma première prescription de neuroleptiques. Depuis, le parcours a été long pour avoir une vie heureuse et réussir mes études. Je tiens donc à remercier toutes les personnes qui m'ont aidé à travers cette épreuve. En particulier, je remercie ma famille et mes amis d'enfance (WISLA et compagnie, oui Gab tu es inclus) dont l'amour m'a permis de continuer et m'a sauvé la vie.

Nous connaissons le proverbe africain "Ça prend un village pour élever un enfant". Dans les études graduées, le village consiste, entre-autres, des autres étudiants gradués et post-doctorant. Je remercie alors les membres du groupes avec qui j'ai eu la chance d'avoir des discussions éclairantes sur divers sujets plus ou moins reliés à la physique. : Simon Verret, Maxime Charlebois, Shaheen Acheche. Reza Nourajkan, Jan Guckelberger, Alexis Reymbaut, Charles-David Hébert et Anne-Marie Gagnon. En plus, je remercie le personnel de soutien, professionnels et techniciens qui ont facilité mon cheminement lors de mes études, ceci inclus mais n'est pas restreint à Gilbert Vachon, Patrick Vachon, Hélène Godin et Dominique Parisé.

Il n'est pas toujours facile d'arriver dans une nouvelle ville pour y faire ses études. Toutefois, si on est chanceux, on rencontre des gens merveilleux qui nous font oublier ces difficultés. Je remercie alors Benoît Roberge, ancien collègue de bureau, dont la sincérité, même si brusque lors de la lecture de la première version de mon mémoire, fut toujours appréciée. Je remercie Gabriel Théberge qui fut un de mes premiers contacts avec Sherbrooke et qui le don d'animer des conversations enrichissantes. Je remercie Shaheen "Shasha" Acheche qui réussit toujours à me faire sourire lorsque je broie du noir et qui m'a accompagné au cours des bons et des moins bons jours tout au long de cette maîtrise. Avant même que j'arrive à Sherbrooke, Alexis Reymbaut m'aidait déjà en corrigeant ce que j'avais commencé à rédiger pour ma recherche. Son soutien académique et son amitié ont grandement contribué à la réalisation de ce mémoire. Je remercie Émilie Lefol qui a facilité mon arrivée à Sherbrooke grâce à son accueil chaleureux. Je remercie la communauté de Swing Sherbrooke pour tout les joyeux moments qu'elle m'a apporté. Je remercie l'ensemble de Secours-Amitié Estrie de m'avoir fait réaliser l'importance de la communauté. Toutes les personnes que j'y ai croisé avoir un cœur en or et j'espère pouvoir rapidement recommencer à contribuer aux bien-être des gens tel qu'ils le font. Je remercie Myriam Guindon pour toutes ces merveilleuses conversations et son fabuleux sourire. Je remercie l'ensemble de la communauté du RECSUS (Regroupement des étudiants chercheurs en sciences de l'Université de Sherbrooke) avec qui j'ai partagé tant de pauses et de cafés. Je remercie "la gang de Français". Je remercie ma partenaire de danse et d'escalade Edith Poulin avec qui j'ai eu tant de fou rires.

Finalement, je remercie les personnes qui ont relu certaines parties de ce mémoire : Alexis Reymbaut, Shaheen Acheche, Benoit Roberge, Simon Verret et bien sûr André-Marie Tremblay. Je remercie les membres de mon comité de suivi David Sénéchal et Jeffrey Quilliam pour les commentaires lors de notre rencontre et la lecture de ce mémoire.

À notre mort, tout ce qu'il reste de nous, c'est ce que nous avons donné.

Table des matières

Sommaire	iii
Introduction	1
1 Les matériaux supraconducteurs et leur modélisation	4
1.1 La supraconductivité	4
1.2 Modèle de Hubbard	7
1.3 Supraconducteurs organiques	9
1.4 Transition de Mott	11
1.5 Résumé	13
2 Outils pour problème à N corps	14
2.1 Statistiques quantiques et seconde quantification	14
2.1.1 Statistiques quantiques	14
2.1.2 Fonctions d'état à plusieurs particules	15
2.1.3 Seconde quantification	17
2.1.4 Exemple d'hamiltonien en seconde quantification	19
2.2 Modèle à deux orbitales : Un premier survol	19
2.2.1 Fonction spectrale	22
2.2.2 Concept d'hybridation	22
2.2.3 Interprétation de la fonction de Green	23
2.3 Fonctions de Green en seconde quantification	26
2.4 Système à température finie	27
2.4.1 Définition de la fonction de Green en temps imaginaire	27
2.4.2 Fréquences de Matsubara	28
2.5 Modèle d'impureté de Anderson	29
2.6 Théorie du champ moyen dynamique	31
2.7 Fonction de Green de Nambu	32
2.8 Résumé	34
3 Réponse linéaire et quantités physiques	36
3.1 Rigidité superfluide	36

3.1.1	Approche macroscopique	36
3.1.2	Réponse linéaire	40
3.1.3	Modèle considéré	42
3.2	Surface de Fermi	44
3.3	Poids de quasi-particule	46
3.4	Résumé	49
4	Résultats et analyse	50
4.1	Tests initiaux	50
4.2	Résultats	55
4.2.1	$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$	55
4.2.2	$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$	59
4.3	Discussion	64
	Conclusion	71
A	Complément numérique : Introduction aux fonctions de Green	74
B	Rappel de physique statistique	76
B.1	Code python	77
C	Application des fonctions de Green de Matsubara	80
C.1	Code python	82
D	Démonstration et applications des équations du mouvement	84
D.1	Applications	86
D.1.1	Modèle à deux orbitales	86
D.1.2	Modèle de Anderson en champ moyen	87
E	Application de la formule de Kubo : fonction de corrélation densité-densité	89
E.1	Formule de Kubo particulière	89
E.2	Transformée de Fourier des coordonnées spatiales	90
E.3	Passage en temps imaginaire	91
E.4	Application du théorème de Wick	92
E.5	Transformée de Fourier de la coordonnée temporelle	93
E.5.1	Somme de Matsubara	94
E.6	Résumé	96
F	Réponse paramagnétique inter-plan pour la rigidité superfluide	97
F.1	Changement de base	97
F.2	Spineurs de Nambu	98
F.3	Réponse paramagnétique	100

G Réponse diamagnétique inter-plan pour la rigidité superfluide	103
H Rigidité superfluide en champ moyen (BCS)	106
I Résultats supplémentaires partiels : Rigidité superfluide en fonction de la température	108
Bibliographie	110

Liste des tableaux

- 1.1 Paramètre de bande obtenu par KANDPAL et al. pour les matériaux organiques étudiés. 10

Table des figures

1.1	Température critique T_c en fonction de la longueur de pénétration pour des supraconducteurs organiques. Les différents marqueurs représentent différents matériaux organiques alors que le même marqueur répété représente des conditions expérimentales différentes.	6
1.2	Le graphique illustre une tendance universelle entre ρ_s et σT_c où ρ_s est la rigidité superfluide et σ est la conductivité dans les supraconducteurs. Les différents marqueurs représentent différents matériaux dont la légende est dans le graphique. La bande grise représente $\rho_s = (110 \pm 60) T_c \sigma_{dc}$	7
1.3	À gauche : Représentation graphique d'un réseau en phase κ d'un supraconducteur organique. On peut y voir les plans conducteurs qui forment un réseau anisotrope et les plans d'anion isolant qui les séparent. À droite : Représentation graphique de l'amas (impureté) utilisé en CDMFT. Figure produite par Alexis Reymbaut	8
1.4	Digramme de phase schématisé des supraconducteurs organiques. La figure a été reproduite par Alexis Reymbaut de la référence [52].	10
1.5	Double occupation en fonction de la répulsion coulombienne. La double occupation a été normalisée pour être égale à l'unité à $U = 0$	12
2.1	Action des opérateurs de création et de destruction sur un état fermionique.	17
2.2	Action des opérateurs de création et de destructions sur un état bosonique	18
2.3	Densité d'état au site 1 calculer selon code dans l'Annexe A avec $t = 0.5$ eV , $E_1 = -0.25$ eV, $E_2 = 0.25$ eV et $\eta = 0.01, 0.05$ et 0.1	21
3.1	Schéma illustrant les composantes de la réponse à un champ magnétique ou électrique.	39
3.2	Exemple de surface de Fermi sans interactions pour $\beta = 30/t$ et $t'/t = 0.42$	46
3.3	Schéma représentant la contribution incohérente de la fonction spectrale et le pic de cohérence qui forme la quasi-particule.	47
3.4	Schéma représentant la fonction $1/\cosh(\beta\omega/2)$ qui agit comme une mesure d'intégration à l'Éq. 3.44. Nous pouvons voir que lorsque $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$), la fonction centrera la masse à $\omega = 0$	48

4.1	Surface de Fermi, obtenue selon l'Éq. 3.42 après avoir effectuée la périodisation, décrite à la Section 3.2, de la solution du solveur d'impureté CTQMC avec deux cents vecteurs d'ondes \mathbf{k} à une température de $\beta = 60/t$ et une frustration de $t' = 0.42t$	51
4.2	Surface de Fermi avec deux vecteurs d'ondes de Fermi; un sur chaque diagonale. Nous visualisons la fonction spectrale extrapolée à fréquence nulle (Éq. 3.42) de la fonction de Green sans interaction (Éq. 4.2). Les flèches pointent vers le point sur la diagonale où la valeur de fonction spectrale est maximale. Cela permet de trouver automatiquement deux vecteurs d'onde de Fermi.	52
4.3	Optimisation du nombre de vecteurs d'onde à être utilisé selon la précision de la rigidité superfluide ρ_s	53
4.4	Optimisation du nombre de fréquences de Matsubara à être utilisé selon la précision de la rigidité superfluide ρ_s	53
4.5	Visualisation de la zone de Brillouin dans le cas supraconducteurs. Simulation faite avec $t' = 0.42t$, $U = 5.9t$ et $\beta = 60/t$	54
4.6	Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.42t$ et $U = 6.0t$	54
4.7	Température critique T_c selon l'augmentation de la répulsion coulombienne pour $t' = 0.42t$. Les lignes pointillées indiquent $U_{cs} = 5.3t$, $U_c^1 = 5.8t$ et $U_c^2 = 6.2t$. Les deux derniers sont définies à l'aide de la transition de Mott à la Fig. 4.8a. Les incertitudes varient selon la proximité en températures des simulations effectuées et des variations, dues à l'aspect Monte Carlo des simulations, dans les paramètres d'ordre supraconducteurs près de la transition. Une faible barre d'erreur représente alors une chute bien définie du paramètre d'ordre en fonction de la température.	55
4.8	Étude de la transition de Mott pour $t' = 0.42t$ à $\beta = 60/t$	56
4.9	Étude de l'impact de la supraconductivité sur la transition de Mott pour $t' = 0.42t$ à $\beta = 60$. Nous remarquons un léger décalage de U_{c2} vers la droite lorsque la supraconductivité est présente. Nous comparons le cas où la supraconductivité est autorisée (en vert) avec le cas où elle ne l'est pas (en bleu).	57
4.10	Surface de Fermi avec deux cents vecteurs d'ondes \mathbf{k} avec une répulsion coulombienne de $U = 6.0t$, une température de $\beta = 60/t$ et une frustration de $t' = 0.42t$. Nous comparons le cas où la supraconductivité est autorisée (à droite) avec le cas où elle ne l'est pas (à gauche).	58
4.11	Transition de Mott pour $t' = 0.42t$. À $\beta = 60/t$ (figure gauche), la phase supraconductrice n'est pas autorisée tandis qu'elle est autorisée à $\beta = 80/t$ (figure droite).	58
4.12	En combinant la rigidité superfluide et le poids de quasi-particule, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice.	59

4.13	En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur la diagonale correspondant à l'identité.	60
4.14	En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur l'antidiagonale.	60
4.15	Étude de la transition de Mott pour $t' = 0.58t$ à $\beta = 80/t$	61
4.17	Surface de Fermi avec deux cent vecteurs d'ondes \mathbf{k} avec une répulsion coulombienne de $U = 6.5t$, une température de $\beta = 80/t$ et une frustration de $t' = 0.58t$. Nous comparons le cas où la supraconductivité est autorisée (à droite) avec le cas où elle ne l'est pas (à gauche).	62
4.16	Résultats de simulation effectués à $t' = 0.58t$. Les lignes pointillées représentent $U_c^s = 5.9t$, $U_{c1} = 6.4t$ et $U_{c2} = 6.7t$	62
4.18	Résultats de simulation effectués à $t' = 0.58t$ et $\beta = 80/t$. Les lignes pointillées représentent $U_c^s = 5.9t$, $U_{c1} = 6.4t$ et $U_{c2} = 6.7t$	63
4.19	En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur la diagonale correspondant à l'identité.	63
4.20	En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur l'antidiagonale.	64
4.21	Comparaison des résultats numériques avec la littérature expérimentale pour la température critique du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$	67
4.22	Comparaison des résultats numériques avec la littérature expérimentale pour la masse effective du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$	68
4.23	Comparaison des résultats numériques avec la littérature expérimentale pour la longueur de pénétration du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$	69
B.1	Évolution de l'occupation des sites en fonction de la température selon l'Éq. B.1 en utilisant $\mu = 0$ eV et $E_1 = -0.25$ eV.	77
C.1	Évolution de l'occupation du site en fonctions de la température selon l'Éq. B.1 et C.4 avec $E_1 = 0.25$ eV. Remarquons que l'occupation tend vers 0.5 lorsque la température tend vers l'infini tel qu'attendu.	81
I.1	Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.42t$ et $U = 6.0$	108

I.2	Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.42t$ et $U = 6.15$	109
I.3	Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.58t$ et $U = 6.4$	109
I.4	Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.58t$ et $U = 6.3$	110

Introduction

Huit ans de retard, c'est ce qu'avait Heike Kamerlingh Onnes dans la course aux très basses températures lancée au 19^{ième} siècle. Il liquéfia le dihydrogène en 1906, soit huit ans après Dewar [10] pour atteindre la température de 20 K. Comment a-t-il pu rattraper un tel retard pour finalement être le premier à liquéfier l'hélium en 1908 ? Pour le comprendre, nous devons examiner sa méthode de travail, la philosophie qui le guidait. Il n'était pas le physicien reclus et solitaire qui tente de comprendre l'univers à force d'excentricité. Le credo de son laboratoire était "de la mesure à la connaissance". Pour obtenir ces fameuses mesures, il exigea un haut niveau de professionnalisme de tous les membres de son équipe : techniciens, ouvriers, travailleurs du verre, etc. Entre autres, il créa une association pour la formation des fabricants d'instruments. Il avait alors accès à une main-d'œuvre hautement qualifiée. Même en exigeant beaucoup de son équipe, il savait les traiter avec politesse. Bref, chaque maillon de la chaîne était fort, de la main d'oeuvre jusqu'à l'équipement. En 1890, il travaillait au perfectionnement de la liquéfaction par cascade. Certains ne verront pas d'avantages à perfectionner une méthode déjà utilisée en pleine course. Toutefois, lorsqu'en 1906, il put enfin liquéfier le dihydrogène, cela pouvait être fait en grande quantité de manière fiable et régulière. Après 3 ans de travail, 300 L d'hélium purifié et 1000 L d'air liquéfié étaient à sa disposition. Il s'attaqua ensuite au problème d'obtenir de l'hélium liquide.

Après avoir liquéfié l'hélium en 1908, Onnes était alors prêt à répondre à la question : qu'arrive-t-il à la résistance d'un métal près du zéro absolu ? À cette époque, la théorie classique dominait toujours les esprits. Les prémisses de la théorie quantique n'étaient apparues que 8 ans plus tôt avec la théorie de la radiation du corps noir par Planck en 1900. L'élaboration d'une équation dynamique en théorie quantique ne fut uniquement obtenue que vingt cinq ans plus tard par Schrödinger et Heisenberg. Dans ce contexte, le modèle généralement accepté de la conductivité était le modèle de Drude. Celui-ci était une adaptation de la toute nouvelle théorie cinétique aux électrons dans les solides. Chacun avait alors sa prédiction pour le comportement de la conductivité à très basse température. La première, celle de Kelvin, était que la résistance tendrait vers l'infini près du zéro dû au fait que les électrons se figeraient. La seconde, de Mathiessen, prédisait une valeur finie à $T = 0$ K. La troisième, de Dewar, prédisait que la résistance allait diminuer continûment pour aller à zéro lorsque la température est nulle. En 1911, Onnes en surprit

plus d'un alors en obtenant une disparition de la résistance à une température supérieure au zéro absolu. Sans le savoir, on avait maintenant découvert une nouvelle phase de la matière à basse température. Ces matériaux étaient considérés comme des conducteurs parfaits. Toutefois, lorsque des mesures en champs magnétiques ont été effectuées, nous nous sommes rendus compte que les supraconducteurs réservaient encore des surprises. Sous l'effet d'un champ magnétique, un conducteur parfait garderait le même champ magnétique avant et après la transition vers l'état supraconducteur. Toutefois, ce que Meissner et Ochsenfeld ont observé en 1933 est que le supraconducteur expulse le champ magnétique. La supraconductivité était bien une nouvelle phase de la matière.

Après des années de progrès expérimentaux, il fallut toutefois attendre jusqu'en 1957 pour obtenir une théorie de la supraconductivité. Se basant sur la théorie des liquides de Fermi, la théorie Bardeen-Cooper-Schrieff (BCS) explique l'aspect microscopique de la supraconductivité dans les matériaux métalliques. Eliashberg dans le début des années 60 a ensuite permis de rendre plus quantitative la théorie BCS. Seul point négatif, cette théorie prédit une température critique maximale de 30 K à pression ambiante. Le mystère de la supraconductivité conventionnelle est résolu, mais la limite de 30 K pour la température critique rend les applications des supraconducteurs difficiles. Le rêve que la supraconductivité débouche sur de nouvelles technologies se voit froissé. La découverte de la supraconductivité dans des matériaux organiques et dans des matériaux à fermions lourds remet déjà en question ce que l'on sait de la supraconductivité. En effet, la grande masse effective des fermions lourds rend la théorie inapplicable. De nouveaux espoirs pour la communauté apparaîtront en 1986. Effectivement, Georg Bednorz et K. Alex Müller à IBM découvrent un composé céramique qui devient supraconducteur. La première surprise est que les composés céramiques sont isolants et n'étaient même pas considérés comme des candidats à la supraconductivité. La seconde surprise est qu'ils sont rapidement capables de trouver des variantes qui sont supraconductrices à 77 K. Température bien au-delà des limites permises par la théorie BCS.

Depuis, nous ne sommes toujours pas parvenus à une théorie définitive de cette nouvelle génération de supraconducteurs. Les supraconducteurs sont maintenant séparés en plusieurs grandes familles : les supraconducteurs élémentaires, les alliages, les cuprates, les supraconducteurs organiques, les pnictures, les fermions lourds, etc. Dans les supraconducteurs conventionnels, la longueur de pénétration des supraconducteurs, c.-à-d. la longueur de pénétration de surface d'un champ magnétique dans un supraconducteur (voir Section 3.1.1), n'est pas liée à la température critique. Toutefois, dans les supraconducteurs non-conventionnels, il semble exister une relation universelle entre ces deux quantités (voir Section 1.1) . Puisque la théorie BCS, une théorie à couplage faible, ne permet pas d'expliquer cette relation, nous étudierons cette relation à travers la méthode numérique CDMFT (voir Section 2.6) qui permet d'étudier l'apparition de la

supraconductivité en couplage fort. La grande variété de supraconducteurs nous empêche de tous les étudier en même temps. Nous nous concentrerons alors sur les supraconducteurs organiques qui ont la propriété d'être grandement sensibles à la pression.

Nous verrons au Chapitre 1 comment ces matériaux sont modélisés afin d'effectuer une étude théorique et ensuite numérique. Par la suite, dans le Chapitre 2, nous allons décrire le formalisme nécessaire pour étudier le modèle de Hubbard qui est à la base de leur modélisation. Ainsi, au Chapitre 3, nous pourrions voir comment calculer d'autres quantités physiques pour ce type de modèles dont la rigidité superfluide. Nous décrirons les résultats obtenus au Chapitre 4. Les Annexes A à D servent de complément au Chapitre 2. Les Annexes E à G contiennent les calculs nécessaires pour l'obtention de la rigidité superfluide à partir de la réponse linéaire. À l'Annexe H, nous calculons la rigidité superfluide avec la solution en champ moyen de l'hamiltonien BCS. Finalement, à l'Annexe I, nous retrouvons des résultats supplémentaires obtenus lors de la maîtrise.

Chapitre 1

Les matériaux supraconducteurs et leur modélisation

Ce chapitre débute avec le rappel de quelques bases de la supraconductivité conventionnelle à la Section 1.1. Nous pourrions ainsi introduire le modèle de Hubbard à la Section 1.2 qui est considéré comme une bonne description de la physique à basses énergies des matériaux fortement corrélés. Ces derniers incluent les cuprates qui ont présentement la température critique la plus élevée mais également les supraconducteurs organiques qui nous intéressent. Les cuprates peuvent être dopés en trous ou en électrons pour atteindre une température critique maximale. Toutefois, ils sont très peu compressibles, contrairement aux matériaux organiques. Nous obtenons alors deux classes de matériaux avec des physiques à basses énergies similaires mais avec des contraintes physiques différentes et des réseaux différents. Nous pouvons ainsi explorer une partie différente du diagramme de phase du modèle de Hubbard en l'appliquant aux matériaux organiques. Par la suite, à la Section 1.3, nous décrirons les paramètres de Hubbard qui entreront dans nos simulations. Finalement, à la Section 1.4, nous discuterons brièvement de la transition de Mott qui se produit lorsqu'une pression est appliquée sur des matériaux organiques.

La supraconductivité

La supraconductivité est une phase de la matière où la résistance à un courant électrique continu est nulle et où le champ magnétique est expulsé. Nous nommons le phénomène d'expulsion du champ magnétique l'effet Meissner. Les frères London [41] ont montré la relation entre la rigidité de la phase supraconductrice et l'effet Meissner. Par la suite, l'approche phénoménologique de la théorie de Ginzburg-Landau a permis de comprendre l'aspect macroscopique près de la transition de phase. Toutefois, le mécanisme microscopique d'apparition de la phase supraconductrice demeure un mystère. Ce fut la théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer [5] (BCS) qui permit de pénétrer celui-ci. En effet, à température suffisamment basse, une instabilité près de la surface de Fermi est causée

par une faible attraction effective entre électrons. Les électrons veulent alors former des paires de Cooper [17]. Ces paires sont formées de deux électrons avec des spins opposés et des vecteurs d'onde opposés. Ainsi, de manière effective, elles forment des bosons composites qui peuvent alors acquérir une phase commune pour former un état cohérent similaire à un condensat de Bose-Einstein.

Puisque les prédictions de la théorie BCS sont basées sur des calculs en champs moyens, elles ignorent alors l'impact des fluctuations. La théorie BCS permet alors de faire des prédictions pour une certaine classe de matériaux dits supraconducteurs conventionnels mais ne peut pas être utilisée pour les supraconducteurs non-conventionnels. La méthode numérique *théorie du champ moyen dynamique* (DMFT) [27], décrite à la Section 2.6, permet de récupérer les fluctuations temporelles, mais non spatiales, à moyenne et grande portées.

Qu'est-ce qui distingue la supraconductivité conventionnelle décrite par la théorie BCS et les autres ? D'abord, les supraconducteurs conventionnels sont des matériaux décrits par la théorie des bandes de Wilson qui est basée sur le théorème de Bloch. Le théorème de Bloch stipule que la fonction d'onde d'une particule dans un réseau périodique peut s'écrire $\phi(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ où $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ a la périodicité du réseau [2]. Dans la théorie des bandes, les matériaux sont décrits par une relation de dispersion entre l'énergie et les vecteurs d'onde. Le spectre d'énergie forme des bandes qui donnent leurs noms à la théorie. En supposant la température nulle, nous pouvons alors remplir les états de plus basses énergies avec les électrons de valence du matériau. Lorsque le remplissage est complété, nous arriverons généralement à des bandes à demi-remplies ou pleinement remplies. Le dernier électron ajouté aura la plus grande énergie, appelée l'énergie de Fermi. Si la distance en énergie entre cet état et le suivant est infinitésimale, celui-ci pourra être excité par un champ électrique et nous aurons alors un conducteur. Si toutefois, un écart fini appelé *gap* sépare ces deux niveaux d'énergie, nous aurons un semiconducteur ou un isolant selon la grandeur de celui-ci. Curieusement, certains matériaux ayant des bandes à demi-remplies sont isolants malgré le fait que la théorie des bandes prédise qu'ils soient conducteurs. Nous nommons cette classe d'isolants des isolants de Mott. Ce qui les distingue est que la théorie des bandes suppose que les électrons interagissent faiblement entre eux alors que dans ces matériaux la répulsion coulombienne entre les électrons n'est pas négligeable. En effet, celle-ci devient si importante que les électrons se freineront entre eux. Les cuprates et les matériaux organiques supraconducteurs sont des matériaux fortement corrélés régis par cette physique dite de Mott.

Une autre distinction entre ces matériaux et les supraconducteurs conventionnels doit être soulignée. Dans les matériaux supraconducteurs conventionnels, l'attraction effective entre les électrons qui forment des paires de Cooper est due aux phonons alors que dans les matériaux supraconducteurs à haute température, il est vraisemblable de croire que l'appariement se fait à travers les fluctuations de spin [59].

Après plusieurs années de recherches dans le domaine, la communauté est arrivée à plusieurs relations qui semblent communes à un grand nombre de supraconducteurs. Dans la revue de POWELL et MCKENZIE [52], on illustre (voir Fig. 1.1) que dans la théorie BCS, la rigidité superfluide et la température critique sont indépendantes alors que nous pouvons voir qu'il semble exister une relation universelle entre celles-ci dans les matériaux organiques. D'autres travaux, DORDEVIC et al. [20] et DORDEVIC, BASOV et HOMES [19], s'intéressent à ce type de relation universelle. À la Fig. 1.2, nous pouvons observer une relation entre ρ_s et $\sigma_{dc}T_c$ où ρ_s est la rigidité superfluide et σ_{dc} est la conductivité à courant continu juste au dessus de la température critique. Il est important de constater que, selon DORDEVIC, BASOV et HOMES, la plupart des supraconducteurs suivent cette loi, incluant des supraconducteurs organiques et les supraconducteurs conventionnels. Toutefois, en plus du grand nombre de paramètres variant d'un matériel à l'autre, des difficultés expérimentales peuvent expliquer les grandes barres d'erreur de type de graphique universel. Afin d'éliminer ces variations, nous considérerons seulement quelques matériaux faisant partie des supraconducteurs organiques dans notre étude et observerons l'impact de la variation de l'équivalent numérique de la pression sur ceux-ci. L'étude de cet impact pourra alors peut-être éclaircir l'origine de ces possibles lois universelles.

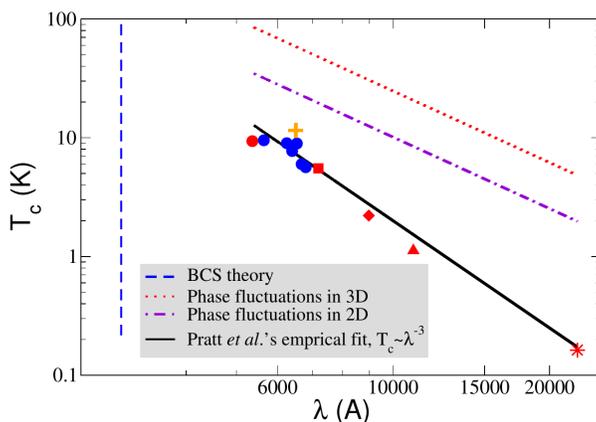


FIGURE 1.1 Température critique T_c en fonction de la longueur de pénétration pour des supraconducteurs organiques. Les différents marqueurs représentent différents matériaux organiques alors que le même marqueur répété représente des conditions expérimentales différentes. Figure tirée de la Réf. [52].

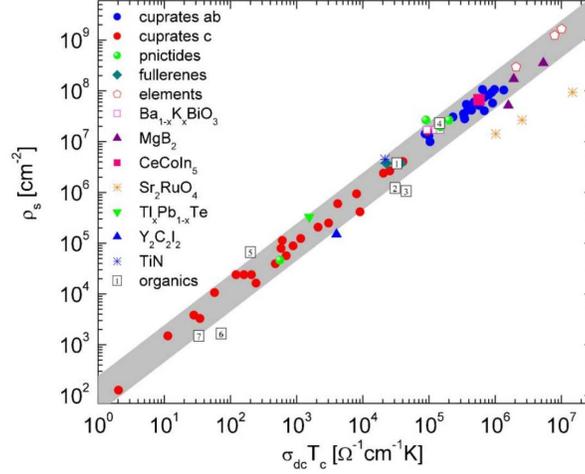


FIGURE 1.2 Le graphique illustre une tendance universelle entre ρ_s et σT_c où ρ_s est la rigidité superfluide et σ_{dc} est la conductivité à courant continu juste au dessus de la température critique. Les différents marqueurs représentent différents matériaux dont la légende est dans le graphique. La bande grise représente $\rho_s = (110 \pm 60)\sigma_{dc} T_c$. Tirée de la Réf. [19].

Modèle de Hubbard

Dans cette section, nous débuterons avec le modèle du couplage fort qui favorise une description localisée spatialement d'états dans laquelle peuvent se trouver les électrons. Ceux-ci sont composés des orbitales atomiques des électrons de valence. Si ces dernières se recouvrent, les électrons pourront passer d'un site à un autre. Les cuprates et les BEDT¹ ont la même propriété d'être des matériaux quasi bidimensionnels. Ils ont alors des plans bidimensionnels où la conductivité peut être trois ordres de grandeur plus grande que celle entre ceux-ci [21]. L'hamiltonien de Hubbard en deux dimensions est [28]

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.1)$$

où le premier terme représente l'énergie cinétique et le second l'interaction de Coulomb locale. Nous avons noté que $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. La relation de dispersion ϵ_k dépendra du couplage entre les sites. Dans le cas d'un couplage (ou saut) uniquement entre premiers voisins sur un réseau carré, nous aurons la relation de dispersion $\epsilon_k = -2t (\cos k_x + \cos k_y) - \mu$ où μ est le potentiel chimique. Dans le cas où nous avons également un couplage aux seconds voisins dans une seule direction diagonale, celle-ci devient $\epsilon_k = -2t (\cos k_x + \cos k_y) - 2t' \cos(k_x + k_y) - \mu$. C'est le cas des matériaux organiques qui ont la caractéristique de former un réseau anisotrope. Les matériaux sont alors caractérisés

1. (BEDT-TTF) biethylenedithio-tetrathiafulvalene

par t'/t , U/t et n où n est le remplissage. Selon la structure de bande [33], nous avons de manière effective une bande à demi-remplie. Ainsi, dans la prochaine section, Section 1.3, outre le remplissage qui sera toujours le même, nous allons associer différents paramètres à différents matériaux.

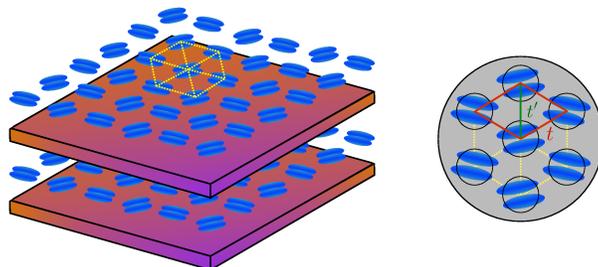


FIGURE 1.3 À gauche : Représentation graphique d'un réseau en phase κ d'un supraconducteur organique. On peut y voir les plans conducteurs qui forment un réseau anisotrope et les plans d'anion isolant qui les séparent. À droite : Représentation graphique de l'amas (impureté) utilisé en CDMFT. Figure produite par Alexis Reymbaut

Malheureusement, aucune solution analytique au modèle de Hubbard à deux dimensions n'est connue. Si le terme d'interaction est nul ($U = 0$), le vecteur d'onde de chaque électron est un bon nombre quantique et nous pouvons alors décrire les propriétés du matériau avec la théorie des bandes. La répulsion coulombienne, lorsque présente, aura pour effet de créer une compétition entre la localisation des électrons et leur délocalisation. Cette compétition entraîne que ni la description totalement locale ni la description de Bloch n'est appropriée. La communauté a alors recours à des méthodes numériques. Plutôt que de résoudre l'entièreté du réseau, la méthode utilisée se concentre sur une petite région du réseau appelé impureté qui est soumise à un bain extérieur qui représente en moyenne le reste du réseau. La solution est ensuite convertie pour obtenir une solution approximative au réseau. Cette méthode numérique est la *théorie du champ moyen dynamique sur amas* (CDMFT). Tel que mentionné à la Section 1.1, la physique à courte portée est importante pour la classe de matériaux étudiée. L'utilisation d'un amas comme impureté en CDMFT plutôt qu'un seul site tel qu'en DMFT permet d'inclure une physique à courte portée plus riche. Pour résoudre l'impureté, nous utiliserons le *Continuous-Time Quantum Monte Carlo* (CTQMC). En utilisant ces résultats numériques, nous pourrons ainsi étudier la longueur de pénétration prédite par ces modèles et la comparer aux expériences. À la Section 2.5, nous verrons le modèle d'impureté de Anderson qui est à la base de la DMFT et, par extension, la CDMFT.

Supraconducteurs organiques

Dans la famille des supraconducteurs organiques de la famille BEDT-TTF (biethylenedithio-tetrathiafulvalene), $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ et $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ ont les températures critiques les plus élevées à pression ambiante : $T_c = 10.4 \text{ K}$ et 11.6 K respectivement. Ces sels sont composés de molécules presque planaires $\text{S}_8\text{C}_{10}\text{H}_4$. Dans la phase κ , l'orientation de ces dernières est alternée (voir Fig. 1.3). Les molécules donnent toutes $-0.5e$ et sont donc laissées avec la moitié d'un trou. Tel que mentionné à la Section 1.2, nous considérons alors une seule bande à demi-remplie. Tel qu'illustré à la Fig. 1.3, ces plans de conduction sont séparés par des anions, $\text{Cu}[(\text{NCS})_2]^-$ et $\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}^-$ respectivement. Dans leur modélisation à l'aide du modèle de Hubbard, les dimères constituent des sites effectifs localisés. Ces derniers forment un réseau bidimensionnel anisotrope. L'amas utilisé pour la CDMFT sera alors composé de quatre sites situés sur les quatre coins d'un carré. Les côtés du carré représentent le paramètre de saut t . Nous aurons également une diagonale qui reliera deux extrémités du carré qui représente le paramètre t' qui crée une anisotropie telle que vue à la Fig. 1.3. Au côté droit de la même figure, on peut voir une représentation graphique de l'amas utilisé lors des calculs en CDMFT.

Afin de déterminer les paramètres U , t et t' de la modélisation, des calculs ab-initio sont nécessaires. Considérons d'abord le cas du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$. Selon KANDPAL et al. [36], le ratio $t'/t = 0.58$. Cette valeur est près de celle de NAKAMURA et al. [43] où ils ont obtenu $t'/t = 0.66$. Ces valeurs sont cohérentes avec celle de POWELL et MCKENZIE [52]. Toutefois, la valeur du paramètre U varie plus grandement entre ces études. Par exemple, elle passera de $6t$ selon KANDPAL et al. [36] à $\approx 12 - 15t$ selon NAKAMURA et al. [43]. Puisque la valeur de la frustration, t'/t varie de manière moins drastique d'une étude à l'autre, celle-ci caractérisera nos matériaux avec une certaine incertitude. En plus, il est souvent convenu que U/t varie en fonction de la pression, mais que t'/t varie de manière moins significative [52]. Nous effectuerons alors nos simulations en changeant la valeur de t/U dans le modèle. Cela correspondra physiquement à un changement de pression d'un même matériau. Lors de l'interprétation des résultats, nous nous rappellerons toutefois que la pression influence également le ratio t'/t . Expérimentalement, le ratio t/U peut également dépendre de la pression chimique. Celle-ci est changée en variant la stœchiométrie de l'anion de Br pour du Cl tel qu'effectué par DUMM et al. [22].

TABLE 1.1 Paramètres de bande obtenus par KANDPAL et al. [36] pour les matériaux organiques étudiés.

	$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}_2\text{CN}_3$	$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$	$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[N(\text{CN})_2]\text{Cl}$	$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[N(\text{CN})_2]\text{Br}$
$ t'/t $	0.83 ± 0.08	0.58 ± 0.05	0.44 ± 0.05	0.42 ± 0.08
U/t	7.3	6.0	5.5	5.1

Le diagramme de phase d'un composé représente notre carte pour son exploration. Si nous observons le diagramme de phase des matériaux organiques schématisé à la Fig. 1.4, nous constatons que les matériaux étudiés sont dans leur état métallique avant d'atteindre l'état supraconducteur en diminuant la température. Nous constaterons également que la phase supraconductrice se retrouve près d'une phase magnétique, soit la phase antiferromagnétique. Le diagramme de phase de ces matériaux a été grandement étudié [30, 53, 38, 45, 66, 52].

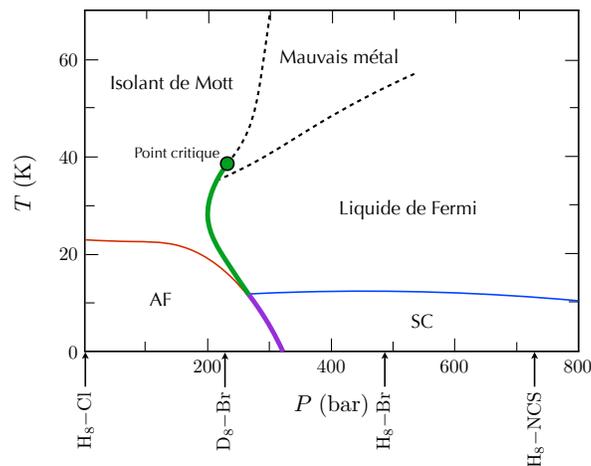


FIGURE 1.4 Diagramme de phase schématisé des supraconducteurs organiques. La figure a été reproduite par Alexis Reymbaut de la référence [52].

Transition de Mott

La transition de Mott correspond au passage d'un état métallique à un isolant de Mott, c'est-à-dire un matériau qui est isolant en raison de l'interaction coulombienne. Cette transition a été observée dans la phase normale des supraconducteurs organiques. Afin d'observer celle-ci, nous suivrons l'évolution de la double occupation $D \equiv \frac{1}{4} \sum_{i \in \text{amas}} \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$. En effet, dans l'hamiltonien de Hubbard (Éq. 1.1), c'est cette quantité qui régit l'énergie potentielle causée par la répulsion coulombienne. Supposons que nous débutons avec un matériau décrit par une bande à demi-remplie sans interaction, c'est-à-dire $U = 0$. Les électrons sont alors délocalisés dans leurs états de Bloch. Puisque ces électrons n'interagissent pas, nous obtenons que

$$\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle = \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle \quad (1.2)$$

$$= \langle n_{i\uparrow} \rangle^2 \quad (1.3)$$

$$= 0.5^2, \quad (1.4)$$

soit $D = 0.25$. Nous sommes dans l'état métallique. Si nous augmentons la répulsion coulombienne, c'est-à-dire $U > 0$, la double occupation va diminuer rapidement selon une tendance observée comme étant linéaire. Arrivera un certain point où, afin de diminuer l'énergie due à la répulsion coulombienne, les électrons de conduction vont se localiser. Nous serons alors rendus dans la phase isolante. À ce stade, nous observerons une chute drastique de la double occupation. Cette transition a été étudiée dans la phase normale par OIKE et al. [45] et sa relation avec la phase supraconductrice à température nulle par KYUNG et TREMBLAY [38] et SAHEBSARA et SÉNÉCHAL [57]. Puisque la transition de Mott est de premier ordre [4], nous retrouvons une zone d'hystérèse. Dans la présente étude, nous nous intéresserons à la relation entre cette transition et la rigidité superfluide afin d'étudier la relation vue à la Fig. 1.1. Nous pouvons visualiser la transition à la Fig. 1.5

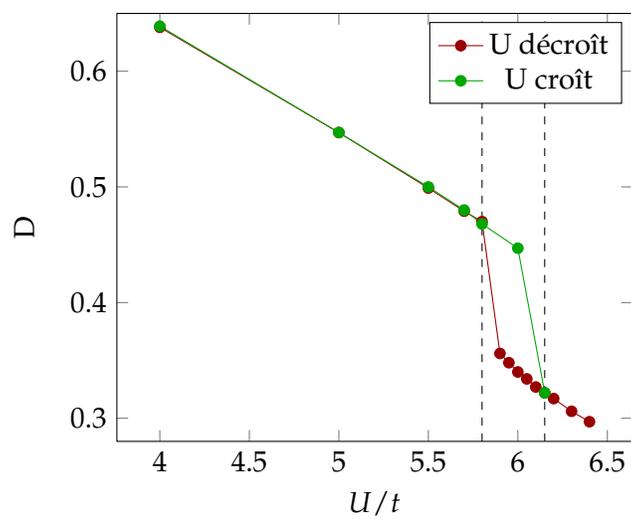


FIGURE 1.5 Double occupation en fonction de la répulsion coulombienne. La double occupation a été normalisée pour être égale à l'unité à $U = 0$.

Résumé

Un résultat surprenant est généralement ce qu'il faut pour inspirer des travaux de recherche. Dans les supraconducteurs organiques, comme vu à la Fig. 1.1, une relation universelle semble exister entre la température critique T_c et la longueur de pénétration λ . Celle-ci ne peut être décrite par la théorie BCS. Par conséquent, comprendre ce phénomène peut nous renseigner sur la phase supraconductrice dans ces matériaux.

Les matériaux organiques sont composés de plans bidimensionnels hautement conducteurs séparés par des plans isolants. Le réseau bidimensionnel est anisotrope et sa relation de dispersion est alors $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t (\cos k_x + \cos k_y) - 2t' \cos(k_x + k_y) - \mu$ où μ est le potentiel chimique. La bande est à demi remplie et l'hamiltonien utilisé est celui de Hubbard :

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.5)$$

Nous étudierons deux matériaux, soit le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ et $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$, qui seront caractérisés par le ratio t'/t selon les valeurs du Tableau 1.1. Nous observerons la variation de certaines quantités physiques selon la variation du paramètre t/U qui correspond expérimentalement à une valeur de la pression hydrostatique ou chimique. Cela va induire une transition de l'état métallique vers l'état isolant, c.-à-d. une transition de Mott (voir Section 1.4). Afin de suivre cette transition, nous observerons la double occupation

$$D \equiv \frac{1}{4} \sum_{i \in \text{amas}} \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle \quad (1.6)$$

qui sera caractérisée par un saut à la transition tel que vu à la Fig. 1.5. Au Chapitre 3, nous verrons comment d'autres quantités physiques varient lors de cette transition de phase. Toutefois, nous devons d'abord introduire au Chapitre 2 les outils analytiques du problème à N corps.

Chapitre 2

Outils pour problème à N corps

Dans ce chapitre, nous définirons les fonctions d'états à plusieurs particules. Celles-ci devront respecter des propriétés spécifiques aux bosons ou aux fermions. Puisque la notation des fonctions d'état peut rapidement devenir lourde, la notation de la seconde quantification sera introduite à la Section 2.1. Par la suite, à la Section 2.2, nous introduirons les fonctions de Green à l'aide d'un modèle simple, soit le modèle à deux orbitales. À la Section 2.3, nous définirons la fonction de Green en seconde quantification pour ensuite voir celle-ci dans le cas des températures finies à la Section 2.4. À la Section 1.1, nous avons discuter de la modélisation des matériaux organiques à l'aide du modèle de Hubbard et de la résolution de celui à l'aide des méthodes numériques *théorie du champ moyen dynamique* (DMFT) et *théorie du champ magnétique sur amas* (CDMFT). Ainsi, nous verrons à la Section 2.5 l'hamiltonien de Anderson sur lequel ces méthodes sont basées. Finalement, les fonctions de Green de Nambu seront introduites à la Section 2.7 en utilisant l'hamiltonien BCS.

Statistiques quantiques et seconde quantification

Statistiques quantiques

Un fermion est une particule à spin demi-entier qui obéit à la statistique de Fermi-Dirac. Un exemple de fermion est l'électron. Un fermion obéit au principe d'exclusion de Pauli selon lequel deux fermions ne peuvent simultanément se trouver dans le même état quantique. Pour chaque état quantique, il y a alors deux possibilités. L'état peut être occupé ou vide. La définition usuelle du boson est que c'est une particule de spin entier qui obéit à la statistique de Bose-Einstein. Un boson n'obéit pas au principe d'exclusion de Pauli. Pour chaque état quantique, il peut donc alors y

avoir 0, 1, 2, 3, ... bosons occupant cet état. Dans le cas d'un gaz de particules sans interaction, les distributions d'occupation $n_\zeta(E_i)$ d'un l'état i en fonction de l'énergie E_i sont donnés par

$$n_\zeta(E_i) = \frac{1}{\exp\left[\frac{E_i - \mu}{k_B T}\right] - \zeta} . \quad (2.1)$$

où k_B est la constante de Boltzmann, T est la température, $\zeta = 1$ pour des bosons et $\zeta = -1$ pour des fermions. Nous utiliserons également la notation $n_F(E_i)$ et $n_B(E_i)$ pour les distributions fermionique et bosonique respectivement.

D'un point de vu plus fondamental, nous pouvons distinguer les fermions et bosons selon leur signature sous l'échange de deux particules. Définissons l'opérateur d'échange de particule $Z[\Psi(\xi_1, \xi_2)] \equiv \zeta\Psi(\xi_2, \xi_1)$. En l'appliquant deux fois sur la fonction d'état, nous retrouvons la fonction initiale avec un facteur $\zeta^2 = 1$. En d'autres mots, cela veut dire que si nous appliquons l'opérateur d'échange de deux particules sur la fonction d'état $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ alors la valeur propre associée doit être -1 pour des fermions ou +1 pour des bosons.

Fonctions d'état à plusieurs particules

Maintenant que nous nous rappelons des statistiques quantiques, nous sommes prêts à construire une fonction d'état $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ à deux fermions ξ_1 et ξ_2 . Supposons que nous avons deux états quantiques normalisés ϕ_1 et ϕ_2 . Puisque nous avons deux états et deux particules, les deux états doivent être remplis. Notre première tentative peut donc être de simplement remplir chacun des états pour obtenir

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) \equiv \phi_1(\xi_1)\phi_2(\xi_2) \quad (2.2)$$

Cela correspond à mettre la particule 1 dans l'état 1 et la particule 2 dans l'état 2. Pour un fermion, nous avons la propriété que $\Psi(\xi_1, \xi_2) = -\Psi(\xi_2, \xi_1)$. Toutefois, la fonction d'état définie à l'Éq. 2.2 ne respecte pas la signature fermionique :

$$Z[\Psi(\xi_1, \xi_2)] = \Psi(\xi_2, \xi_1) \quad (2.3)$$

$$= \phi_1(\xi_2)\phi_2(\xi_1) \quad (2.4)$$

$$\neq -\Psi(\xi_1, \xi_2) \equiv -\phi_1(\xi_1)\phi_2(\xi_2) \quad (2.5)$$

La fonction d'état à plusieurs particules ayant cette propriété est

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) \equiv \frac{1}{\sqrt{2!}} \left[\phi_1(\xi_1)\phi_2(\xi_2) - \phi_1(\xi_2)\phi_2(\xi_1) \right] \quad (2.6)$$

où le facteur $\sqrt{2!}$ sert à normaliser la fonction d'état. Remarquons que l'Éq. 2.6 peut s'écrire sous la forme d'un déterminant comme

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) \equiv \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\xi_1) & \phi_1(\xi_2) \\ \phi_2(\xi_1) & \phi_2(\xi_2) \end{vmatrix}. \quad (2.7)$$

Ce déterminant est appelé déterminant de Slater. Chaque ligne du déterminant correspond alors à un état quantique et chaque colonne à une particule. La raison pour laquelle nous voulons que $\Psi(\xi_1, \xi_2) = -\Psi(\xi_2, \xi_1)$ est maintenant plus évidente. On se rappelle que selon le principe d'exclusion de Pauli, deux fermions ne peuvent être dans le même état quantique. Supposons donc que nous ayons uniquement un état quantique ϕ_1 . Les deux particules sont alors placées dans l'état ϕ_1 . Deux colonnes identiques impliqueront un déterminant nul. Cet état est alors interdit. Ainsi, nous avons construit une fonction d'onde à plusieurs particules qui respecte la propriété d'exclusion de Pauli pour les fermions.

Pour un boson, la fonction doit être symétrique sous la permutation de deux particules, i.e. $\Psi(\xi_1, \xi_2) = \Psi(\xi_2, \xi_1)$. En d'autres mots, cela veut dire que si nous appliquons l'opérateur d'échange de deux particules sur la fonction d'état $\Psi(\xi_1, \xi_2)$ alors la valeur propre associée doit être +1. La fonction d'état à plusieurs particules s'écrira

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) \equiv \text{perm} \begin{pmatrix} \phi_1(\xi_1) & \phi_1(\xi_2) \\ \phi_2(\xi_1) & \phi_2(\xi_2) \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{2!}} (\phi_1(\xi_1)\phi_2(\xi_2) + \phi_1(\xi_2)\phi_2(\xi_1)) , \quad (2.9)$$

où perm correspond au permanent, c'est-à-dire à la même fonction que le déterminant en remplaçant les signes négatifs par des signes positifs.

En bref, les deux types de particules qui nous intéressent, soit les fermions et les bosons, sont caractérisées par le signe de la fonction d'état sous la permutation de deux particules. La fonction d'état à plusieurs particules peut alors être écrite comme un déterminant, dans le cas des fermions, ou comme un permanent, dans le cas des bosons. Cette méthode de construction induit une complexité croissante rapidement avec le nombre de particules n . En effet, nous aurons $n!$ termes dans le déterminant. Nous allons donc voir le formalisme de la seconde quantification afin que la complexité reste au minimum tout en respectant la statistique des particules.

Seconde quantification

Les opérateurs de création et de destruction permettront maintenant l'écriture compacte des fonctions d'état et hamiltoniens à plusieurs particules. Les relations de commutation des opérateurs de création et de destruction caractérisent ce type d'opérateurs. Nous verrons, avec l'exemple simple de deux particules et de deux états, que ces relations permettent de construire la fonction d'état à plusieurs particules ayant la signature appropriée selon le type de particule.

Supposons que nous avons un ensemble d'opérateurs $\{a_\nu\}$. Nous noterons leurs adjoints $\{a_\nu^\dagger\}$. Si ces opérateurs possèdent les propriétés

$$\boxed{[a_\nu, a_{\nu'}^\dagger]_{-1} = \delta_{\nu\nu'}} \quad \text{et} \quad (2.10)$$

$$\boxed{[a_\nu, a_\nu]_{-1} = [a_\nu^\dagger, a_\nu^\dagger]_{-1} = 0} \quad (2.11)$$

où $[A, B]_\zeta \equiv AB - \zeta BA$, alors nous dirons que les opérateurs a_ν et a_ν^\dagger sont respectivement des opérateurs de destruction et de création fermioniques. L'opérateur

$$n_\nu \equiv a_\nu^\dagger a_\nu \quad (2.12)$$

est appelé opérateur de dénombrement. Ce dernier est nommé ainsi car il est possible de montrer que ses valeurs propres sont 0 ou 1 [44]. Nous pouvons alors interpréter le vecteur propre associé comme étant l'état quantique défini par ν . La valeur propre est alors interprétée comme si l'état est occupé (1) ou vide (0). Les opérateurs de création et de destruction sont appelés ainsi, car, tel qu'illustré à la Fig. 2.1, ils permettent de passer de l'état vide à l'état occupé et de l'état occupé à l'état vide respectivement.

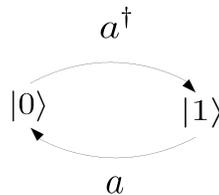


FIGURE 2.1 Action des opérateurs de création et de destruction sur un état fermionique.

Si les particules que nous décrivons sont des bosons, alors nous voudrions que les opérateurs

$\{b_\nu\}$ et $\{b_\nu^\dagger\}$ satisfassent les relations

$$\boxed{[b_\nu, b_{\nu'}^\dagger]_{+1} = \delta_{\nu\nu'}} \quad \text{et} \quad (2.13)$$

$$\boxed{[b_\nu, b_{\nu'}]_{+1} = [b_\nu^\dagger, b_{\nu'}^\dagger]_{+1} = 0} . \quad (2.14)$$

Il est alors possible de montrer que les valeurs propres de $n_\nu = b_\nu^\dagger b_\nu$ sont 0, 1, 2, 3, .. [44] Cela s'interprète alors physiquement comme l'occupation d'un état bosonique. Les opérateurs de création et de destruction permettent donc, tel qu'illustré à la Fig. 2.2, de diminuer l'occupation d'un état en détruisant une particule ou l'augmenter en y créant une particule.

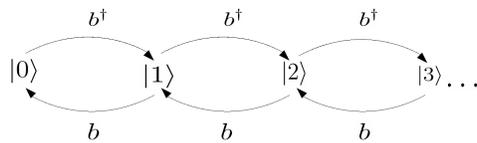


FIGURE 2.2 Action des opérateurs de création et de destructions sur un état bosonique

Nous avons défini des opérateurs fermionique $\{a, a^\dagger\}$ ou bosonique $\{b, b^\dagger\}$. Nous montrerons maintenant comment créer une fonction d'état à plusieurs particules à partir de ceux-ci. Pour ce faire nous allons reprendre l'exemple de nos deux fermions avec deux état. À l'état ϕ_1 nous associerons l'opérateur a_1 et à l'état ϕ_2 l'opérateur a_2 . Ces opérateurs agissent sur l'état fondamental dénoté par $|0\rangle$. La fonction d'état où une particule se trouve dans l'état 1 et une dans l'état 2 s'écrit alors

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle , \quad (2.15)$$

où nous avons étiqueté les fermions de la gauche vers la droite selon les opérateurs de création. La relation d'anticommutation définie à l'Éq. 2.10 nous garanti l'antisymétrie de la fonction d'état. En effet, nous avons

$$\Psi(\xi_2, \xi_1) = \frac{1}{\sqrt{2!}} a_2^\dagger a_1^\dagger |0\rangle \quad (2.16)$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2!}} a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle \quad (2.17)$$

$$= -\Psi(\xi_1, \xi_2) . \quad (2.18)$$

Les opérateurs bosoniques sont utilisés de manière similaire. L'utilisation d'étiquettes pour les particules est donc maintenant totalement superflue grâce à l'utilisation de ces opérateurs. Il est alors suffisant, pour décrire un état à plusieurs particules, de spécifier le nombre de particules dans chacun des états à une particule. Cette représentation est appelée la représentation en nombre

d'occupation (voir section 1.4 du livre de NEGELE et ORLAND [44]).

Exemple d'hamiltonien en seconde quantification

Pour conclure cette section, nous illustrerons l'utilisation de la seconde quantification en construisant un hamiltonien jouet qui satisfait à notre intuition. Physiquement, supposons que si la particule est dans l'état centré sur une position (ou site) x_1 , elle possède une énergie E_1 et une énergie E_2 si elle est dans l'état centré sur une position (ou site) x_2 . Les termes de l'hamiltonien représentant ces états physiques seront donc

$$H_{site} = E_1 a_1^\dagger a_1 + E_2 a_2^\dagger a_2 . \quad (2.19)$$

Avec cet hamiltonien, la particule ne peut toutefois pas se déplacer de x_1 à x_2 . Supposons alors que la particule gagne à se délocaliser entre les deux états en diminuant son énergie de $t > 0$. Nous pouvons alors ajouter le terme cinétique

$$H_{cin} = -t a_2^\dagger a_1 - t^* a_1^\dagger a_2 . \quad (2.20)$$

où le symbole $*$ représente le conjugué complexe. L'hamiltonien devient alors

$$H = E_1 a_1^\dagger a_1 + E_2 a_2^\dagger a_2 - t a_2^\dagger a_1 - t^* a_1^\dagger a_2 \quad (2.21)$$

$$= \sum_{i=1,2} E_i \hat{n}_i - t a_2^\dagger a_1 - t^* a_1^\dagger a_2 \quad (2.22)$$

Le premier terme compte donc le nombre de particules sur les sites et leur associe leurs énergies propres. Le second terme correspond à l'énergie de saut d'une particule du site 1 au site 2. Nous avons donc pu, grâce aux opérateurs de création et de destruction, construire un hamiltonien qui correspondait à notre intuition physique d'un système simple. Dans un cas réel, les facteurs E_1 , E_2 et t devraient alors être obtenus de manière empirique ou avec des calculs *ab initio*. Rappelons qu'au Chapitre 1, nous avons vu les valeurs des paramètres du modèle de Hubbard pour les matériaux organiques obtenues par des calculs *ab initio*.

Modèle à deux orbitales : Un premier survol

Dans cette section, nous allons étudier l'exemple d'une molécule à deux sites pour introduire un premier type de fonction de Green. Cette section est une adaptation de la section 8.3 de la référence [18]. Nous considérons que la température est nulle. Continuons donc avec l'hamiltonien

$$H = E_1 a_1^\dagger a_1 + E_2 a_2^\dagger a_2 - t a_2^\dagger a_1 - t^* a_1^\dagger a_2 . \quad (2.23)$$

Physiquement, cela pourrait correspondre à deux orbitales atomiques avec un électron pouvant passer de l'une à l'autre. Supposons que t est réel et donc que $t^* = t$. On peut écrire l'hamiltonien sous forme matricielle comme

$$H = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & -t \\ -t & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

On se rappelle que de manière implicite, les opérateurs de création et de destruction agissent sur l'état fondamental du système et donc on peut lire l'hamiltonien précédent comme

$$H = \begin{pmatrix} |1\rangle & |2\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & -t \\ -t & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1| \\ \langle 2| \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

$$= E_1 |1\rangle \langle 1| + E_2 |2\rangle \langle 2| - t (|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|). \quad (2.26)$$

Nous allons maintenant définir pour la première fois une fonction de Green. Cette définition est celle en représentation d'opérateur. La fonction de Green retardée d'un système à une particule est donc

$$G^R(\omega) \equiv [(\omega + i\eta) \mathbb{I} - H]^{-1} \quad (2.27)$$

où ω est l'énergie de l'excitation puisque nous avons pris $\hbar = 1$ et η est un infinitésimal positif.¹ Si nous avons une base de vecteurs d'états à une particule $|v\rangle$ dans laquelle l'hamiltonien est diagonal, la fonction de Green peut alors s'écrire

$$G^R(\omega) \equiv \sum_v \frac{|v\rangle \langle v|}{(\omega + i\eta) - E_v}. \quad (2.28)$$

Si nous considérons un hamiltonien avec un seul site isolé

$$H = E_1 |1\rangle \langle 1|, \quad (2.29)$$

la fonction de Green sera

$$G^R(\omega) = \frac{|1\rangle \langle 1|}{(\omega + i\eta) - E_1}. \quad (2.30)$$

Cette fonction de Green est importante malgré sa trivialité, car elle deviendra notre point de départ pour comprendre l'impact de l'ajout d'un échange avec un autre site. Cet impact sera vu dans la Section 2.2.2.

1. Cet infinitésimal positif $\eta = 0^+$ peut être vu de trois manière différente. Physiquement, celle-ci représente l'activation adiabatique des interactions dans notre système (voir théorème de Gell-Man et Low à la référence [24]), le signe positif de la partie imaginaire s'imposant par la causalité. Analytiquement, il assure la convergence lors des transformées de Fourier entre le temps et l'énergie. Numériquement, il sert de stabilisateur en créant une largeur à des fonctions delta de Dirac.

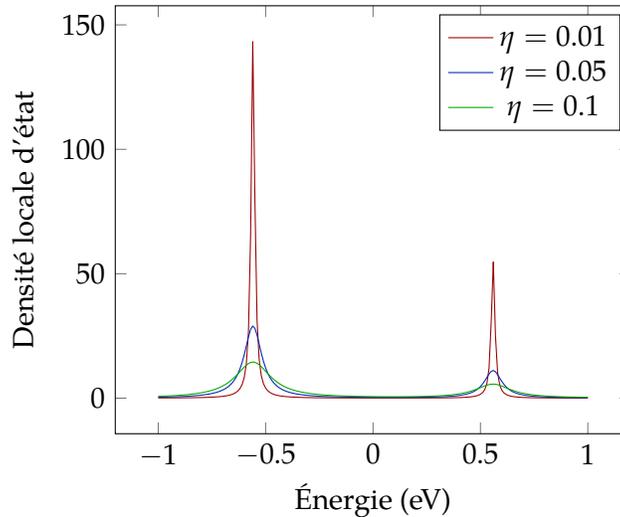


FIGURE 2.3 Densité d'état au site 1 calculer selon code dans l'Annexe A avec $t = 0.5$ eV , $E_1 = -0.25$ eV, $E_2 = 0.25$ eV et $\eta = 0.01, 0.05$ et 0.1

Nous aimerions déjà pouvoir étudier notre système avec la fonction de Green définie à l'Éq. 2.27. La densité d'état locale peut, sous certaines approximations, être mesurée en microscopie à effet tunnel (Section 8.4 dans la référence [11]). Nous démontrerons à la section 2.2.1 que la densité d'état locale au site 1 est l'élément A_{11} de la fonction spectrale A défini par

$$A(\omega) \equiv i \left[G^R(\omega) - G^A(\omega) \right] \quad (2.31)$$

où $G^A(\omega)$ est la fonction de Green avancée. En fréquence réelle, cette dernière est l'adjoint de la fonction de Green retardé, c'est-à-dire que $G^A(\omega) = [G^R(\omega)]^\dagger$. L'élément qui nous intéresse sera donc

$$A_{11}(\omega) = i \left[G_{11}^R(\omega) - G_{11}^A(\omega) \right] \quad (2.32)$$

$$= -2\text{Im} \left[G_{11}^R(\omega) \right], \quad (2.33)$$

où nous avons utilisé le fait que l'adjoint d'un scalaire est son complexe conjugué. Dans un code de quelques lignes mis à l'Annexe A, nous pouvons alors calculer la densité d'état locale au site 1 pour obtenir le résultat de la Fig. 2.3. On remarque que l'augmentation du facteur η crée un élargissement des pics. Ceux-ci sont également aplatis avec l'augmentation de η . La normalisation est ainsi préservée.

Fonction spectrale

Nous démontrerons maintenant l'affirmation que la fonction A_{11} définie à l'Éq. 2.32 représente bien la densité locale d'états. Pour ce faire, nous allons débiter avec la définition de la densité d'états et voir comment nous pouvons l'écrire sous forme de fonction de Green. Nous verrons que cette forme n'est ensuite rien d'autre que la fonction spectrale définie à l'Éq. 2.31. La densité d'états est définie comme

$$D(\omega) \equiv \sum_{\alpha} \delta(\omega - \epsilon_{\alpha}) . \quad (2.34)$$

où ϵ_{α} sont les énergies propres de notre système. Nous allons d'abord utiliser la représentation de la fonction delta de Dirac sous forme Lorentzienne. Ensuite, nous séparons le résultat en fractions partielles pour voir apparaître la fonction de Green retardée et son adjoint, c.-à-d. la fonction de Green avancée. Nous obtenons

$$2\pi\delta(\omega - \epsilon_{\alpha}) = \frac{2\eta}{(\omega - \epsilon_{\alpha})^2 + \eta^2} \quad (2.35)$$

$$= i \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_{\alpha} + i\eta} - \frac{1}{\omega - \epsilon_{\alpha} - i\eta} \right) \quad (2.36)$$

$$\equiv i \left[G_{\alpha\alpha}^R(\omega) - G_{\alpha\alpha}^A(\omega) \right] , \quad (2.37)$$

où nous avons utilisé la notation où $\eta = 0^+$ un infinitésimal positif. La densité d'état devient ainsi

$$D(\omega) \equiv \sum_{\alpha} \delta(\omega - \epsilon_{\alpha}) \quad (2.38)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha} i \left[G_{\alpha\alpha}^R(\omega) - G_{\alpha\alpha}^A(\omega) \right] \quad (2.39)$$

$$\equiv \frac{1}{2\pi} \text{Tr} \left[i \left(G^R(\omega) - G^A(\omega) \right) \right] \quad (2.40)$$

$$\equiv \frac{1}{2\pi} \text{Tr} [A(\omega)] . \quad (2.41)$$

Ceci conclut la démonstration de l'affirmation que la fonction spectrale est intimement liée à la densité d'état.

Concept d'hybridation

Nous verrons dans cette section comment les parties réelles et imaginaires de la fonction d'hybridation affecteront les pics Lorentziens de la densité d'états. Pour ce faire, nous calculerons d'abord la fonction de Green du système à l'aide de 2.27. Par la suite, nous nous concentrerons sur le terme G_{11} qui correspondra au site 1. La fonction de Green est donnée par la formule d'inversion

de matrice 2x2

$$G^R(\omega) = \frac{1}{(\omega + i\eta - E_1)(\omega + i\eta - E_2) - t^2} \begin{pmatrix} \omega + i\eta - E_2 & -t \\ -t & \omega + i\eta - E_1 \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

donc

$$G_{11}^R(\omega) = \left(\omega + i\eta - E_1 - \frac{t^2}{\omega + i\eta - E_2} \right)^{-1} \quad (2.43)$$

$$\equiv (\omega + i\eta - E_1 - \Gamma)^{-1} \quad (2.44)$$

où $\Gamma \equiv \frac{t^2}{\omega + i\eta - E_2}$. En appliquant l'Éq. 2.32 à ce résultat, la densité locale d'état s'exprime

$$A_{11}(\omega) = \frac{2(\eta - \text{Im } \Gamma)}{(\omega - E_1 - \text{Re } \Gamma)^2 + (\eta - \text{Im } \Gamma)^2}. \quad (2.45)$$

La partie réelle de Γ a donc pour effet de déplacer les fonctions Lorentziennes et sa partie imaginaire affectera l'élargissement. Si le terme d'échange t était nul, nous aurions obtenu la fonction de Green d'un site isolé telle que défini à l'Éq. 2.30². Le terme d'hybridation Γ permet donc de tenir compte des échanges de ce site avec le reste de l'environnement. Nous verrons à la Section 2.5 que nous pouvons ajouter un terme similaire, appelé self-energie, qui permet d'inclure les interactions à plusieurs corps.

Interprétation de la fonction de Green

Dans cette section, nous allons voir deux interprétations de la fonction de Green. La première est que la fonction de Green retardée est la réponse à une impulsion de l'équation de Schrödinger dans le cas sans interaction. La seconde est que la fonction de Green donne l'amplitude de probabilité de transition entre deux états. Commençons donc par la première. Pour ce faire, nous allons d'abord devoir faire la transformée de Fourier de la fonction de Green définie à l'Éq. 2.27 pour passer en coordonné temporelle. Considérons donc la fonction de Green retardée dans un espace où l'hamiltonien est diagonal

$$G^R(\omega) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - \epsilon_1 + i\eta} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{\omega - \epsilon_2 + i\eta} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{1}{\omega - \epsilon_3 + i\eta} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

2. Nous noterons $G^R(v, v'; \omega) \equiv \langle v | G^R(\omega) | v' \rangle$ les différents éléments de matrice de la fonction de Green. Avec cette notation, nous avons donc que $G_{11} = G(1, 1; E)$.

La transformé de Fourier est définie comme

$$G^R(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} G(\omega) . \quad (2.47)$$

On peut montrer en utilisant les intégrations de contour dans le plan complexe que cela donne

$$G^R(t) \equiv -\frac{i}{\hbar} \theta(t) e^{-\eta t} \begin{pmatrix} e^{-i\epsilon_1 t/\hbar} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & e^{-i\epsilon_2 t/\hbar} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & e^{-i\epsilon_3 t/\hbar} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix} , \quad (2.48)$$

où $\theta(t)$ est la fonction de Heaviside. Le facteur $\theta(t)$ garanti la causalité de la fonction de Green puisque toute réponse sera nulle pour $t < 0$. Dans le cas où la fonction de Green avancée est considérée, le facteur est $\theta(-t)$. En se rappelant que la dérivée d'une fonction de Heaviside est la fonction delta de Dirac, nous pouvons démontrer que chaque élément diagonal de $G^R(t)$ satisfait à

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_\alpha \right) [G^R(t)]_{\alpha\alpha} = \delta(t) . \quad (2.49)$$

On obtenons alors que

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) G^R(t) = \mathbb{I} \delta(t) , \quad (2.50)$$

d'où l'interprétation que la fonction de Green retardée sans interaction est la réponse d'une impulsion de l'équation de Schrödinger

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi(t) = 0 . \quad (2.51)$$

La seconde interprétation est celle que la fonction de Green est l'amplitude de passage d'un état à un autre. Certains auteurs la nomment ainsi propagateur. Pour justifier cette interprétation, nous allons d'abord évaluer cette amplitude. Nous verrons ensuite comment obtenir notre définition initiale d'une fonction de Green, Éq.2.28, à partir de cette amplitude. Supposons donc un état initial donné $|i\rangle$, son évolution sera donnée par

$$|i(t)\rangle = e^{-iHt} |i\rangle . \quad (2.52)$$

L'amplitude que cette fonction d'onde soit dans un état final $|f\rangle$ est alors donné par son produit scalaire $\langle f | e^{-iHt} |i\rangle$. Nous affirons que $G^R(f, i; t) = -i\theta(t) \langle f | e^{-iHt} |i\rangle$. Pour le démontrer, nous commencerons avec cette définition pour obtenir l'Éq. 2.28. La relation de fermeture $\mathbb{I} = \sum_n |n\rangle \langle n|$ où $\{|n\rangle\}$ sont des états propres de l'hamiltonien avec valeurs propres $\{E_n\}$ permet d'écrire notre

propagateur

$$G^R(f, i; t) = -i\theta(t) \langle f | e^{-iHt} | i \rangle \quad (2.53)$$

$$= -i\theta(t) \langle f | \sum_{\nu} e^{-iHt} | \nu \rangle \langle \nu | i \rangle \quad (2.54)$$

$$= -i\theta(t) \langle f | \sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} | \nu \rangle \langle \nu | i \rangle . \quad (2.55)$$

$$(2.56)$$

Nous utiliserons maintenant la décomposition en intégrale de la fonction de Heaviside :

$$\theta(t) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega't}}{\omega' + i\eta} , \quad (2.57)$$

où η est un infinitésimal positif. Ainsi, la transformée de Fourier du propagateur est

$$G^R(f, i; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} - i \langle f | \sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} \theta(t) | \nu \rangle \langle \nu | i \rangle \quad (2.58)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} - i \langle f | \sum_{\nu} e^{-iE_{\nu}t} \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega't}}{\omega' + i\eta} \right] | \nu \rangle \langle \nu | i \rangle \quad (2.59)$$

$$= \langle f | \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{it(\omega - E_{\nu} - \omega')} \frac{| \nu \rangle \langle \nu |}{\omega' + i\eta} | i \rangle \quad (2.60)$$

$$= \langle f | \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \delta(\omega - E_{\nu} - \omega') \frac{| \nu \rangle \langle \nu |}{\omega' + i\eta} | i \rangle \quad (2.61)$$

$$= \langle f | \sum_{\nu} \frac{| \nu \rangle \langle \nu |}{\omega + i\eta - E_{\nu}} | i \rangle , \quad (2.62)$$

$$(2.63)$$

où nous avons utilisé la transformée de Fourier du delta de Dirac $\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{itx}$. Puisque nous avons que $G^R(f, i; \omega) \equiv \langle f | G^R(\omega) | i \rangle$, le propagateur obtenu correspond bien à notre définition initiale de la fonction de Green retardée de l'Éq. 2.28. Ainsi, la fonction de Green correspond à l'amplitude de probabilité du système d'arriver à un certain état final depuis un état initial.

À l'aide du modèle simple à deux orbitales, nous avons introduit les fonctions de Green, un outil grandement utilisé en physique théorique. La fonction de Green contient de l'information importante du système tel que sa densité d'états. La fonction d'hybridation fût introduite comme une correction à la fonction de Green sans interaction traduisant l'effet des échanges entre un site et son environnement. Finalement, une première interprétation de la fonction de Green a été faite comme étant la réponse du système à une impulsion. La seconde étant que la fonction de Green est l'amplitude de propagation d'un état à un autre. Malheureusement, jusqu'à maintenant, nous n'avons pas encore utilisé le formalisme intuitif de la seconde quantification introduit à la Section 2.1. Ceci a été fait délibérément pour introduire les concepts de base des fonctions de Green dans

un formalisme déjà a priori connu. Nous allons maintenant fournir les définitions nécessaires pour utiliser les fonctions de Green en seconde quantification.

Fonctions de Green en seconde quantification

Dans cette section, nous définirons la fonction de Green en seconde quantification ainsi que l'équation du mouvement. La fonction de Green retardée est définie en seconde quantification comme

$$G^R(vt, v't') \equiv -i\theta(t - t') \left\langle \left[a_v(t), a_{v'}^\dagger(t') \right]_{\zeta} \right\rangle, \quad (2.64)$$

où vt et $v't'$ correspondent respectivement aux coordonnées finales et initiales. Nous allons déjà procéder à une première simplification en supposant que H est indépendant du temps. La fonction de Green associée à cet hamiltonien dépendra alors uniquement de la différence de temps $t - t'$. Sans perte de généralité dans ce contexte, nous fixerons $t' = 0$ pour obtenir

$$G^R(v, v'; t) \equiv -i\theta(t) \left\langle \left[a_v(t), a_{v'}^\dagger(0) \right]_{\zeta} \right\rangle. \quad (2.65)$$

Dans le cas d'un hamiltonien quadratique, i.e. $H = \sum_{v', v''} t_{v', v''} a_{v'}^\dagger a_{v''}$, la fonction de Green retardée obéit à l'équation du mouvement

$$\sum_{v''} [\delta_{vv''}(\omega + i\eta) - t_{vv''}] G^R(v''v'; \omega) = \delta_{vv'}. \quad (2.66)$$

Dans l'Annexe D, nous démontrons l'équation du mouvement. On y retrouve également son application au modèle à deux orbitales étudié plus tôt.

Système à température finie

Définition de la fonction de Green en temps imaginaire

Jusqu'à maintenant, nous avons supposé que le système était dans son état fondamental. Celui-ci sera atteint si la température est nulle. Pour traiter des cas où la température est finie, il existe les fonctions de Green à temps imaginaire que nous définirons dans cette section. Commençons par rappeler la définition de la fonction de Green dans le formalisme de la seconde quantification (Éq. 2.65)

$$G^R(\nu, \nu'; t) \equiv -i\theta(t) \left\langle \left[a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0) \right]_{\zeta} \right\rangle, \quad (2.67)$$

où nous avons utilisé la définition simplifiée où le temps initial est $t = 0$. Cela peut être fait si l'hamiltonien est indépendant du temps. La moyenne thermodynamique d'un opérateur est

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta H} O \right]. \quad (2.68)$$

Un premier essai pour avoir une fonction de Green à température finie serait donc de combiner ces deux définitions. Ainsi, nous remplacerons l'opérateur O par $a_\nu(t)a_{\nu'}^\dagger(0)$. Notre premier essai de la fonction de Green à température finie devient

$$\mathcal{G}(\nu, \nu'; t) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[\exp[-\beta H] a_\nu(t) a_{\nu'}^\dagger(0) \right]. \quad (2.69)$$

Nous sommes en fait très près de la définition des fonctions de Green en temps imaginaire. Deux points restent à rectifier avant d'obtenir la définition utilisée. Le premier devient plus clair en se rappelant que l'évolution temporelle d'un opérateur en représentation de Heisenberg est donnée par

$$O(t) = e^{itH} O e^{-itH} \quad (2.70)$$

et

$$[O(t)]^\dagger = e^{itH} O^\dagger e^{-itH}, \quad (2.71)$$

où $O \equiv O(t = 0)$. On remarque que l'opérateur densité $e^{-\beta H}$ a une forme similaire à l'opérateur d'évolution $U(t, t') \equiv e^{-i(t-t')H}$. La différence est simplement dans le facteur i . Pour pallier cette distinction, nous allons utiliser l'astuce mathématique qui consiste à remplacer it par τ . Les deux opérateurs ont maintenant la même forme. Nous aurons donc que l'évolution des opérateurs sera donnée par

$$O(\tau) = e^{\tau H} O e^{-\tau H} \quad (2.72)$$

et

$$[O(\tau)]^\dagger = e^{\tau H} O^\dagger e^{-\tau H}. \quad (2.73)$$

Notre fonction de Green devient alors

$$\mathcal{G}(v, v'; \tau) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta H} a_v(\tau) a_{v'}^\dagger(0) \right]. \quad (2.74)$$

Nous pouvons maintenant traiter du second point pour obtenir la définition appropriée. Le développement perturbatif en représentation d'interaction nécessite l'utilisation de l'ordre chronologique. Ainsi, nous définissons un opérateur d'ordre temporel

$$T_\tau A(\tau) B(\tau') = \begin{cases} A(\tau) B(\tau') & \tau' \leq \tau \\ \zeta B(\tau') A(\tau) & \tau \leq \tau' \end{cases}, \quad (2.75)$$

où $\zeta = \pm 1$ pour des bosons et des fermions respectivement. En utilisant ces relations et en rajoutant un signe négatif, la définition de la fonction de Green en temps imaginaire s'exprime sous la forme

$$\mathcal{G}(v, v'; \tau) \equiv -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-\beta H} T_\tau a_v(\tau) a_{v'}^\dagger(0) \right], \quad (2.76)$$

qui est notée

$$\mathcal{G}(v, v'; \tau) = -\left\langle T_\tau a_v(\tau) a_{v'}^\dagger(0) \right\rangle \quad (2.77)$$

en utilisant l'Éq. 2.68. Il sera donc important de garder en tête à quel moment nous effectuons une moyenne sur l'état fondamental ou une moyenne thermodynamique.

Fréquences de Matsubara

Les résultats numériques que nous allons obtenir seront en fréquences de Matsubara ($i\omega_n$). À l'équilibre, les observables dépendent uniquement de la différence en temps $\tau - \tau'$. En effectuant la transformée de Fourier, nous obtenons alors des expressions en termes de ces fréquences $i\omega_n$. Deux propriétés des fonctions de Green en temps imaginaire auront un impact sur ces fréquences. D'abord, nous avons que $\mathcal{G}(v, v'; \tau + \beta) = \zeta \mathcal{G}(v, v'; \tau)$ où $\zeta = -1$ pour les fermions ou $\zeta = +1$ pour les bosons. Cette propriété d'antipériodicité pour les fermions ou de périodicité pour les bosons est due à l'invariance cyclique de la trace dans l'Éq. 2.76. Elle impliquera des fréquences paires, $\omega_n = 2n\pi/\beta$, pour les bosons et des fréquences impaires, $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, pour les fermions.

Puisque la fonction est anti-périodique ou périodique, il est suffisant de définir $\mathcal{G}(v, v'; \tau)$ sur l'intervalle $0 < \tau < \beta$. Le domaine de τ est alors restreint. Par conséquent, la transformée de Fourier sera une série de Fourier discrète. Nous pouvons passer d'une base à l'autre à l'aide des relations suivantes :

$$\mathcal{G}(v, v'; i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(v, v'; \tau) \quad (2.78)$$

et

$$\mathcal{G}(v, v'; \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(v, v'; i\omega_n) . \quad (2.79)$$

Les fonctions de Green en temps imaginaire nous permettent maintenant de traiter les températures finies. Nous pouvons démontrer que l'équation du mouvement pour des fonctions de Green reste la même :

$$\sum_{v''} [\delta_{vv''} i\omega_n - t_{vv''}] \mathcal{G}(v'' v; i\omega_n) = \delta_{vv'} , \quad (2.80)$$

où $\omega + i\eta$ fut remplacé par $i\omega_n$. Dans la représentation de Lehmann, nous obtenons que [11]

$$G^R(v, v'; \omega + i\eta) = \mathcal{G}(v, v'; i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta) . \quad (2.81)$$

Cela signifie que la fonction de Green retardée sur les fréquences réelles ω est le prolongement analytique de la fonction de Green Matsubara définie sur les fréquences imaginaires $i\omega_n$. Si nous avons la forme analytique de la fonction de Green, le prolongement se fait par la substitution $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$. Toutefois, si la fonction de Green de Matsubara a été obtenue de manière numérique, nous n'avons que des valeurs numériques sur un nombre fini de fréquences. Le prolongement analytique doit alors se faire de manière numérique [8, 55, 35, 74, 7].

Modèle d'impureté de Anderson

Aucune solution analytique n'est présentement connue pour le modèle de Hubbard à deux dimensions, d'où le recours à des alternatives numériques. La DMFT (*théorie du champ moyen dynamique*) est basée sur le modèle d'impureté d'Anderson. Dans cette section, nous étudierons ce modèle à partir du modèle à deux orbitales. L'hamiltonien de Hubbard est

$$H_H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.82)$$

où le premier terme représente l'énergie cinétique et le second l'interaction de Coulomb locale. La relation de dispersion ϵ dépendra du couplage entre les sites. Dans le cas d'un couplage (ou saut) uniquement entre premiers voisins sur un réseau carré, nous aurons la relation de dispersion $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t (\cos k_x + \cos k_y)$. Dans le cas où nous avons également un couplage aux seconds voisins dans une seule direction diagonale, celle-ci devient $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t (\cos k_x + \cos k_y) - 2t' \cos(k_x + k_y)$. On rajoute le terme $-2t' \cos(k_x - k_y)$ si on veut un couplage sur l'autre diagonale également [38]. Puisque nous n'avons pas de solution analytique, nous allons devoir utiliser une méthode numérique pour approcher une solution. La *théorie du champ moyen dynamique* (DMFT) a su tailler sa place dans le domaine des matériaux fortement corrélés car elle permet de conserver les interactions à courte distance en plus des fluctuations temporelles. Plutôt que de tenter de résoudre la totalité de

l'hamiltonien de Hubbard, la méthode résout numériquement le problème d'impureté d'Anderson. Par conséquent, nous introduirons celui-ci dans cette section.

Nous supposons que nous avons une impureté qui est couplée à un bain (ou réservoir) extérieur d'électrons libres. Sur l'impureté, nous avons une répulsion coulombienne dans le cas où le site est doublement occupé. L'hamiltonien représentant ce système est alors

$$H_A = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma\mathbf{k}} \left(t_{\mathbf{k}} c_{R\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{I\sigma} + t_{\mathbf{k}}^* c_{I\sigma}^\dagger c_{R\mathbf{k}\sigma} \right) + U n_{I\uparrow} n_{I\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_I n_{I\sigma} \quad (2.83)$$

où R fait référence au réservoir d'électrons, I à l'impureté et $\sigma = \uparrow, \downarrow$ au spin. Le premier terme représente le réservoir sans interaction, le second les échanges entre le bain et l'impureté et le dernier terme la répulsion coulombienne sur l'impureté. L'idée de la DMFT est alors de prendre la self-énergie de l'impureté et de l'utiliser comme approximation de celle de la fonction de Green du réseau. Des approximations successives sont faites jusqu'à la fonction de Green du réseau projeté sur un seul site et celle de l'impureté concordent.

Voyons comment solutionner le modèle de Anderson en prenant l'approximation du champ moyen et en couplant l'impureté à un seul site au niveau de Fermi. Ce système est décrit par

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_F n_{F\sigma} + \sum_{\sigma} \left(t c_{F\sigma}^\dagger c_{I\sigma} + t c_{I\sigma}^\dagger c_{F\sigma} \right) + U n_{I\uparrow} n_{I\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_I n_{I\sigma} \quad (2.84)$$

où l'indice F fait référence au niveau de Fermi. En remplaçant le réservoir indice R par un seul site au niveau de Fermi, nous avons qualitativement le même hamiltonien mais avec moins d'états. Nous avons également pris $t = t^*$. Si nous voulions appliquer l'équation du mouvement avec cet hamiltonien pour trouver la fonction de Green du système, le terme $U n_{I\uparrow} n_{I\downarrow}$ générerait une succession d'équations qui ne peuvent être fermées sans approximation, d'où l'utilisation ici de sa forme en champ moyen

$$H_{MF} = \sum_{\sigma} \epsilon_F n_{F\sigma} + \sum_{\sigma} \left(t c_{F,\sigma}^\dagger c_{I,\sigma} + t c_{I,\sigma}^\dagger c_{F,\sigma} \right) + U \langle n_I \rangle n_{I\downarrow} + U n_{I\uparrow} \langle n_I \rangle + \sum_{\sigma} \epsilon_I n_{I\sigma} \quad (2.85)$$

pour illustrer la provenance de la fonction de self-energie. Nous ne voulons pas briser la symétrie du système donc nous posons que $\langle n_{I,\uparrow} \rangle = \langle n_{I,\downarrow} \rangle = \langle n_I \rangle$. L'approximation du champ moyen utilise la décomposition $n_{I\uparrow} = \langle n_{I\uparrow} \rangle + \delta n_{I\uparrow}$ où $\delta n_{I\uparrow}$ est l'écart de la valeur moyenne. La constante due au produit des moyennes est incluse dans le potentiel chimique. Le produit des écarts à la moyenne est supposé négligeable. Les observables deviennent alors leurs déviations de la valeur moyenne. L'hamiltonien étant maintenant quadratique, nous pouvons utiliser l'équation du mouvement 2.66

pour obtenir

$$G^R(1, 1; \omega) = \left[\omega + i\eta - \epsilon_I - \frac{t^2}{\omega + i\eta - \epsilon_R} - U \langle n \rangle \right]^{-1} \quad (2.86)$$

$$= [\omega + i\eta - \epsilon_I - \Gamma - \Sigma]^{-1} \quad (2.87)$$

où $\Gamma \equiv \frac{t^2}{\omega + i\eta - \epsilon_R}$ est la fonction d'hybridation et $\Sigma \equiv U \langle n \rangle$ est la self-energie. Nous retrouvons le terme d'hybridation du cas à deux orbitales. Toutefois, nous avons maintenant une self-energie qui apporte les corrections dues aux interactions.

Théorie du champ moyen dynamique

Tel que vu à la Section 1.2, nous ne possédons pas de solution analytique du modèle de Hubbard en deux dimensions. Par conséquent, nous utiliserons la méthode numérique CDMFT (*théorie du champ moyen dynamique sur amas*) pour approcher cette solution. Voyons d'abord la DMFT (*théorie du champ moyen dynamique*) sur lequel est basé la CDMFT. Dans un premier temps, nous simplifierons l'hamiltonien de Hubbard en une impureté composée de un site (DMFT) ou plus (CDMFT) et d'un bain d'électron non-interagissant. Nous désirons alors résoudre ce problème plus simple du modèle d'impureté d'Anderson tout en conservant l'information concernant le réseaux. Pour ce faire, nous allons utiliser une relation d'autocohérence. Celle-ci correspond à égalité entre la fonction de Green du réseaux projetée sur l'impureté et celle de l'impureté. La boucle de DMFT est alors composée de cinq étapes. Nous suivrons la description de REYMBAUT [56].

1. À partir de la fonction d'hybridation Γ , une fonction de Green sans interaction du bain est calculée.
2. Le solveur d'impureté résout le système représenté par le modèle d'impureté de Anderson pour obtenir une fonction de Green G_c de l'amas.
3. La self-energie de l'amas est isolé à l'aide l'équation de Dyson.
4. La fonction de Green du réseau G^L est calculé en utilisant la self-energie de l'amas. Ceci correspond à l'approximation de la DMFT et la CDMFT.
5. Si la relation d'autocohérence n'est pas atteinte selon une certaine tolérance. Une nouvelle fonction de Green sans interaction est calculée et nous retournons à la première étape.

L'impureté est choisie comme étant suffisamment grande pour avoir la physique importante, mais suffisamment petite pour être résolue dans des délais raisonnables. La section du code qui prend le plus de temps et le solveur d'impureté [14]. Les résultats de ce mémoire ont été obtenus en utilisant un solveur *Continuous-Time Quantum Monte Carlo* [64]. Ce type de simulation fait que les résultats sont bruités. Une moyenne sur plusieurs itérations convergées est alors effectuée pour

diminuer ce bruit. Ce type de solveur permet d'utiliser des températures finies. Malheureusement, à basse température, on rencontre le problème de signe qui est un des problèmes ouverts en physique numérique [40]. Celui-ci empêchera alors les simulations de converger sous une certaine température qui dépendra des paramètres de celle-ci.

Fonction de Green de Nambu

L'hamiltonien Bardeen-Cooper-Schriffer (BCS) postule une attraction effective entre des électrons qui vont alors finir par former des paires de Cooper composées d'un quasi-électron de spin up et quantité de mouvement \mathbf{k} et d'un autre de spin down de quantité de mouvement $-\mathbf{k}$ [11]. Celui-ci s'exprime comme

$$H_{BCS} = \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (2.88)$$

où $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} < 0$ est une attraction effective. Nous allons donc faire l'approximation du champ moyen afin d'obtenir une solution analytique. Nous aurons donc des paires $c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$ interagissant avec un milieu effectif $\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle$. Nous verrons que $\Delta_{\mathbf{k}}$ représente le gap supraconducteur d'où l'utilisation de la notation habituelle pour celui-ci. L'hamiltonien BCS en champ moyen est alors

$$H_{BCS}^{MF} = \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} . \quad (2.89)$$

Puisque nous avons des termes $\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle$ et $\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ qui sont non-nuls, nous allons introduire le formalisme de Nambu qui inclura ces termes. Comme dans le cas à deux orbitales, l'hamiltonien peut être écrit sous forme matricielle

$$H_{BCS}^{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\epsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} . \quad (2.90)$$

Le vecteur ligne et le vecteur colonne portent un nom particulier. Ils sont en effet les spineurs de Nambu définis par

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad (2.91)$$

$$\Psi_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} . \quad (2.92)$$

Le système sera alors décrit la fonction de Green de Nambu $\overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, \tau) \equiv -\langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}}(\tau) \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle$

$$\overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, \tau) = \begin{pmatrix} -\langle T_\tau c_{\uparrow\mathbf{k}}(\tau) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{\uparrow\mathbf{k}}(\tau) c_{-\downarrow\mathbf{k}} \rangle \\ -\langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\downarrow-\mathbf{k}} \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.93)$$

En combinant la définition initiale de la fonction de Green (Éq. 2.27) et le prolongement analytique des fréquences de Matsubara en fréquences réelles, la fonction de Green de Nambu est

$$\overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, ik_n) = [ik_n \mathbb{I} - H_{BCS}]^{-1}. \quad (2.94)$$

En effectuant une simple inversion de matrice deux par deux et réécrivant le dénominateur du pré-facteur, nous obtenons

$$\overline{\overline{\mathcal{G}}}(ik_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{(ik_n)^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \begin{pmatrix} ik_n + \epsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}}^* \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & ik_n - \epsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.95)$$

où $E_{\mathbf{k}}^2 \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2$.

On obtient une forme similaire au modèle à deux orbitales mais avec des fonctions de Green particulières. Les termes hors diagonaux sont appelés fonction de Green anormales. Ils sont notés $\mathcal{F}_{\downarrow\uparrow}(\tau) \equiv -\langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle$. Ceux-ci servent à décrire les paires de Cooper que l'on retrouve dans l'état supraconducteur. La solution en champ moyen de l'hamiltonien BCS sera utilisée lors des tests pour le code utilisé lors de la génération des résultats du Chapitre 4.

Résumé

Nous avons débuté le chapitre en décrivant la statistique des particules quantiques, c'est-à-dire des fermions et bosons, à la Section 2.1.1. Ensuite, nous avons vu comment construire ces fonctions en terme de déterminant de Slater pour les fermions et en terme de permanent pour les bosons. Ces déterminants et permanents servent de base pour développer une fonction d'onde générale. La construction s'alourdit rapidement en augmentant le nombre de particules. En effet, le nombre de termes dans un déterminant croît en $n!$ où n est le nombre de particules. Afin de pallier cette lacune, le formalisme de la seconde quantification fut alors introduit à la section 2.1. Les opérateurs de destruction ou de création ont été définis en fonction de relation de commutation ou d'anti-commutation :

$$\boxed{[c_\nu, c_{\nu'}^\dagger]_\zeta = \delta_{\nu\nu'}} \quad (2.96)$$

et

$$\boxed{[c_\nu, c_{\nu'}]_\zeta = [c_\nu^\dagger, c_{\nu'}^\dagger]_\zeta = 0} . \quad (2.97)$$

où $[A, B]_\zeta \equiv AB - \zeta BA$ avec $\zeta = -1$ pour des fermions et $\zeta = +1$ pour des bosons. Ces relations définissent également le type de particules qui est traité. Par la suite, nous avons introduit à la Section 2.2 les fonctions de Green à l'aide du modèle à deux orbitales. Nous avons alors pu utiliser la solution de la fonctions de Green sur un site

$$\boxed{G_{11}^R(\omega) = (\omega + i\eta - E_1 - \Gamma)^{-1}} , \quad (2.98)$$

où $\Gamma \equiv \frac{t^2}{\omega + i\eta - E_2}$ pour illustrer la fonction d'hybridation à la Section 2.2.2. Puisque nous nous intéresserons aux températures finies, les bases des fonctions de Green en temps imaginaire, Éq. 2.77,

$$\boxed{\mathcal{G}(\nu, \nu'; \tau) = - \left\langle T_\tau a_\nu(\tau) a_{\nu'}^\dagger(0) \right\rangle} , \quad (2.99)$$

furent décrites à la Section 2.4 comme généralisation des fonctions de Green à température nulle. Dans ce contexte, la moyenne sur l'état fondamental est remplacée par une moyenne thermodynamique. Par la suite, du à son rôle central en DMFT, nous avons vu à la Section 2.5, l'hamiltonien de Anderson (modèle d'impureté) à l'Éq. 2.84,

$$\boxed{H = \sum_{k\sigma} \epsilon_F n_{F\sigma} + \sum_{\sigma} \left(t c_{F\sigma}^\dagger c_{I\sigma} + t c_{I\sigma}^\dagger c_{F\sigma} \right) + U n_{I\uparrow} n_{I\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_I n_{I\sigma}} . \quad (2.100)$$

Dans sa solution en champ moyen

$$\boxed{G^R(1, 1; \omega) = [\omega + i\eta - \epsilon_I - \Gamma - \Sigma]^{-1}} , \quad (2.101)$$

où $\Gamma \equiv \frac{t^2}{\omega + i\eta - \epsilon_{\mathbf{R}}}$ et $\Sigma \equiv U \langle n \rangle$, nous y retrouvons la fonction d'hybridation Γ discutée à la Section 2.2.2, permettant d'inclure les échanges entre un site et l'environnement, et la fonction de self-energie Σ , permettant de tenir compte des interactions. Finalement, nous avons introduit les spineurs de Nambu à la Section 2.7,

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \equiv \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \quad c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \quad (2.102)$$

et

$$\Psi_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (2.103)$$

qui nous ont permis d'écrire l'hamiltonien BCS en champ moyen sous forme matricielle à l'Éq. 2.90 et d'obtenir la solution

$$\bar{\bar{G}}(ik_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{(ik_n)^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \begin{pmatrix} ik_n + \epsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}}^* \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & ik_n - \epsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.104)$$

où $E_{\mathbf{k}}^2 \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2$.

Chapitre 3

Réponse linéaire et quantités physiques

Dans un système à plusieurs particules, suivre la totalité des particules provoquerait une abondance de données mais avec très peu d'information utile. C'est pour cette raison que nous nous concentrerons sur certaines quantités physiques clés. Dans ce chapitre, nous verrons comment trois quantités physiques seront calculées à partir de nos résultats numériques : la rigidité superfluide, la surface de Fermi et le poids de quasi-particule. Dans la section 3.1.1, nous commencerons avec l'approche des frères London de la Réf. [41] sur la réponse d'un supraconducteur à un champ magnétique. On y utilisera une approche macroscopique et semi-classique. Dans la section 3.1.2, nous décrirons la théorie de la réponse linéaire pour obtenir la formule de Kubo qui est utilisée lors de l'évaluation de la réponse d'un système à une perturbation extérieur. Ainsi, nous appliquerons le formalisme développé précédemment au problème de plans bidimensionnels supraconducteurs couplés à la Section 3.1.3. Cela complétera la première partie sur la rigidité superfluide. Ensuite, nous développerons les formules nécessaires pour obtenir la surface de Fermi, Section 3.2, et le poids de quasi-particule, Section 3.3, à partir des résultats obtenus numériquement.

Rigidité superfluide

Approche macroscopique

Dans cette section, nous dériverons la relation entre la rigidité superfluide et la longueur de pénétration du champ magnétique dans un matériel supraconducteur. Nous savons qu'un matériel supraconducteur expulse le champ magnétique qui s'y trouve lorsqu'il entre dans sa phase supraconductrice. Toutefois, celui-ci pénètre dans une fine couche à la surface du matériau où un courant de surface l'empêche de pénétrer plus profondément. Nous supposerons que nous sommes dans la limite de London [41] où la longueur de la cohérence spatiale est beaucoup plus petite que

la longueur de pénétration. Nous débuterons en reliant le courant au potentiel vecteur dans le cas d'un supraconducteur pour ensuite relier le courant non-dissipatif à la la longueur de pénétration.

Puisque la phase supraconductrice est une manifestation macroscopique d'un état quantique, nous allons calculer le courant selon

$$\mathbf{J} = \frac{e}{m^*} \langle \psi | (\mathbf{p} - e \mathbf{A}) | \psi \rangle , \quad (3.1)$$

où $|\psi\rangle$ est l'état fondamentale supraconducteur et \mathbf{p} est le moment conjugué. Le courant s'exprimera alors comme

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{m^*} [\langle \psi | i\hbar \nabla | \psi \rangle + \langle \psi | e \mathbf{A} | \psi \rangle] , \quad (3.2)$$

où nous avons utilisé la représentation dans l'espace de l'opérateur quantité de mouvement. Nous supposons initialement que le premier terme ne contribue qu'à la partie longitudinale de la réponse alors nous ne nous intéressons qu'à la partie transversale. Le courant devient alors proportionnel au potentiel vecteur

$$\mathbf{J} = -\frac{n_s e^2}{m^*} \mathbf{A} , \quad (3.3)$$

où $n_s = \langle \psi | \psi \rangle$ est la densité de porteurs supraconducteurs.

Nous allons maintenant obtenir la dépendance spatiale du champ magnétique dans le matériel supraconducteur en appliquant le rotationnel de part et d'autre

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m^*} \mathbf{B} , \quad (3.4)$$

où \mathbf{B} est le champ magnétique. Pour le coté gauche de l'égalité, nous avons utilisé l'équation de Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{J} + \epsilon_0 \partial_t \mathbf{E}) \quad (3.5)$$

en plus de l'identité vectorielle

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B} \quad (3.6)$$

qui se simplifie en

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B} , \quad (3.7)$$

puisque la divergence du champ magnétique est nulle. Pour le côté droit, nous avons utilisé la définition du potentiel vecteur $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Si nous supposons un champ magnétique orienté selon x et que nous sommes loin des bords, l'équation se simplifie en

$$\frac{\partial^2}{\partial_z^2} B_x = \frac{1}{\lambda^2} B_x \quad (3.8)$$

où nous avons défini $\lambda^2 \equiv \frac{m^*}{\mu_0 n_s e^2}$. La solution est alors

$$B_x(z) = B_0 e^{-z/\lambda}, \quad (3.9)$$

où l'on peut maintenant voir que λ représente la longueur caractéristique de pénétration. Cette dernière quantité est alors mesurable expérimentalement.

Dans ce mémoire, nous nous intéresserons à la rigidité superfluide inter-plan. Pour effectuer cette mesure, un champ magnétique parallèle au plan xy est alors nécessaire. Or, nous savons qu'un champ magnétique selon x crée une boucle de courant dans le plan yz . Malgré le fait que les champs électrique et magnétique soient plus intuitifs, ce sont le potentiel vecteur et le potentiel scalaire qui sont utilisés dans le formalisme hamiltonien. Nous revenons alors à l'équation de London mais en utilisant $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \partial_t \mathbf{A}$ et la jauge où $\phi = 0$ pour obtenir

$$\mathbf{J} = -\frac{n_s e^2}{m^*} \mathbf{A}. \quad (3.10)$$

Le courant selon l'axe z sera alors proportionnel à la composante z du potentiel vecteur. Notons qu'un champ magnétique selon l'axe x provoquera une réponse selon l'axe z et l'axe y , ce qui mélange les composantes de la rigidité superfluide. Nous pouvons imaginer une boucle de courant qui relie deux plans bidimensionnels xy . Toutefois, dû à la grande anisotropie entre la conductivité intra-plan versus inter-plan, la contribution intra-plan à la longueur de pénétration λ_{\perp} (ou λ_z) sera négligeable par rapport à la contribution inter-plan [21, 51, 46]. Il est alors possible d'étudier la composante inter-plan séparément. À la Fig. 3.1, il est possible de voir comment les composantes de λ sont affectées par le type de champ (électrique ou magnétique) et la direction de celui-ci.

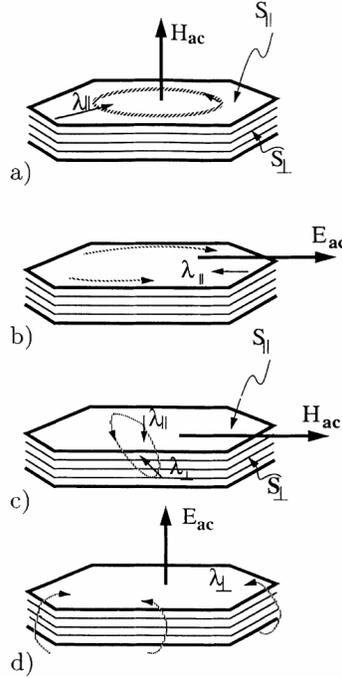


FIGURE 3.1 Schéma illustrant les composantes de la réponse à un champ magnétique ou électrique. Si nous utilisons un champ magnétique perpendiculaire aux plans hautement conducteurs ou un champ électrique parallèle à ceux-ci, la réponse du courant sera restreinte à ces plans (a-b). Un champ électrique perpendiculaire aux plans nous donnera un réponse de courant dans la même direction (d). Finalement, si nous avons un champ magnétique parallèle aux plans bidimensionnel, la réponse courant sera composé d'un mélange de ses composantes inter-plan et intra-plan (c). Figure tirée de la référence [21]

La rigidité superfluide $\rho_s \equiv \frac{n_s e^2}{m^*}$ mesure alors l'intensité de l'effet Meissner et, par le fait même, celle de la supraconductivité. Nous utiliserons ainsi la forme générale $\mathbf{J} = -\rho_s \mathbf{A}$. Lorsque nous avons relié la rigidité superfluide à la longueur de pénétration au début du chapitre, nous avons considéré que la réponse était uniquement diamagnétique. Cela implique que tous les électrons sont dans l'état supraconducteur. Toutefois, au terme principal évaluant la réponse parfaite possible, nous devons apporter une correction qui tient compte des électrons qui sont dans la phase normale. La réponse paramagnétique aura alors une contribution nette négative. Cette réponse représente les paires de Coopers qui ont été brisées dues aux excitations thermiques ou dues aux interactions. Nous tiendrons compte de cette correction sous la forme

$$\mathbf{J} = -(\chi_D + \chi_P) \mathbf{A} \quad (3.11)$$

où χ_D et χ_P sont les réponses diamagnétique et paramagnétique, respectivement. L'objectif de la prochaine section sera d'exprimer la réponse paramagnétique χ_P et diamagnétique χ_D à l'aide de la fonction de Green en formalisme de Nambu des plans bidimensionnels. Rappelons que c'est cette dernière qui est obtenue numériquement (voir Chapitre 2).

Réponse linéaire

Un système physique est décrit par son hamiltonien qui contient l'ensemble de ses degrés de liberté et des interactions. Toutefois, lorsqu'il vient le temps d'effectuer une mesure expérimentale ou d'étudier le système soumis à une force externe, l'hamiltonien à l'équilibre n'est plus suffisant. En effet, nous devons alors ajouter un nouveau terme pour tenir compte de l'effet de l'appareil de mesure (champ externe). Si le champ externe est faible par rapport à l'hamiltonien à l'équilibre, la théorie de la réponse linéaire nous permet alors de formaliser l'impact qu'aura un appareil de mesure sur une observable du système. La possibilité de prédire la moyenne d'une observable hors d'équilibre uniquement avec ses propriétés à l'équilibre est l'avantage principal de la réponse linéaire. Comme le nom le dit, nous allons effectuer une approximation au premier ordre. La perturbation sur l'hamiltonien doit donc être petite par rapport à l'énergie caractéristique du système. Cette restriction n'empêche toutefois pas la théorie de la réponse linéaire d'avoir un vaste champ d'application. Celle-ci nous permet donc de faire un premier pas pour unir les théories aux mesures en laboratoire. Nous dériverons la formule de Kubo qui contient l'information nécessaire sur l'effet de la perturbation sur la moyenne d'une observable.

Nous débutons avec l'hypothèse que le système que nous étudions est à l'équilibre thermodynamique. Supposons que celui-ci est décrit par l'hamiltonien H_0 indépendant du temps. Dans de telles conditions, nous avons donc que la moyenne d'une observable A est donnée par

$$\langle A \rangle \equiv \frac{1}{Z_0} \text{Tr} [\rho_0 A] \equiv \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n} , \quad (3.12)$$

où $\rho_0 \equiv e^{-\beta H_0} = \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-\beta E_n}$. L'opérateur ρ_0 est appelé opérateur densité et la deuxième égalité correspond à sa décomposition spectrale. La fonction Z_0 est la fonction de partition définie par $Z_0 \equiv \text{Tr} [\rho_0]$.

Nous avons donc notre système à l'équilibre décrit par H_0 et voulons lui appliquer une perturbation $H'(t)$ à un temps t_0 . L'hamiltonien total devient

$$H(t) = H_0 + \Theta(t - t_0) H'(t) . \quad (3.13)$$

Rappelons que nous cherchons l'effet de la perturbation sur une observable. Nous allons donc calculer la valeur moyenne de notre observable A pour un temps $t > t_0$, soit après que nous aurons appliqué notre perturbation. Pour ce faire, nous chercherons l'évolution temporelle des états propres de notre hamiltonien, $|n(t)\rangle$. Ainsi, nous pourrons ensuite connaître l'évolution de la moyenne de l'observable A en effectuant la moyenne avec états propres $|n(t)\rangle$ plutôt qu'avec les états propres à l'équilibre $|n\rangle$:

$$\langle A(t) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n(t) | A | n(t) \rangle e^{-\beta E_n} \equiv \frac{1}{Z_0} \text{Tr} [\rho(t) A] , \quad (3.14)$$

$$\text{où } \rho(t) := \sum_n |n(t)\rangle \langle n(t)| e^{-\beta E_n} . \quad (3.15)$$

Le problème est maintenant réduit à expliciter l'évolution des vecteurs d'états $|n(t)\rangle$. Pour ce faire, nous allons maintenant passer en représentation de Dirac (représentation en interaction). Celle-ci peut être vue comme une transformation unitaire du système. Le passage de la représentation en interaction, dénotée par un chapeau, à la représentation de Schrödinger s'effectue comme

$$|\hat{\psi}(t)\rangle \equiv e^{iH_0 t} |\psi(t)\rangle \quad (3.16)$$

$$\hat{A}(t) \equiv e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} . \quad (3.17)$$

Nous obtenons ainsi que $|n(t)\rangle = e^{-iH_0 t} |\hat{n}(t)\rangle$ où le chapeau indique que le vecteur d'état propre est dans la représentation en interaction. L'évolution temporelle de $|\hat{n}(t)\rangle$ est donnée par l'opérateur d'évolution dans la représentation en interaction qui est $\hat{U}(t, t_0) \equiv T_t e^{-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t')}$ où $\hat{H}'(t) \equiv e^{iH_0 t} H'(t) e^{-iH_0 t}$ et T_t est l'opérateur d'ordre chronologique défini à l'Éq. 2.75. Puisque nous supposons que la perturbation $H'(t)$ est petite, nous allons approximer, au premier ordre,

$$\boxed{\hat{U}(t, t_0) \sim 1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}'(t')} . \quad (3.18)$$

L'évolution de $|n(t)\rangle$ devient alors

$$|n(t)\rangle \sim \int_{t_0}^t dt' e^{-iH_0 t} (1 - i\hat{H}'(t')) e^{iH_0 t} |n\rangle . \quad (3.19)$$

De manière similaire, nous obtenons

$$\langle n(t)| = \langle n| \int_{t_0}^t dt' e^{-iH_0 t} (1 + i\hat{H}'(t')) e^{iH_0 t} . \quad (3.20)$$

Nous allons maintenant considérer un seul terme de la forme $\langle n(t)| A |n(t)\rangle$ pour ensuite effectuer la somme sur n afin d'effectuer la trace. En combinant les résultats précédents, Éq. 3.19 et 3.20, nous obtenons

$$\langle n(t)| A |n(t)\rangle = \int_{t_0}^t dt' \left[\langle n| A |n\rangle + i \langle n| e^{-iH_0 t} [\hat{H}'(t'), \hat{A}(t)] e^{iH_0 t} |n\rangle \right] \quad (3.21)$$

Il ne reste plus qu'à effectuer la trace et à utiliser la propriété cyclique de celle-ci pour obtenir

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 . \quad (3.22)$$

Le symbole $\langle \rangle_0$ met en évidence le fait que la moyenne s'effectue à l'équilibre et donc par rapport à H_0 . Ce résultat est particulièrement utile puisque la quantité hors d'équilibre $\langle A \rangle(t)$ est exprimée en fonction de la fonction de corrélation retardée à l'équilibre. Nous pouvons maintenant exprimer

la formule de Kubo sous la forme

$$\delta \langle A(t) \rangle \equiv \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AH'}^R(t, t') \quad (3.23)$$

où

$$C_{AH'}^R(t, t') \equiv -i\Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 . \quad (3.24)$$

Nous simplifierons la formule de Kubo pour faciliter son application. D'abord, supposons que la perturbation $\hat{H}'(t)$ peut s'exprimer comme $\hat{H}'_B(t) = \hat{B}(t)f(t)$ où $\hat{B}(t)$ est un opérateur (*q-number*) et $f(t)$ est une fonction qui n'est pas un opérateur (*c-number*). La fonction de réponse s'écrit maintenant

$$C_{AH'_B}^R(t, t') \equiv -i\Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 \quad (3.25)$$

$$= -i\Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')f(t')] \rangle_0 \quad (3.26)$$

$$= -i\Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle_0 f(t') \quad (3.27)$$

$$\equiv C_{AB}^R(t, t') f(t') . \quad (3.28)$$

Afin de simplifier cette expression, nous allons supposer que le couplage entre l'observable et la perturbation est direct, c'est-à-dire que $\hat{B} = \hat{A}$. Les fonctions de corrélation que nous calculerons auront toutes cette forme. Puisque nous supposerons un régime stationnaire, la fonction de corrélation ne dépendra pas en particulier de t et t' mais uniquement de leur différence $t - t'$. Nous obtenons alors que $C_{AA}^R(t, t') = C_{AB}^R(t - t')$. La formule du Kubo est maintenant

$$\delta \langle A(t) \rangle = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AA}^R(t - t') f(t') . \quad (3.29)$$

En résumé, le point de départ de cette section était la définition d'une moyenne thermodynamique (Éq. 3.21). L'hamiltonien décrivant l'évolution temporelle des états propres fût séparé en une partie principale et une partie perturbative (Éq. 3.13). En approximant l'opérateur d'évolution au premier ordre (Éq. 3.18), nous avons pu dériver la formule de Kubo qui relie la moyenne de l'opérateur avec une fonction de corrélation. Finalement, une forme particulière de la formule de Kubo a été obtenue (Éq. 3.29).

Modèle considéré

Nous voulons maintenant rajouter un terme de couplage entre les plans. Pour ce faire, nous allons ajouter à l'hamiltonien des plan H_{xy} , défini à l'Éq. 1.1, le terme ($\hbar = c = 1$)

$$H_{\perp} = \sum_{j, k_x, k_y, \sigma} -t_{\perp}(k_x, k_y) c_{j+1, k_x, k_y, \sigma}^{\dagger} e^{ieA_z} c_{j, k_x, k_y, \sigma} + c.h. \quad (3.30)$$

où $e^{ieA\delta_z}$ est le facteur de phase de Peierls [60, 3] et où δ_z est la distance inter-plan. Nous supposons $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_z(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{e}}_z$ car nous nous intéressons au courant selon l'axe z . La dépendance en k_x et k_y varie selon le type de processus qui effectue le couplage entre les plans [54, 32]. Dans le cas des cuprates, un terme de couplage $t_\perp(k_x, k_y) = t_\perp (\cos k_x - \cos k_y)^2$ a été utilisé par CHAKRAVARTY et al. [13] pour respecter la symétrie du gap supraconducteur [72]. Cette dépendance affectera les tendances à basse température de la rigidité superfluide. Nous utiliserons $t_\perp(k_x, k_y) = t_\perp$ puisque la littérature expérimentale concernant les matériaux organiques supraconducteurs ne favorise pas un type de couplage à la connaissance de l'auteur.

Nous supposons que le champ extérieur est faible. Ainsi, seuls les termes de premier et deuxième ordre en fonction du potentiel vecteur \mathbf{A} sont conservés

$$H_\perp \sim \sum_{j,k_x,k_y,\sigma} -t_\perp(k_x, k_y) c_{j+1,k_x,k_y,\sigma}^\dagger \left(1 + ieA_z\delta_z - \frac{1}{2}(eA_z\delta_z)^2 \right) c_{j,k_x,k_y,\sigma} + h.c. \quad (3.31)$$

L'opérateur courant est défini par [9]

$$J_z(j, t) = -\frac{\delta H}{\delta A_z(j, t)} \quad (3.32)$$

d'où nous obtenons

$$\begin{aligned} J_z(j, t) = & \sum_{k_x,k_y,\sigma} ie\delta_z t_\perp(k_x, k_y) \left(c_{j+1,k_x,k_y,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,k_y,\sigma} - c_{j,k_x,k_y,\sigma}^\dagger c_{j+1,k_x,k_y,\sigma} \right) \\ & - \sum_{k_x,k_y,\sigma} e^2\delta_z^2 t_\perp(k_x, k_y) \left(c_{j+1,k_x,k_y,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,k_y,\sigma} + c_{j,k_x,k_y,\sigma}^\dagger c_{j+1,k_x,k_y,\sigma} \right) A_z. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Le premier terme correspond au courant paramagnétique et le second au courant diamagnétique. Nous voulons rendre ces termes plus compacts. Lorsque nous calculons le courant moyen, nous ajoutons le facteur $\frac{1}{N_{xy}N_z\delta_z}$. Cette procédure est l'équivalent discret de $\mathbf{J} = \frac{1}{V} \int d^3 \mathbf{r} \mathbf{J}(\mathbf{r})$. Nous pouvons alors définir une relation de dispersion selon l'axe z : $\epsilon_{k_z} \equiv t_\perp(k_x, k_y)2 \cos(\delta_z k_z)$. Lors du changement de base des opérateurs de création et destruction, les pré-facteurs $i\delta_z$ seront convertis en dérivées partielles de celles-ci. Finalement, nous obtenons que le courant total $\langle J_z(t) \rangle$ est alors séparé en sa contribution paramagnétique

$$\langle J_z^p(t) \rangle = C_{J_z^p}^R A_z = \chi_z^p A_z \quad (3.34)$$

calculée avec la formule de Kubo où

$$J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (3.35)$$

et sa contribution diamagnétique

$$\langle J_z^d(t) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle A_z = \chi_z^D A_z . \quad (3.36)$$

Puisque la méthode numérique produit des fonctions de Green en formalisme de Nambu en fréquences imaginaires, nous devons convertir nos expressions pour la réponse paramagnétique χ_p et diamagnétique χ_d sous cette forme. Dans les Annexes F et G, nous détaillons les calculs¹ pour obtenir

$$\chi_z^d = -\frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} t_\perp^2(k_x, k_y) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \text{Tr} \left[\tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \right) \quad \text{et} \quad (3.37)$$

$$\chi_z^p = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} t_\perp^2(k_x, k_y) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \text{Tr} \left[\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \right] \right) . \quad (3.38)$$

Intuitivement, la rigidité superfluide peut être vue comme la réponse diamagnétique moins la réponse paramagnétique. Dans le cas d'un supraconducteur "parfait", nous aurions que tous les électrons donnent une réponse uniquement diamagnétique. Cela impliquerait que dans l'équation de London 3.3, $n_s = n$ où n est le nombre total d'électrons et l'indice s fait référence aux électrons dans la phase supraconductrice. Ainsi, nous obtenons, comme effet net, la rigidité superfluide

$$\rho_s = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 4t_\perp^2(k_x, k_y) \sum_{i\omega_n} \|\mathcal{F}_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)\|^2 . \quad (3.39)$$

Nous remarquons que la rigidité superfluide dépend uniquement des fonctions de Green anormales. Dans le cas où nous n'avons pas de supraconductivité, elle est alors nulle.

Surface de Fermi

Une quantité importante pour les métaux est leur surface de Fermi qui est définie selon les modes de Bloch. Toutefois, lors de la résolution numérique de l'amas, nous sommes dans une représentation locale où l'invariance sous translation a été brisée. Afin de la rétablir, nous effectuons une transformation appelée périodisation [65, 58]. Rappelons qu'afin d'utiliser le solveur d'impureté, voir Section 2.5, le réseau bidimensionnel a été décomposé en amas deux par deux. Le reste du réseau a été remplacé par un bain d'électrons libres. L'invariance sous translation a alors été brisée. Toutefois, la boucle d'autocoherence suppose que la solution sur l'amas est la bonne pour l'ensemble du réseau. Nous devons alors rétablir l'invariance sous translation en effectuant la transformation inverse de celle utilisée pour paver le réseau en amas de taille deux par deux.

1. Suite à la dérivation, l'auteur a appris qu'une autre dérivation complète est disponible dans le livre de COLEMAN [16].

En pratique, nous pouvons ainsi obtenir la fonction de Green du réseau $G^L(\mathbf{k}, i\omega_n)$ à partir de la self-energy sur l'amas $\Sigma_{ij}(i\omega_n)$. Dans les prochains paragraphes, nous allons détailler les étapes utilisées pour effectuer la périodisation.

Sur l'amas nous avons uniquement quatre vecteurs d'onde \mathbf{K} définis : $(0,0)$, $(0,\pi)$, $(\pi,0)$ et (π,π) . Ceux-ci pointent vers le coin inférieur droit des quatre régions de la zone de Brillouin qui a été séparé en zone de Brillouin réduite lors du pavage du réseau en amas. Ceux-ci correspondent aux vecteurs réciproques des vecteurs \mathbf{r}_i qui définissent les sites dans l'amas. Nous avons alors un vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ qui est défini sur une zone de Brillouin réduite $[0,\pi] \times [0,\pi]$. Chacun est le vecteur réciproque associé au vecteur \mathbf{R} qui pointe vers un amas. Puisque le nombre d'amas tend vers l'infini dans la limite thermodynamique, il en est de même du nombre de vecteurs $\tilde{\mathbf{k}}$. Il est alors possible de reconstruire la zone de Brillouin complète en utilisant les quatre vecteurs d'onde \mathbf{K} et les vecteurs $\tilde{\mathbf{k}}$. Nous allons alors maintenant exprimer la fonction de Green en base mixte, c'est-à-dire en utilisant les coordonnées spatiales pour faire référence à un point dans l'amas et en utilisant le vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ pour faire référence à un amas. Cette fonction de Green s'exprime

$$G_{ij}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n) = [i\omega_n + \mu - t_{ij}(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_{ij}(i\omega_n)] \quad (3.40)$$

où $t_{ij}(\tilde{\mathbf{k}}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}} e^{-i(\mathbf{K}+\tilde{\mathbf{k}})\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \epsilon(\mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}})$. Il ne reste maintenant plus qu'à faire les changements de base pour les sites afin d'avoir uniquement une dépendance selon le vecteur d'onde \mathbf{k} . Cela s'effectue selon

$$G^L(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} G_{ij}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)} \quad (3.41)$$

où le $\tilde{\mathbf{k}}$ correspondant à un \mathbf{k} donné choisi selon $\tilde{k}_{x,y} = (k_{x,y} \text{ modulo } \pi)$ pour chaque composante puisqu'il est restreint à la zone de Brillouin réduite.

Maintenant que la fonction de Green du réseau a été obtenue, nous allons calculer la fonction spectrale à fréquence nulle. Puisque nous obtenons des fréquences de Matsubara, une extrapolation à $\omega = 0$ est faite utilisant les quatre premières fréquences de Matsubara :

$$A(\mathbf{k}, \omega = 0) = \lim_{i\omega_n \rightarrow 0} -2 \text{Im} G^L(\mathbf{k}, i\omega_n) . \quad (3.42)$$

À la Fig. 3.2, nous pouvons voir un exemple de surface de Fermi dans le cas sans interaction. Notons que nous utiliserons le terme surface de Fermi pour $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ malgré le fait que le concept de surface de Fermi ne soit exact qu'à température nulle.

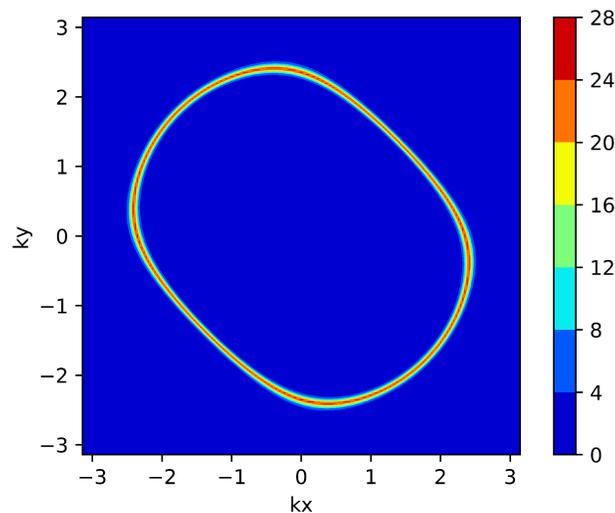


FIGURE 3.2 Exemple de surface de Fermi sans interactions pour $\beta = 30/t$ et $t'/t = 0.42$.

Poids de quasi-particule

Le concept de liquide de Fermi a été développé par Landau de 1957 à 1959. La conclusion principale est qu'on peut traiter un gaz d'électrons interagissant comme des quasi-particules non interagissantes. Le spectre $A(\mathbf{k}, \omega)$ d'un liquide de Fermi est composé de deux parties. La première constitue un bruit de fond incohérent et la seconde est une fonction de Lorentz à $\omega = 0$ (voir Fig. 3.3). La contribution cohérente représente notre quasi-particule avec une certaine durée de vie donnée par sa largeur. Dans le cas sans interaction, le bruit incohérent disparaît et la fonction de Lorentz tend vers une fonction delta de Dirac. L'intégrale de la fonction de Lorentz donne le poids de quasi-particule z . Celui-ci est relié à la masse effective selon $z \propto m_e/m^*$ où m_e est la masse d'un électron. Lorsque la fonction de Green sur l'axe réel est connue. Nous pouvons extraire la self-energy et obtenir le poids de quasi-particule [11]

$$z = \left[1 - \left. \frac{\partial \text{Re } \Sigma(\tilde{\mathbf{k}}_F, \omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \right]^{-1}. \quad (3.43)$$

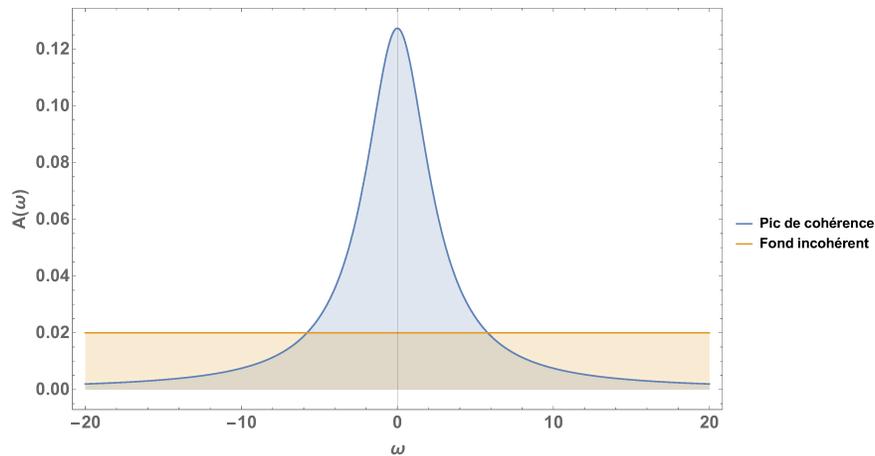


FIGURE 3.3 Schéma représentant la contribution incohérente de la fonction spectrale et le pic de cohérence qui forme la quasi-particule.

Toutefois comme mentionné à plusieurs reprises, les valeurs obtenues numériquement sont définies pour des fréquences de Matsubara. Il y a alors deux approximations possible pour calculer un poids de quasi-particule effectif \tilde{z} . Premièrement, en évaluant la fonction de Green à $\tau = \beta/2$ au vecteur de Fermi, nous obtenons [75]

$$\tilde{z} = -2G(\mathbf{k}_F, \tau = \beta/2) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A(\mathbf{k}_F, \omega)}{\cosh(\beta\omega/2)}. \quad (3.44)$$

Il est possible de voir à la Fig. 3.4 que la fonction $\cosh(\beta\omega/2)$ correspond à une densité de masse de l'axe ω qui distribue la masse autour de $\omega = 0$. Plus la température est basse, plus la masse est centrée en $\omega = 0$ et nous tendrons vers la vraie valeur de z . Dû à cette caractéristique, cette formule ne peut être utilisée pour comparer des résultats à différentes températures. La seconde méthode [1] utilise la relation $\lim_{\omega_n \rightarrow 0} \frac{\text{Im} \Sigma(i\omega_n)}{\omega_n} = \left. \frac{\partial \text{Re}[\Sigma(\omega)]}{\partial \omega} \right|_{\omega=0}$

$$\tilde{z} = \left[1 - \frac{\text{Im} \Sigma(\mathbf{k}_F i\omega_0)}{\omega_0} \right]^{-1} \quad (3.45)$$

où ω_0 est la première fréquence de Matsubara. À température finie et sans interaction, celle-ci nous donne un poids de quasi-particule égal à l'unité. Cette approximation est plus robuste aux changements de température et sera alors utilisée lors de l'analyse.

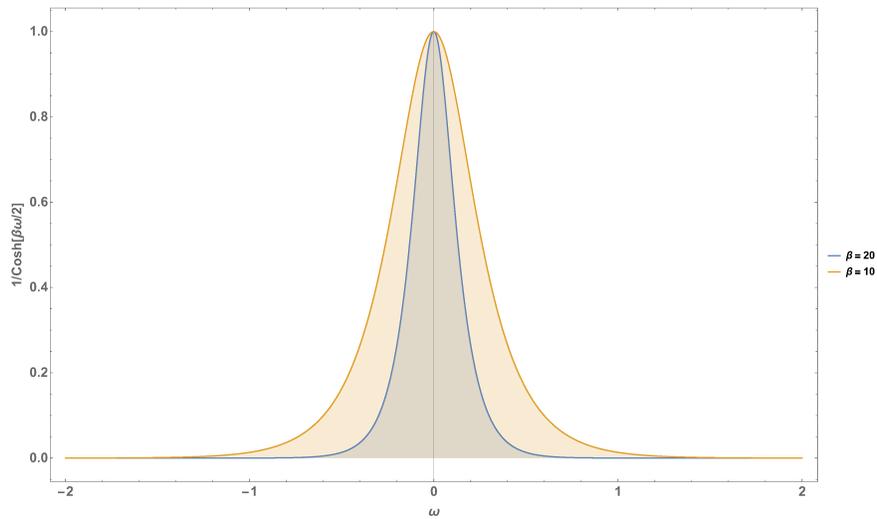


FIGURE 3.4 Schéma représentant la fonction $1/\cosh(\beta\omega/2)$ qui agit comme une mesure d'intégration à l'Éq. 3.44. Nous pouvons voir que lorsque $\beta \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$), la fonction centrera la masse à $\omega = 0$.

Résumé

Dans ce chapitre, nous avons discuté des quantités physiques que nous allons mesurer dans les simulations. La rigidité superfluide (Éq. 3.39),

$$\rho_s = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \sum_{i\omega_n} \|\mathcal{F}_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)\|^2 ,$$

nous permettra d'abord de quantifier la phase supraconductrice. La fonction spectrale à fréquence nulle (Éq. 3.42),

$$A(\mathbf{k}, \omega = 0) = \lim_{i\omega_n \rightarrow 0} -2 \operatorname{Im} G^L(\mathbf{k}, i\omega_n) ,$$

permettra de visualiser l'effet des interactions et du gap supraconducteur sur la surface de Fermi. La fonction de Green du réseau $G^L(\mathbf{k}, i\omega_n)$ sera obtenue selon la procédure de périodisation décrite à la section 3.2. Finalement, afin de quantifier la phase métallique, nous allons suivre la variation du poids de quasi-particule, Éq. 3.45,

$$\tilde{z} = \left[1 - \frac{\operatorname{Im} \Sigma(\mathbf{k}_F, i\omega_0)}{\omega_0} \right]^{-1} .$$

Chapitre 4

Résultats et analyse

Dans ce chapitre, nous commencerons par décrire à la Section 4.1 les solutions analytiques utilisées pour tester les codes rédigés pendant la maîtrise. Lors de nos calculs numériques, le nombre de points pour les vecteurs d'onde \mathbf{k} et pour les fréquences de Matsubara doivent être choisis. Nous verrons alors comment ce choix affecte la précision des résultats. Aux sections 4.2.1 et 4.2.2, nous présenterons les résultats obtenus pour une frustration de $t' = 0.42t$ correspondant au $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ et de $t' = 0.58t$ correspondant au $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$.

Tests initiaux

Nous avons vu au Chapitre 2 comment obtenir les fonctions de Green pour un hamiltonien donné. La solution peut être obtenue facilement si celui-ci est quadratique à l'aide de l'équation du mouvement ou par inversion de matrice. Si nous reprenons l'hamiltonien de Hubbard vu au Chapitre 1, mais enlevons le terme d'interaction, nous obtenons l'hamiltonien d'un gaz d'électrons libres dans un réseau

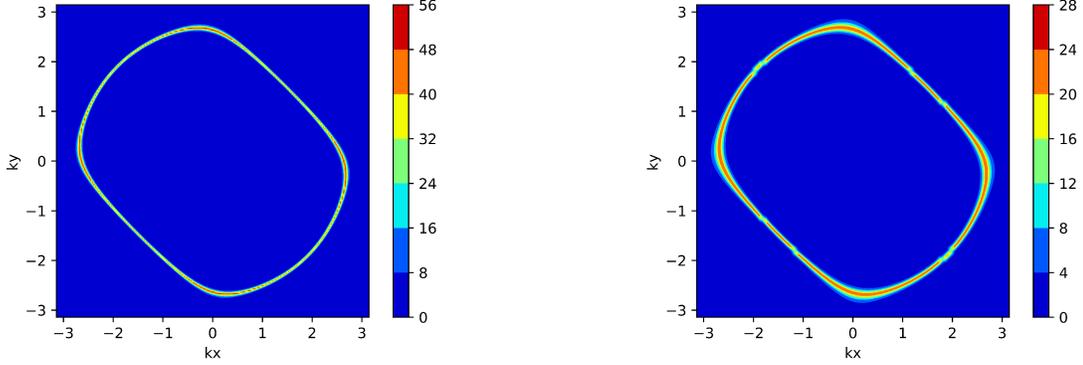
$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} . \quad (4.1)$$

où la relation de dispersion $\epsilon_{\mathbf{k}}$ inclue le potentiel chimique. Puisque l'hamiltonien est diagonal dans la base des vecteurs d'ondes, la fonction de Green associée est

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} . \quad (4.2)$$

Cette fonction de Green peut nous permettre de tester les parties du code qui s'intéressent aux propriétés de la phase normale, c.-à-d. sans supraconductivité. Par exemple, nous pourrions l'utiliser lors du calcul du poids de quasi-particule et lors de l'évaluation de la surface de Fermi. À l'aide

du solveur d'impureté, il est possible d'obtenir un résultat sans interaction en posant $U = 0$. La vérification de la lecture adéquate du résultat du solveur s'effectue ainsi en comparant le résultat de la lecture avec celui de l'Éq. 4.2. À la Fig. 4.1a, nous pouvons observer la surface de Fermi calculée sans interaction. Le poids de quasi-particule obtenu est alors de 1.0 comme attendu. Si nous ajoutons des interactions, comme à la Fig. 4.1b où $U = 5.0t$, la surface de Fermi s'étale. Le poids de quasi-particule calculé est alors de $z \sim 0.43 - 0.49$ selon la diagonale utilisée.



(a) Surface de Fermi à faibles interactions, $U = 0.01$.

(b) Surface de Fermi avec interactions, $U = 5.0$.

FIGURE 4.1 Surface de Fermi, obtenue selon l'Éq. 3.42 après avoir effectuée la périodisation, décrite à la Section 3.2, de la solution du solveur d'impureté CTQMC avec deux cents vecteurs d'ondes \mathbf{k} à une température de $\beta = 60/t$ et une frustration de $t' = 0.42t$.

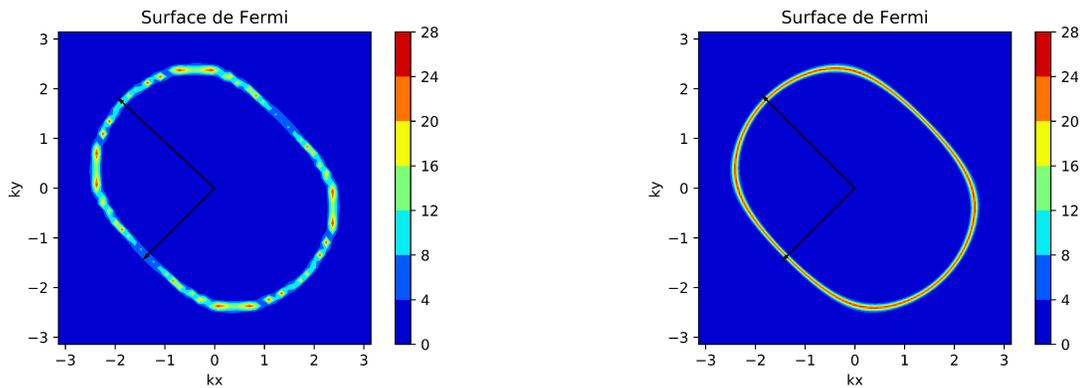
Toutefois, nous devons également tester le code pour le calcul de la rigidité superfluide. Pour ce faire, nous avons utilisé le résultat obtenu à la Section 2.7

$$\overline{\mathcal{G}}(ik_n, \mathbf{k}) = \frac{1}{(ik_n)^2 + E_{\mathbf{k}}^2} \begin{pmatrix} ik_n + \epsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}}^* \\ -\Delta_{\mathbf{k}} & ik_n - \epsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

où $E_{\mathbf{k}}^2 \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2$. En substituant la solution en champ moyen de l'hamiltonien BCS dans la formule de la rigidité superfluide, nous obtenons

$$\rho_s = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{4E_{\mathbf{k}}^2} \left[\frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) - \frac{\beta}{4} \cosh^{-2}\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right], \quad (4.4)$$

où la somme de Matsubara a été effectuée à l'Annexe H. Lors des calculs numériques, nous avons deux paramètres que nous pouvons ajuster pour obtenir une plus ou moins grande précision. Ceux-ci sont le nombre de fréquences de Matsubara $i\omega_n$ utilisé et le nombre de vecteurs d'onde \mathbf{k} dans la zone de Brillouin. Nous avons donc évalué l'évolution de ρ_s en fonction de ces deux méta-paramètres. En plus d'étudier l'évolution de ρ_s , nous avons évalué sa différence relative,



(a) Surface de Fermi avec cinquante vecteurs d'onde par dimension.

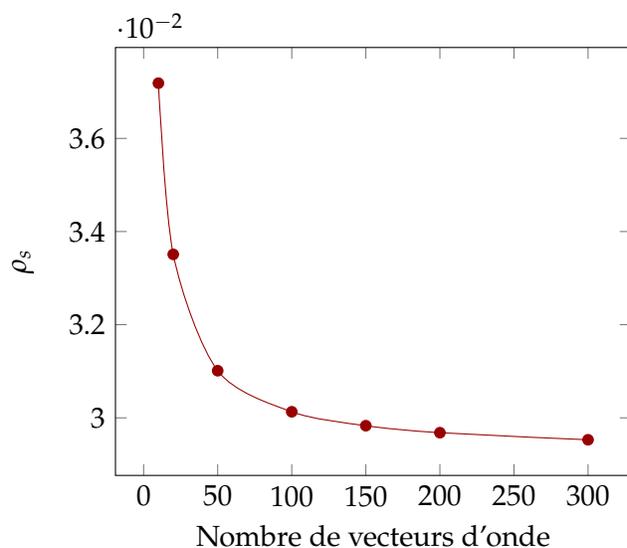
(b) Surface de Fermi avec deux cent vecteurs d'onde par dimension

FIGURE 4.2 Surface de Fermi avec deux vecteurs d'ondes de Fermi; un sur chaque diagonale. Nous visualisons la fonction spectrale extrapolée à fréquence nulle (Éq. 3.42) de la fonction de Green sans interaction (Éq. 4.2). Les flèches pointent vers le point sur la diagonale où la valeur de fonction spectrale est maximale. Cela permet de trouver automatiquement deux vecteurs d'onde de Fermi.

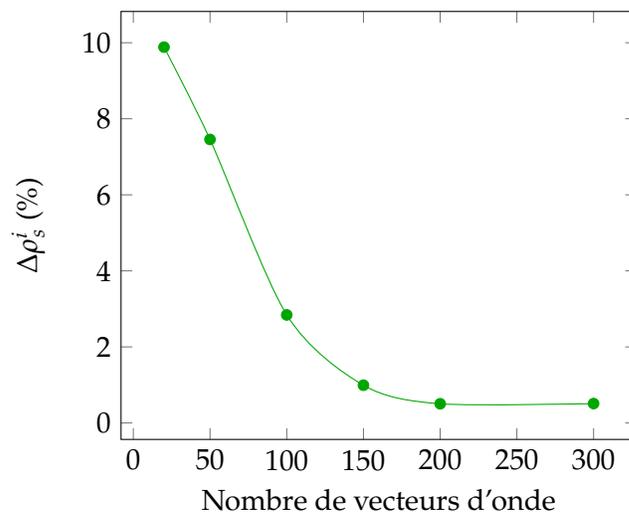
c'est-à-dire

$$\Delta\rho_s^i = 100 \times \left| \frac{\rho_s^i - \rho_s^{i-1}}{\rho_s^{i-1}} \right|, \quad (4.5)$$

où l'exposant i fait référence à un ensemble choisi préalablement de valeurs possibles du nombre de fréquences de Matsubara ou du nombre de vecteurs d'onde. À la Fig. 4.2, nous comparons la surface de Fermi obtenue en utilisant cinquante ou deux cent vecteurs d'onde. Nous constatons ainsi que la surface de Fermi est mal définie (voir Fig. 4.2a) si nous utilisons cinquante vecteurs d'onde \mathbf{k} . À la Fig. 4.3, nous observons l'évolution de la valeur de rigidité superfluide en fonction du nombre de vecteurs d'onde utilisé. Nous pouvons constater que rendu à deux cent vecteurs d'onde, le résidu est de moins de 1%. Pour le même nombre de vecteurs d'onde, on obtient également une surface de Fermi bien définie (voir Fig. 4.2b). À la Fig. 4.4, nous constatons que la valeur de la rigidité superfluide converge rapidement selon le nombre de fréquences de Matsubara utilisé. Lors des calculs, soixante fréquences seront alors suffisantes.

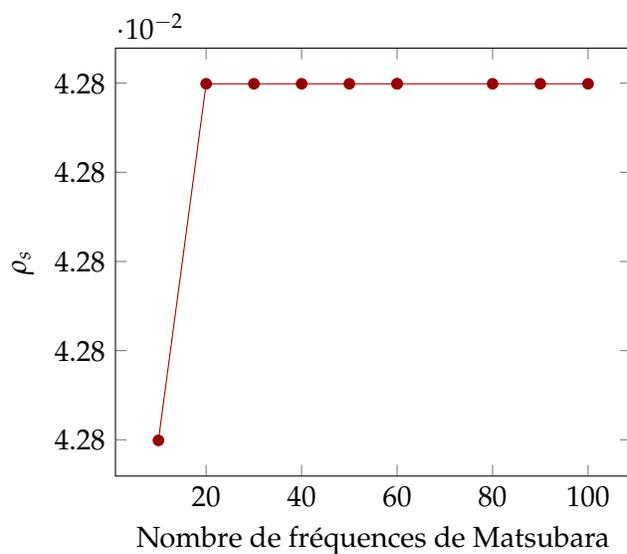


(a) Évolution de la valeur absolue de la rigidité superfluide en fonction du nombre de vecteurs d'onde par dimension utilisé lors de son calcul.

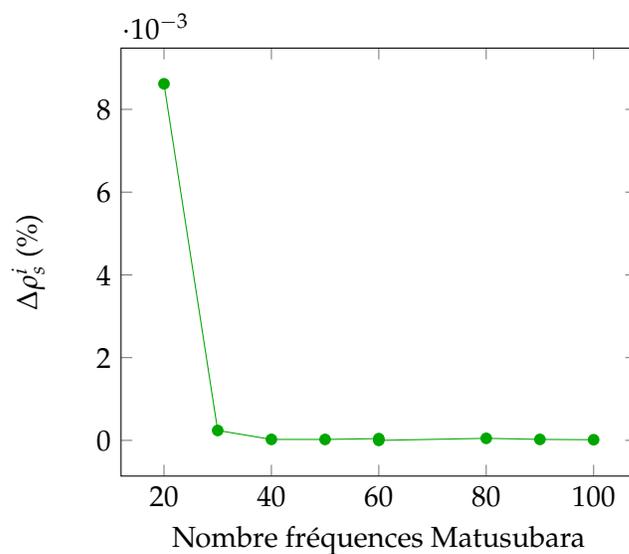


(b) Évolution du résidu (différence relative) de la rigidité superfluide calculé selon l'Éq. 4.5 en fonction du nombre de vecteurs d'onde par dimension utilisé lors de son calcul.

FIGURE 4.3 Optimisation du nombre de vecteurs d'onde à être utilisé selon la précision de la rigidité superfluide ρ_s .



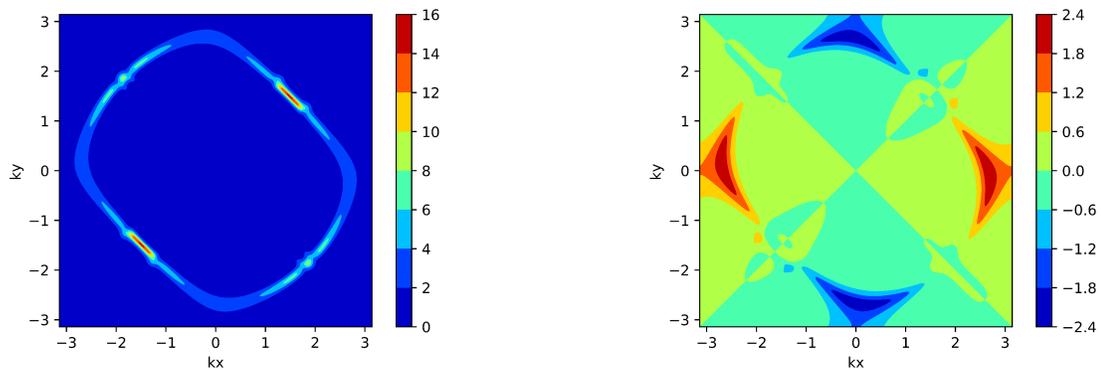
(a) Évolution de la valeur absolue de la rigidité superfluide en fonction du nombre de fréquences de Matsubara utilisé lors de son calcul.



(b) Évolution du résidu (différence relative) de la rigidité superfluide calculé selon l'Éq. 4.5 en fonction du nombre de fréquences de Matsubara utilisé lors de son calcul.

FIGURE 4.4 Optimisation du nombre de fréquences de Matsubara à être utilisé selon la précision de la rigidité superfluide ρ_s .

Finalement, à la Fig. 4.5, nous comparons la partie réelle de la fonction de Green anormale évaluée à la première fréquence de Matsubara, $\text{Re}[\mathcal{F}(i\omega_0, \mathbf{k})]$, à la surface de Fermi, afin d'apprécier la symétrie du *gap* supraconducteur $d_{x^2-y^2}$ et sa complémentarité avec la partie normale. À la Fig. 4.6, nous pouvons voir l'évolution de la rigidité superfluide en fonction de la température. Puisque le problème de signe ne permet de descendre à très basses températures, l'étude du comportement de ρ_s en fonction de la température a été temporairement mise de côté.



(a) Surface de Fermi dans le cas supraconducteur. Nous remarquons que sa disparition coïncide avec l'apparition du *gap* supraconducteur et qu'elle est le moins affectée aux noeuds de celui-ci, soit sur les diagonales.

(b) Partie réelle de la première fréquence de Matsubara de la partie anormale de la fonction de Green $\text{Re}[\mathcal{F}(i\omega_0, \mathbf{k})]$ en fonction du vecteur d'onde \mathbf{k} . Nous pouvons observer la symétrie $d_{x^2-y^2}$ du *gap* supraconducteur.

FIGURE 4.5 Visualisation de la zone de Brillouin dans le cas supraconducteurs. Simulation faite avec $t' = 0.42t$, $U = 5.9t$ et $\beta = 60/t$.

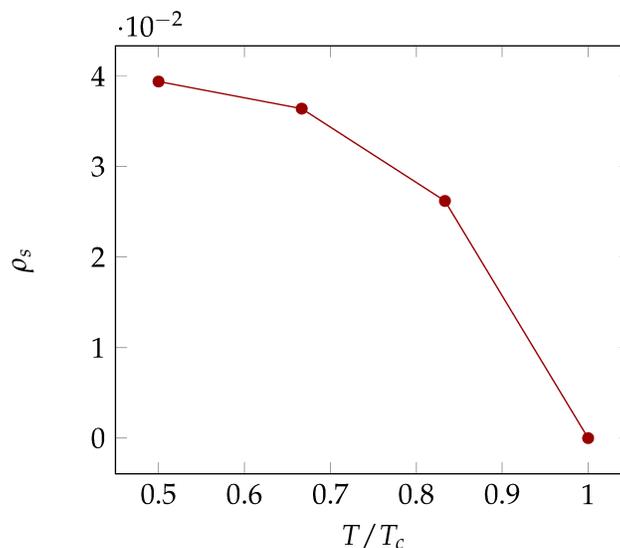


FIGURE 4.6 Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.42t$ et $U = 6.0t$.

Résultats

Nous présenterons dans cette section les résultats obtenus pour deux valeurs de t'/t différentes. À la Section 4.2.1, nous présenterons les résultats pour un ratio t'/t de 0.42. Tel que vu au Tableau 1.1, cela correspond au $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$. À la Section 4.2.2, nous présenterons les résultats pour un ratio t'/t de 0.58 qui correspond au $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$. L'inverse de la température $\beta \equiv 1/k_B T$, où k_B est la constante de Boltzmann, est généralement utilisé lors de la discussion des résultats. L'ensemble des quantités qui ont des unités d'énergie sont normalisées par rapport à t , le paramètre d'échange du modèle du Hubbard, qui est égale à un dans les simulations ($t = 1.0$).

$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$

Puisque nous nous intéressons à la relation entre la température critique et la rigidité superfluide, nous pouvons voir à la Fig. 4.7 l'évolution de T_c en fonction de la répulsion coulombienne. Nous remarquons que celle-ci ne semble pas changer de tendance malgré la transition de Mott. Nous aurions pu croire que la proximité de la transition de Mott ferait décroître T_c . Nous définissons alors $U_c^s = 5.3t$ comme la première valeur de U où nous observons de la supraconductivité à $\beta = 60/t$.

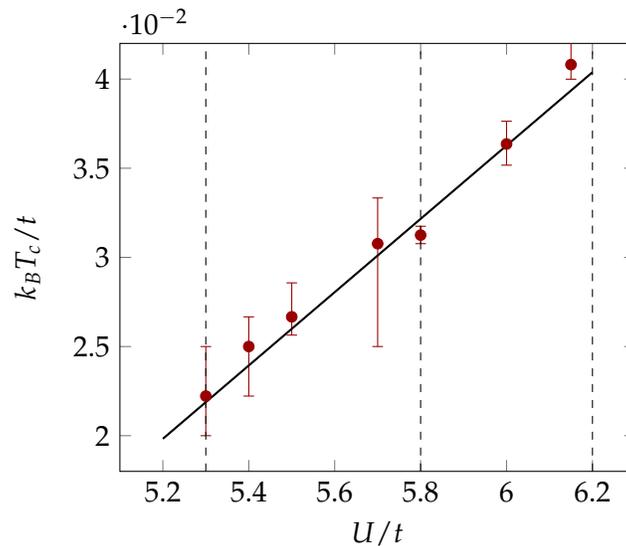
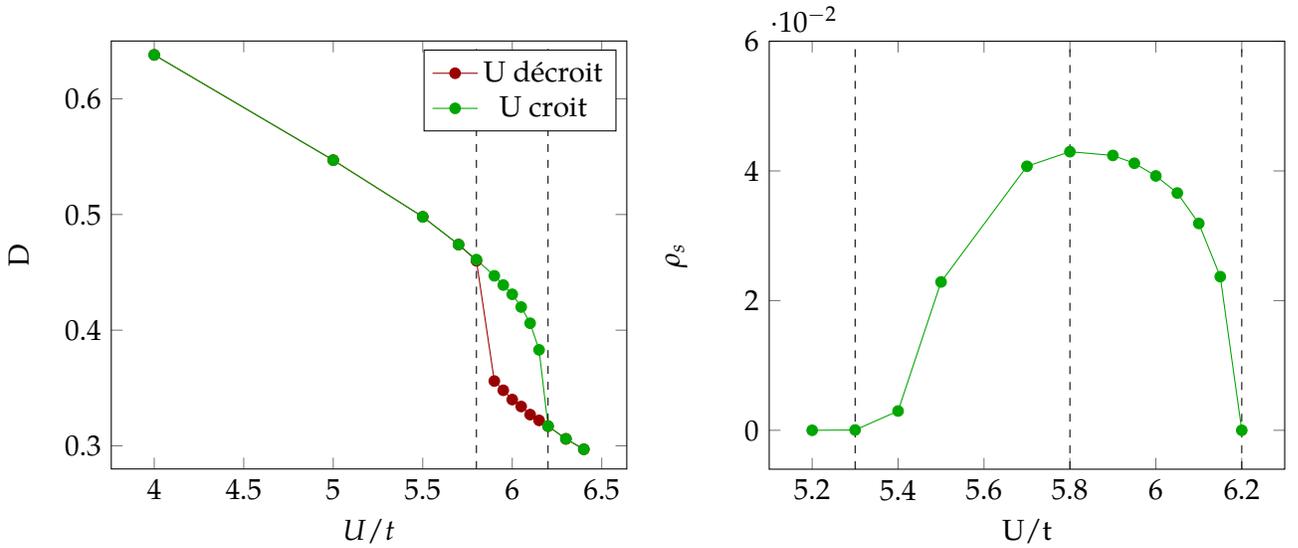


FIGURE 4.7 Température critique T_c selon l'augmentation de la répulsion coulombienne pour $t' = 0.42t$. Les lignes pointillées indiquent $U_{cs} = 5.3t$, $U_c^1 = 5.8t$ et $U_c^2 = 6.2t$. Les deux derniers sont définies à l'aide de la transition de Mott à la Fig. 4.8a. Les incertitudes varient selon la proximité en températures des simulations effectuées et des variations, dues à l'aspect Monte Carlo des simulations, dans le paramètres d'ordre supraconducteurs près de la transition. Une faible barre d'erreur représente alors une chute bien définie du paramètre d'ordre en fonction de la température.

À la Fig. 4.8a, nous pouvons observer la transition de Mott obtenue en changeant la valeur de la

répulsion coulombienne U . La simulation a été effectuée à demi-remplissage à une température $\beta = 60/t$. Tel que mentionné à la Section 1.4, la double occupation diminue selon une tendance linéaire en fonction de l'augmentation de U jusqu'à la valeur $U_{c1} = 5.8t$ où celle-ci commence à diminuer de manière plus drastique pour reprendre un comportement linéaire après $U_{c2} = 6.2t$. Nous observons également la zone d'hystérèse entre $U_{c1} = 5.8t$ et $U_{c2} = 6.2t$ qui correspond au changement de parcours lorsque la répulsion coulombienne a été diminuée. En effet, en vert, nous observons la diminution de la double occupation en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne alors qu'en rouge, nous observons sa hausse en fonction de la diminution de U . À la Fig. 4.8b, nous suivons l'évolution de la rigidité superfluide en fonction de la répulsion coulombienne. Nous pouvons observer que la supraconductivité apparaît à une valeur critique $U_c^s = 5.3t$ pour atteindre une valeur maximale à $U_{c1} = 5.8t$ et disparaître à $U_{c2} = 6.2t$.



(a) Double occupation en fonction de la répulsion coulombienne. La supraconductivité est autorisée. Nous observons que la zone d'hystérèse se situe entre $U_{c1} = 5.8t$ et $U_{c2} = 6.2t$.

(b) Rigidité superfluide ρ_s en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. La supraconductivité apparaît à $U_c^s = 5.3t$. Nous observons que sa valeur maximale est atteinte à $U_{c1} = 5.8t$ et s'éteint à $U_{c2} = 6.2t$.

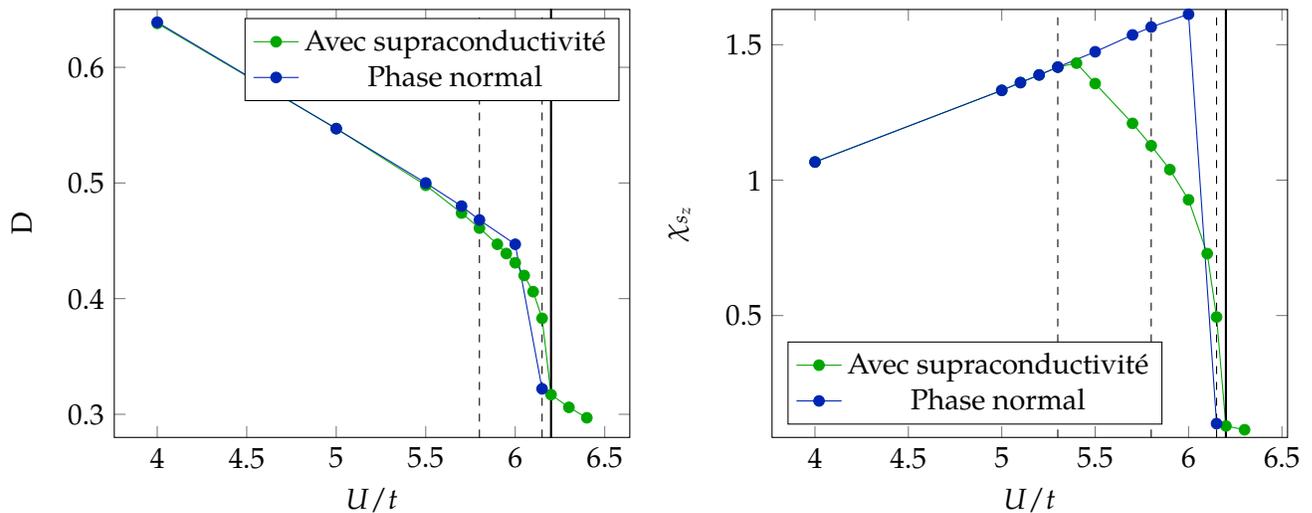
FIGURE 4.8 Étude de la transition de Mott pour $t' = 0.42t$ à $\beta = 60/t$.

Afin d'observer l'effet de la supraconductivité sur la transition de Mott, nous avons également effectué des simulations en n'autorisant pas la supraconductivité¹. À la Fig. 4.9b, nous observons la différence de tendance de la susceptibilité uniforme de spin

$$\chi_{S_z}(\mathbf{k} = 0, \omega = 0) = \int_0^\beta \langle S_z(\tau) S_z(0) \rangle d\tau \quad (4.6)$$

1. L'élément de matrice dans la fonction de Green de Nambu correspondant à la partie anormale est mis égal à zéro dans le fichier d'entrée des simulations.

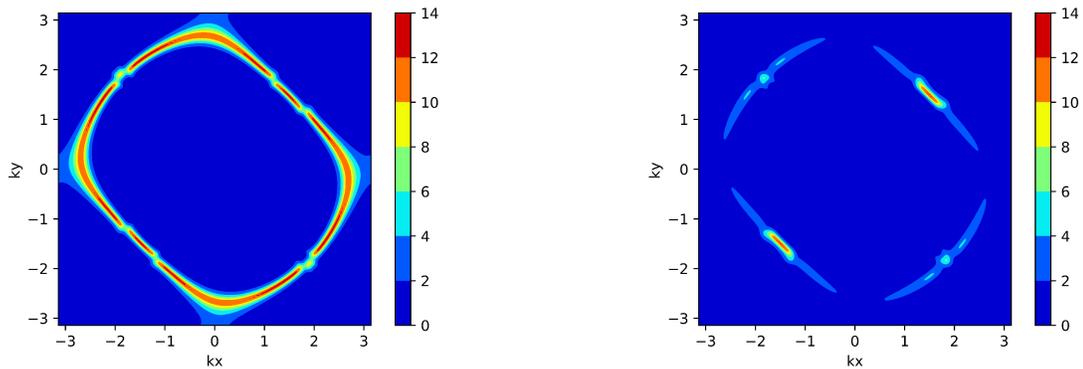
selon le cas où nous autorisons la supraconductivité et le cas où elle est artificiellement supprimée. À la Fig. 4.10a, nous observons ainsi une transition de Mott moins graduelle entre $U_{c1} = 5.8t$ et $U_{c2} = 6.15t$. À la Fig. 4.12a, nous pouvons voir le poids de quasi-particule calculé selon l'Éq. 3.45 dans le cas sans supraconductivité. Celui-ci débute à 1.0 lorsque les interactions sont nulles ($U = 0$) pour diminuer lors de l'augmentation de la répulsion coulombienne. La chute du poids de quasi-particule devient plus prononcée lorsque nous entrons dans la zone d'hystérèse. Celui-ci devient finalement zéro dans la phase isolante. À la Fig. 4.10, nous observons l'ouverture du gap supraconducteur en comparant la surface de Fermi avec et sans supraconductivité.



(a) Double occupation en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne.

(b) La susceptibilité de spin uniforme χ_{S_z} en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne.

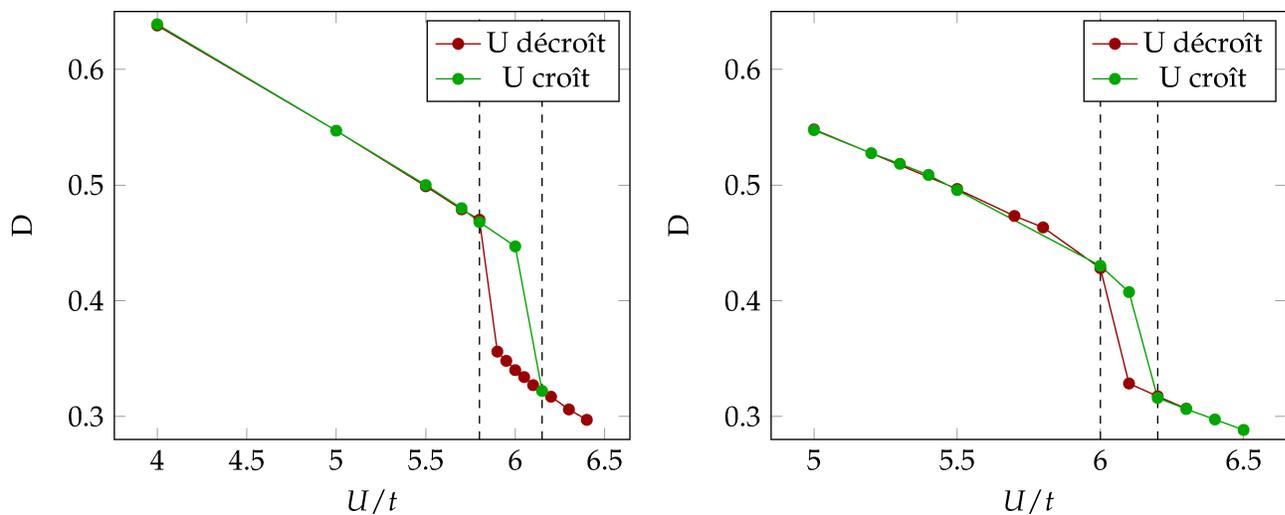
FIGURE 4.9 Étude de l'impact de la supraconductivité sur la transition de Mott pour $t' = 0.42t$ à $\beta = 60$. Nous remarquons un léger décalage de U_{c2} vers la droite lorsque la supraconductivité est présente. Nous comparons le cas où la supraconductivité est autorisée (en vert) avec le cas où elle ne l'est pas (en bleu).



(a) Surface de Fermi sans supraconductivité.

(b) Surface de Fermi avec supraconductivité.

FIGURE 4.10 Surface de Fermi avec deux cents vecteurs d'ondes \mathbf{k} avec une répulsion coulombienne de $U = 6.0t$, une température de $\beta = 60/t$ et une frustration de $t' = 0.42t$. Nous comparons le cas où la supraconductivité est autorisée (à droite) avec le cas où elle ne l'est pas (à gauche).



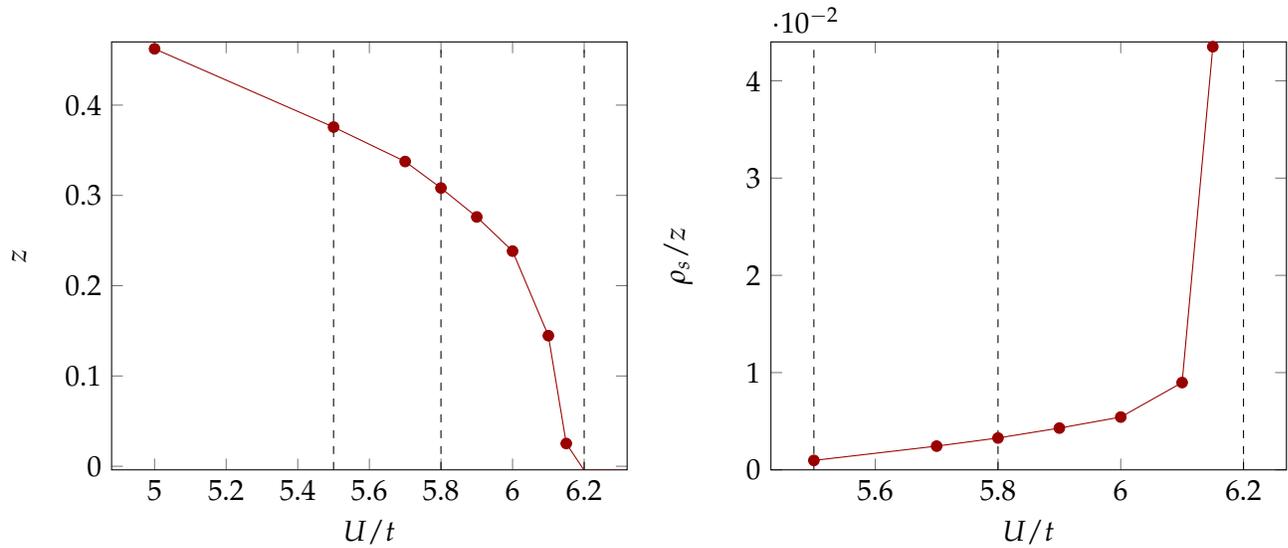
(a) Double occupation en fonction de la répulsion coulombienne à $\beta = 60/t$. Nous observons que la zone d'hystérèse se situe entre $U_{c1} = 5.8t$ et $U_{c2} = 6.15t$.

(b) Double occupation en fonction de la répulsion coulombienne à $\beta = 80/t$. Nous observons que la zone d'hystérèse se situe entre $U_{c1} = 6.0t$ et $U_{c2} = 6.15t$.

FIGURE 4.11 Transition de Mott pour $t' = 0.42t$. À $\beta = 60/t$ (figure gauche), la phase supraconductrice n'est pas autorisée tandis qu'elle est autorisée à $\beta = 80/t$ (figure droite).

Par la suite, la densité superfluide n_s a été étudiée. Une première approximation en utilisant uniquement le poids de quasi-particule et ρ_s peut être vue à la Fig. 4.12b. Ensuite, la masse effective a été calculée selon [47]

$$m^*/m_e = \frac{1}{z} \frac{1}{1 + \frac{d\text{Re}[\Sigma(\omega=0, \mathbf{k})]}{d\mathbf{k}_\perp} / \frac{d\epsilon_{\mathbf{k}}}{d\mathbf{k}_\perp}}, \quad (4.7)$$



(a) Poids de quasi-particule z en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. Remarquons que celui-ci devient nul lorsque nous sommes dans la phase isolante à $U_{c2} = 6.15t$

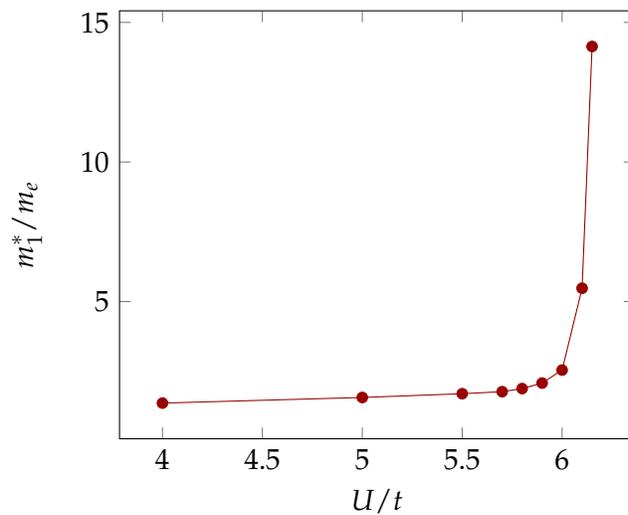
(b) Estimation de la densité superfluide n_s avec $\rho_s/z \propto n_s$, où $\rho_s/z \propto n_s$, en fonction de la répulsion coulombienne U/t .

FIGURE 4.12 En combinant la rigidité superfluide et le poids de quasi-particule, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice.

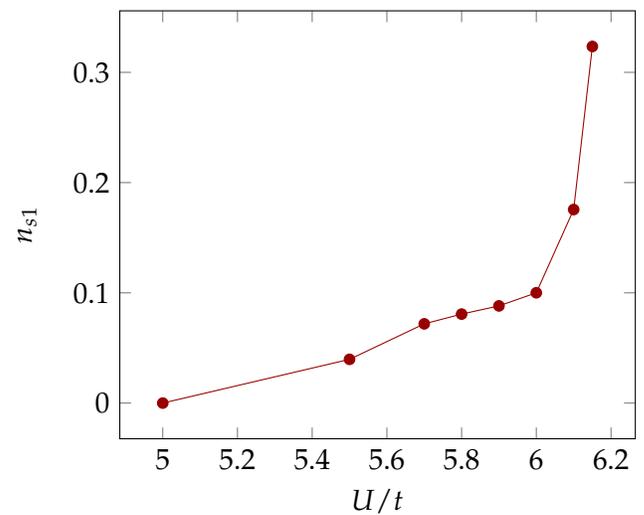
où \mathbf{k}_\perp est pris perpendiculaire à la surface de Fermi et le poids de quasi-particule z est calculé selon l'Éq. 3.45. Nous avons considéré deux points sur la surface de Fermi : un par diagonale. Cela nous a permis de trouver facilement les vecteurs d'onde \mathbf{k}_F^1 et \mathbf{k}_F^2 correspond aux points où la valeur de la fonction spectrale à fréquence nulle $A(0, \mathbf{k})$ est maximale sur la diagonale, \mathbf{k}_F^1 , et sur l'antidiagonale, \mathbf{k}_F^2 . En plus, le vecteur d'onde perpendiculaire à la surface de Fermi en ces points suit la diagonale et rend ainsi la dérivé directionnelle plus commode à effectuer. La densité superfluide est alors calculée selon $n_s = \rho_s \times m^*/m_e$. Ces résultats peuvent être vus aux Figures 4.13 et 4.14.

$\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$

Pour une frustration de $t' = 0.58t$, nous avons effectué le même type de simulation. La transition de Mott peut alors être vue à la Fig. 4.15a à l'aide de la double occupation. La zone d'hystérèse se trouve entre $U_{c1} = 6.4t$ et $U_{c2} = 6.7t$. À la Fig. 4.15b, nous pouvons observer la structure en dôme de la rigidité superfluide ρ_s où la rigidité superfluide apparaît à $U_c^s = 5.9t$, atteint une valeur maximale à $U_{c1} = 6.4t$ et disparaît à $U_{c2} = 6.7t$.

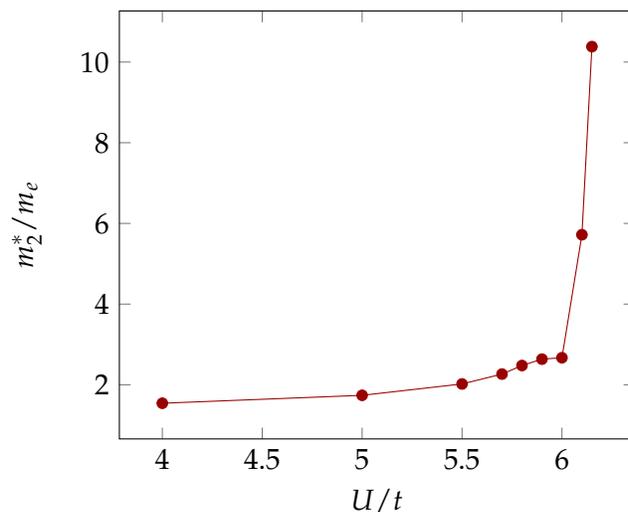


(a) Masse effective de la diagonale correspondant à l'identité m_1^*/m_e en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. Les valeurs dans la phase isolante $U \geq U_{c2}$ ont été retirées puisque la masse effective n'y est pas définie.

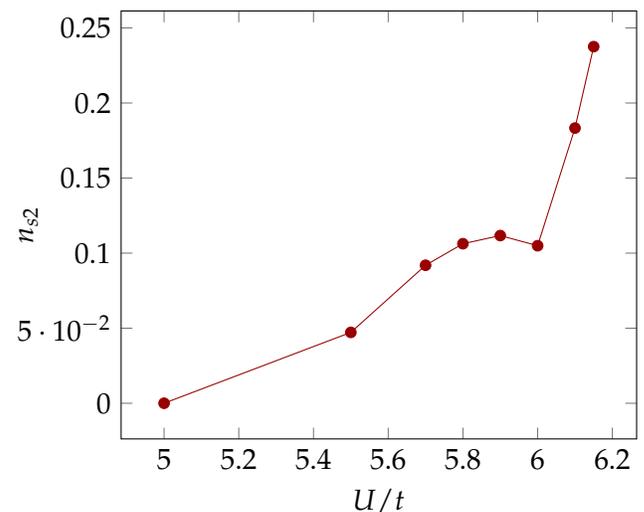


(b) Estimation de la densité superfluide n_{s1} avec $n_s = \rho_s \times m_1^*/m_e$ en fonction de la répulsion coulombienne U/t .

FIGURE 4.13 En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur la diagonale correspondant à l'identité.

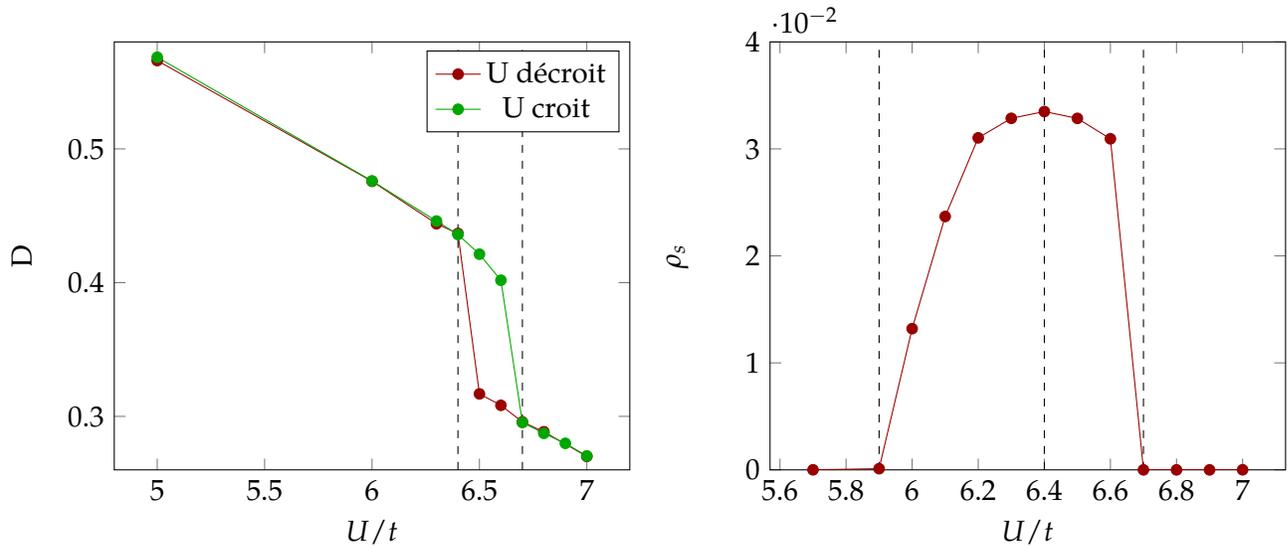


(a) Masse effective de l'antidiagonale m_2^*/m_e en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. Les valeurs dans la phase isolante $U \geq U_{c2}$ ont été retirées puisque la masse effective n'y est pas définie.



(b) Estimation de la densité superfluide n_{s2} avec $n_s = \rho_s \times m_2^*/m_e$ en fonction de la répulsion coulombienne U/t .

FIGURE 4.14 En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur l'antidiagonale.

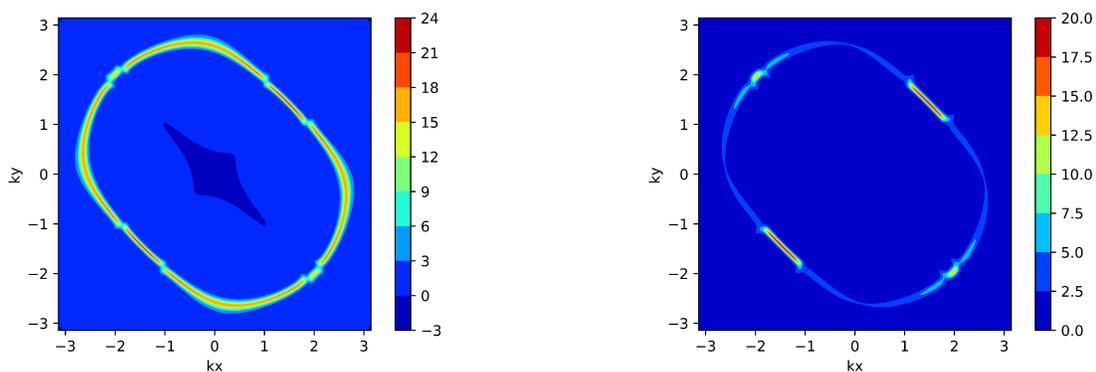


(a) Double occupation en fonction de la répulsion coulombienne. La phase supraconductrice est autorisée. Nous observons que la zone d'hystérèse se situe entre $U_{c1} = 6.4t$ et $U_{c2} = 6.7t$.

(b) Rigidité superfluide ρ_s en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. La supraconductivité apparaît à $U_c^s = 5.9t$. Nous observons que sa valeur maximale est atteinte à $U_{c1} = 6.4t$ et s'éteint à $U_{c2} = 6.7t$.

FIGURE 4.15 Étude de la transition de Mott pour $t' = 0.58t$ à $\beta = 80/t$.

Par la suite, nous pouvons observer la hausse de la température critique en fonction de la répulsion coulombienne jusqu'à la phase isolante à la Fig. 4.16a. À la Fig. 4.16b, nous pouvons observer l'impact de la supraconductivité sur la susceptibilité uniforme de spin. En effet, lorsque la supraconductivité est autorisée, la susceptibilité diminue lorsque la phase supraconductrice apparaît tandis qu'elle continue d'augmenter si la supraconductivité n'est pas autorisée. Finalement, nous avons calculé la masse effective (voir Fig. 4.18a) et la densité superfluide (voir Fig. 4.18b) en fonction de la répulsion coulombienne. À la Fig. 4.17, nous comparons la surface de Fermi dans le cas où la phase supraconductrice est autorisée et le cas où elle ne l'est pas. Finalement, tout comme le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$, nous avons estimé la densité superfluide (Figures 4.18, 4.19 et 4.20).



(a) Surface de Fermi sans supraconductivité.

(b) Surface de Fermi avec supraconductivité.

FIGURE 4.17 Surface de Fermi avec deux cent vecteurs d'ondes \mathbf{k} avec une répulsion coulombienne de $U = 6.5t$, une température de $\beta = 80/t$ et une frustration de $t' = 0.58t$. Nous comparons le cas où la supraconductivité est autorisée (à droite) avec le cas où elle ne l'est pas (à gauche).

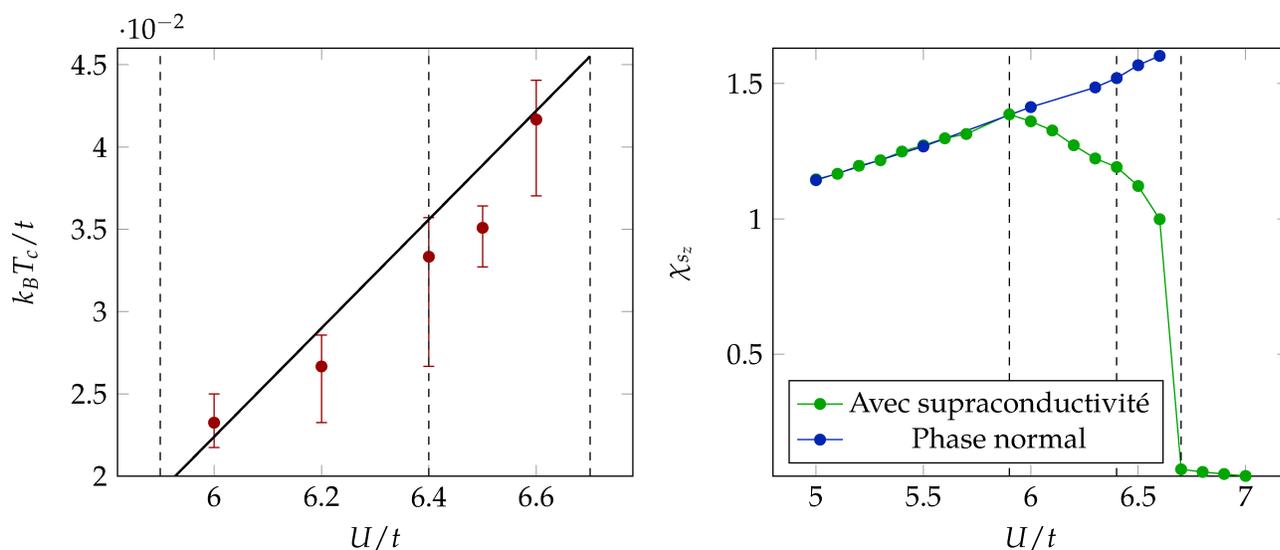
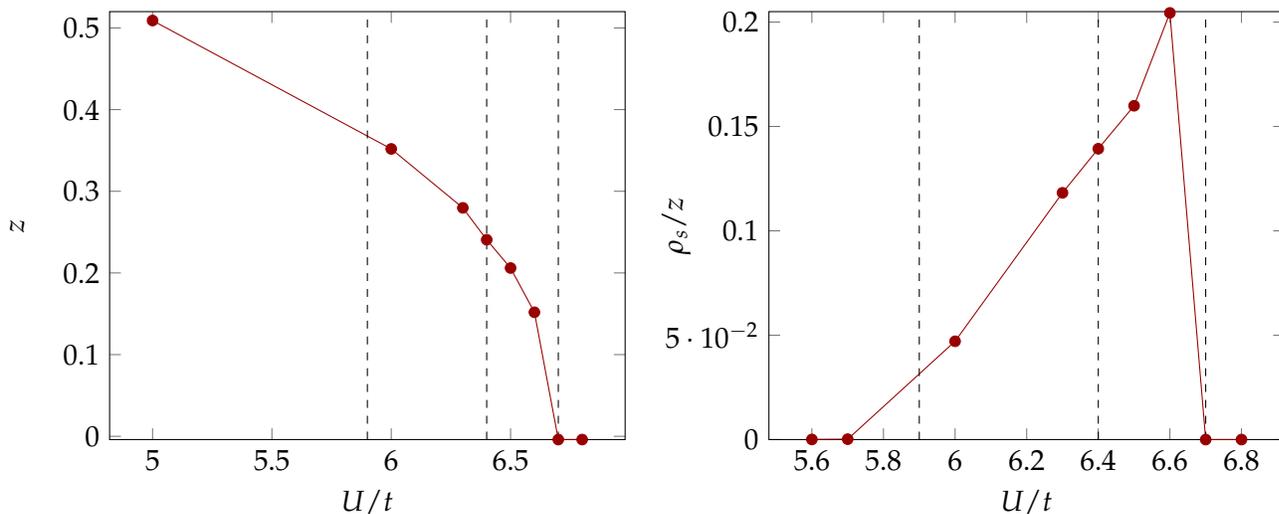
(a) Température critique T_c selon l'augmentation de la répulsion coulombienne.(b) La susceptibilité de spin uniforme χ_{S_z} en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne à $\beta = 80/t$. Le cas où la supraconductivité est autorisée (en vert) est comparé au cas où elle ne l'est pas (en bleu).

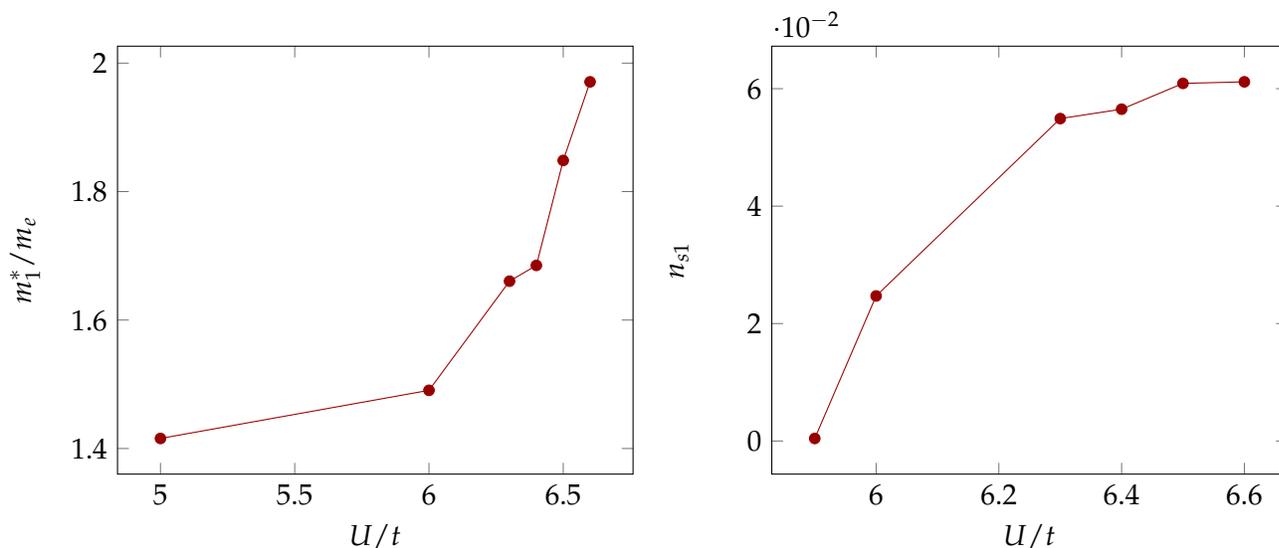
FIGURE 4.16 Résultats de simulation effectués à $t' = 0.58t$. Les lignes pointillées représentent $U_c^s = 5.9t$, $U_{c1} = 6.4t$ et $U_{c2} = 6.7t$.



(a) Poids de quasi-particule z en fonction de la répulsion coulombienne.

(b) Estimation de la densité superfluide n_s avec $\rho_s/z \propto n_s$, où $\rho_s/z \propto n_s$, en fonction de la répulsion coulombienne U/t .

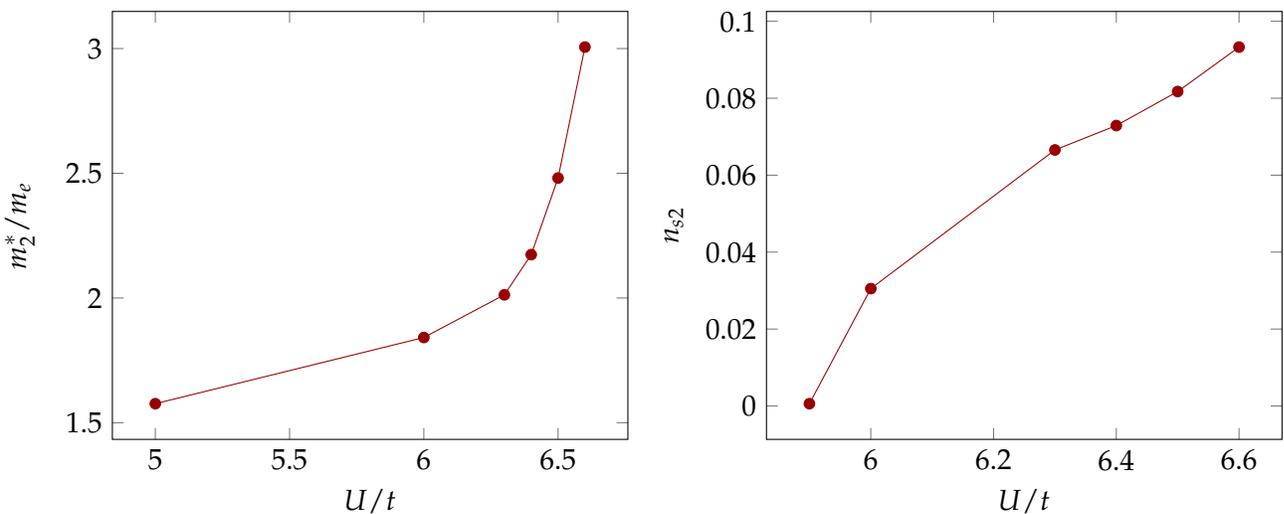
FIGURE 4.18 Résultats de simulation effectués à $t' = 0.58t$ et $\beta = 80/t$. Les lignes pointillées représentent $U_c^s = 5.9t$, $U_{c1} = 6.4t$ et $U_{c2} = 6.7t$.



(a) Masse effective de la diagonale correspondant à l'identité m_1^*/m_e en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. Les valeurs dans la phase isolante $U \geq U_{c2}$ ont été retirées puisque la masse effective n'y est pas définie.

(b) Estimation de la densité superfluide n_{s1} avec $n_s = \rho_s \times m_1^*/m_e$ en fonction de la répulsion coulombienne U/t .

FIGURE 4.19 En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur la diagonale correspondant à l'identité.



(a) Masse effective de l'antidiagonale m_2^*/m_e en fonction de l'augmentation de la répulsion coulombienne. Les valeurs dans la phase isolante $U \geq U_{c2}$ ont été retirées puisque la masse effective n'y est pas définie.

(b) Estimation de la densité superfluide n_{s2} avec $n_s = \rho_s \times m_2^*/m_e$ en fonction de la répulsion coulombienne U/t .

FIGURE 4.20 En combinant la rigidité superfluide et la masse effective, nous pouvons estimer la densité superfluide, c'est-à-dire le nombre de porteurs actifs dans la phase supraconductrice. Nous utilisons ici les résultats pour le vecteur d'onde de Fermi situé sur l'antidiagonale.

Discussion

Tout d'abord, nous constatons que la température critique ne cesse d'augmenter entre U_c^s et U_{c2} malgré le fait que la rigidité superfluide atteigne son maximum à U_{c1} . Cela est vrai pour les deux frustrations, $t' = 0.42t$ (Fig. 4.7) et $t' = 0.58t$ (Fig. 4.16a). Selon les références [62, 63, 67, 61], la température critique T_c augmente lorsque la pression diminue dans les supraconducteurs organiques bidimensionnels. Les résultats de la Fig. 4.7 et la Fig. 4.16a donnent alors une tendance similaire selon nos modèles. Par exemple, à la Fig. 4.21, nous comparons la température critique à $t' = 0.42t$ et le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$. Les résultats numériques sont en fonction d'une pression effective t/U . Nous nous rappelons que le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ et $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ ont approximativement la même frustration (voir Tableau 1.1) mais à des pressions effectives t/U différentes. Dans le cas du $\kappa - \text{ET}_2\text{I}_3$ [66], une chute drastique de la température critique est observée expérimentalement en diminuant la pression. Toutefois, ce saut est plutôt la signature d'un changement de conformation structurale. En effet, telle qu'étudiée à la Réf. [29], la disposition des dimères changera les paramètres du modèle de Hubbard. Suite à ces résultats, la température critique peut ainsi être approximée par une droite dans la région U_c^s et U_{c2} , soit sur l'ensemble de ses valeurs. Pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$, nous obtenons que $T_c = 0.02 U - 0.08$ tandis que pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ nous obtenons que $T_c = 0.03 U - 0.15$. La température critique calculée en CDMFT correspond à celle de formation locale de paires où la cohérence locale et globale sont

atteintes simultanément.

La dimensionalité de notre modèle 2D rend la comparaison de la température critique obtenue avec la littérature expérimentale plus délicate [34, 76, 15, 26, 48, 50, 49]. En effet, dans un régime purement bidimensionnel, la physique de Korsterlitz-Thouless, reliée aux fluctuations de phase, devient importante. La physique de Korsterlitz-Thouless demande une grande résolution spatiale et n'est alors pas capturée dans notre modèle numérique. Toutefois, dans le cas d'un couplage faible entre les plans, la température critique se rapprochera de celle calculé en CDMFT. En effet, la CDMFT, malgré qu'elle soit exacte en dimension infinie, représente une approximation de type champ moyen en 2D qui viole donc le théorème de Mermin-Wagner. Le système n'est alors plus strictement bidimensionnel. La transition obtenue n'est donc pas une transition Korsterlitz-Thouless mais se rapproche d'une transition où l'anisotropie est petite de telle sorte que la transition de phase tri-dimensionnelle se produit très près de l'endroit où la longueur de corrélation bidimensionnelle croît rapidement. Les références [77, 31] ont observé un comportement principalement tridimensionnel entre la densité superfluide et longueur de pénétration $n_s \propto 1/\lambda^2(0)$ plutôt que bidimensionnel $n_s \propto \sqrt{1/\lambda^2(0)}$ qui fut observé dans des couches minces. Il est intéressant de constater que les auteurs de la référence [68] ont obtenu un comportement de la température critique plutôt en forme de dôme (voir Fig. 4.21c) pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[N(\text{CN})_2]\text{Cl}$. Ces derniers expliquent que la superconductivité est uniquement présente de manière inhomogène lorsque la pression est plus basse. Cela peut être expliqué si la transition vers la phase métallique ne se fait pas simultanément dans l'ensemble de l'échantillon. Ce phénomène ne peut pas être capturé par les simulation telles que faites dans nos travaux. Toutefois, certaines généralisations de la CDMFT [25, 14] permettent l'introduction d'inhomogénéités et peuvent ainsi être utiliser pour étudier cette situation. Nous constatons à la Fig. 4.21c que le dôme est similaire à celui de la rigidité superfluide à basse température. Nous constatons également qu'aucune valeur en dessous de 300 bar n'est affiché à la Fig. 4.21b dû à des difficultés expérimentales. Malheureusement, cela limite la comparaison avec l'expérience dans la zone de coexistence.

Finalemnt, EMERY et KIVELSON [23] ont pu obtenir une modélisation de la transition supraconductrice reliant T_c et la longueur de pénétration à température nulle $1/\lambda^2(0) \propto \rho_s$. Nous alors donc rappeler leurs principaux arguments ici. L'hamiltonien gouvernant la thermodynamique des fluctuations de phase à longues longueurs d'onde à basse température est l'énergie cinétique de la phase superfluide :

$$H = \frac{1}{2} m^* n_s(0) \int d\mathbf{r} v_s^2, \quad (4.8)$$

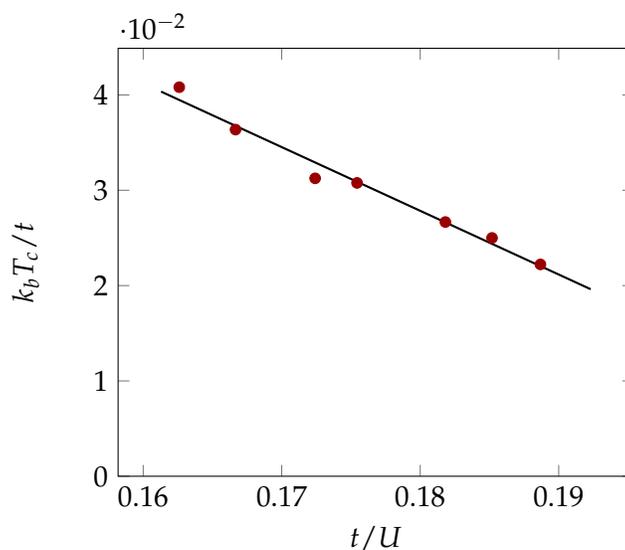
où $v_s = \hbar \nabla \theta / 2m^*$ est la vitesse superfluide, m^* est la masse effective et θ la phase. Nous imposons alors un coupure à courte distance puisque les variables sont définies dans une région de taille a . La dérivée devient alors une différence finie. Le modèle capture alors bien la physique à longue portée du modèle XY de la mécanique statistique. Ainsi, l'énergie caractéristique pour les fluctuations de

phase est la rigidité de phase $V_0 = \hbar^2 n_s(0) a / 4m^*$. Cela peut être exprimé en fonction de l'échelle de distance a et la longueur de pénétration à partir de la relation $4\pi n_s(0) = m^*(c/e\lambda(0))^2$ comme

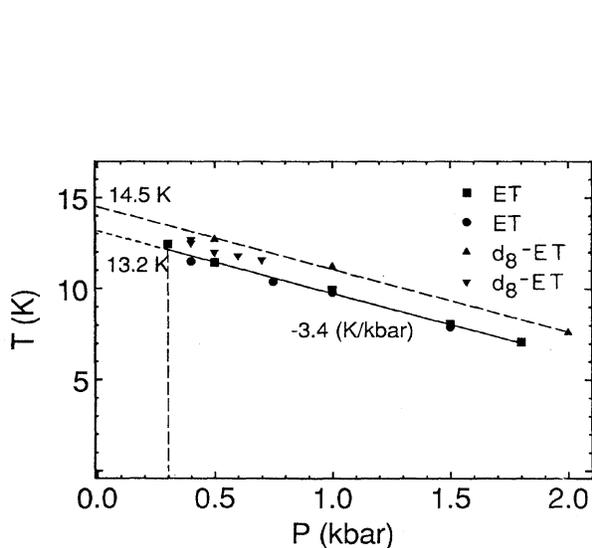
$$V_0 = \frac{(\hbar^2 c)^2 a}{16\pi e^2 \lambda^2(0)} . \quad (4.9)$$

Puisque V_0 est l'énergie caractéristique du modèle, la température de transition sera $T_\theta^{max} = AV_0$ où A est un facteur sans dimension près de 1 qui dépend de la physique à courte portée.

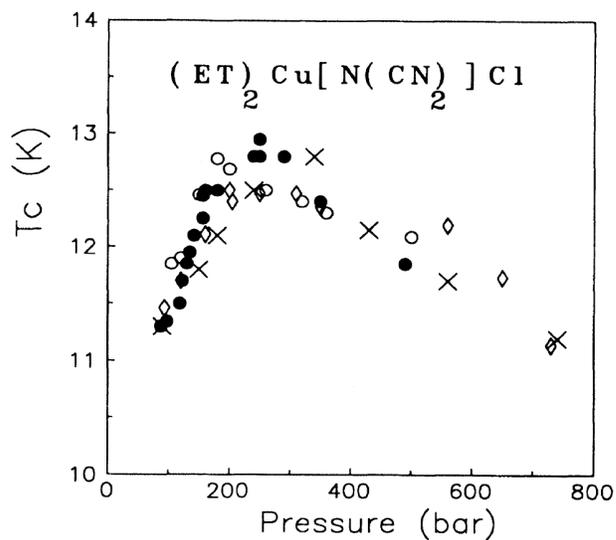
Le comportement de la rigidité superfluide entre U_{c1}^s et U_{c2} tend à former un dôme avec sa valeur maximale à U_{c1} (voir Fig. 4.8b et 4.15b). Dans la région de coexistence entre U_{c1} et U_{c2} , la diminution de la rigidité superfluide semble suivre la diminution du poids de quasi-particule. Cela correspondrait bien à l'intuition habituelle que $\rho_s \sim n_s/m^*$. En effet, lorsque la contribution de la masse effective est ajoutée, la densité superfluide n'a plus la forme de dôme de la rigidité superfluide mais a plutôt une croissance presque monotone jusqu'à la phase isolante. À la Fig. 4.18a, nous pouvons voir que le poids de quasi-particule chute de manière plus drastique dans la zone de coexistence entre U_{c1} et U_{c2} . La chute de la rigidité superfluide dans cette même région peut alors être attribuée à la hausse de la masse effective plutôt qu'à une chute du nombre de porteurs supraconducteurs (voir Figures 4.18b, 4.19 et 4.20). En effet, si nous enlevons la contribution de la masse effective à la rigidité superfluide pour obtenir la densité superfluide $n_s = \rho_s \times m^*/m_e$, nous obtenons une croissance presque linéaire jusqu'à près de la phase isolante où le nombre de porteurs supraconducteurs croît très rapidement dû à la croissance de la masse effective. Il est important de noter que la densité superfluide devient alors moins bien définie puisque nous multiplions une quantité qui tend à diverger vers l'infini, la masse effective m^*/m , et une quantité qui tend vers zéro, la rigidité superfluide ρ_s . Afin d'étudier la correspondance expérimentale, la masse effective calculée à $t' = 0.58t$ est comparée aux mesures effectuées par CAULFIELD et al. [12] où une bonne concordance qualitative est obtenue (Fig. 4.22). En effet, on peut y observer deux régimes. Le premier à faible pression où la masse effective décroît très rapidement et un second à pression plus élevée où la masse effective décroît de manière plus graduelle. Dans nos calculs, nous observons une relation directe entre ρ_s et T_c uniquement dans la zone qui précède la région de coexistence. Toutefois, une relation semble plus directe entre la densité de porteurs superfluides et la température critique. Ainsi, la relation semble une limite particulière où la rigidité superfluide est une bonne approximation du nombre de porteurs supraconducteurs c.-à-d. où la masse effective ne varie pas de manière drastique comme vu dans la zone de coexistence.



(a) Température critique obtenue numériquement pour $t' = 0.42t$ en fonction de la pression effective t/U .

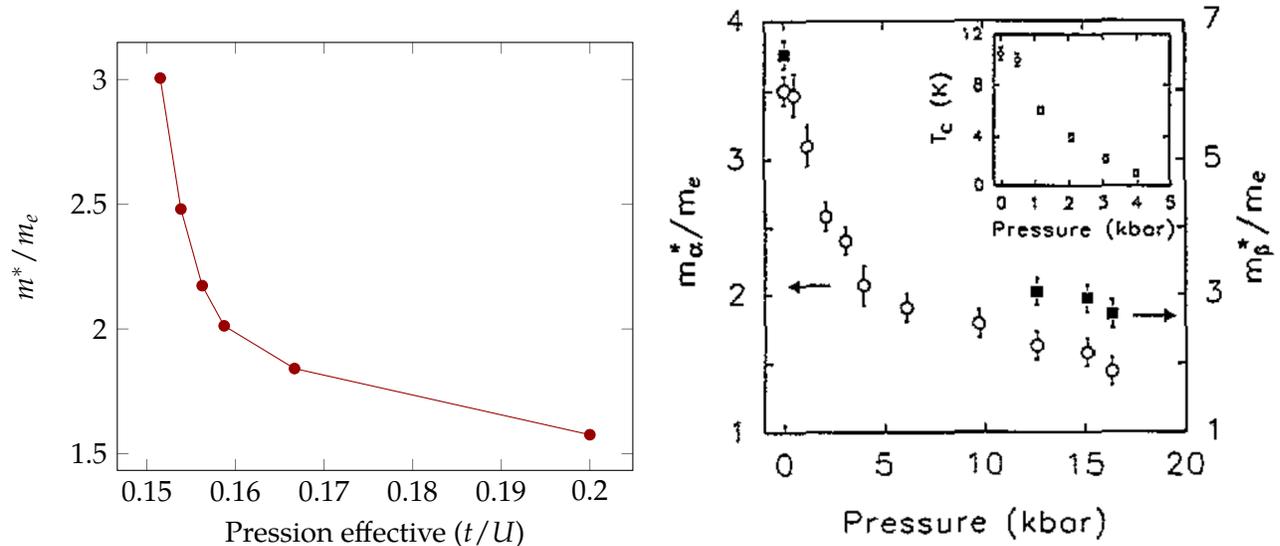


(b) Température critique en fonction de la pression pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ obtenue par SCHIRBER et al. [61].



(c) Température critique en fonction de la pression pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ obtenue expérimentalement par SUSHKO et ANDRES [68].

FIGURE 4.21 Comparaison des résultats numériques avec la littérature expérimentale pour la température critique du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$.



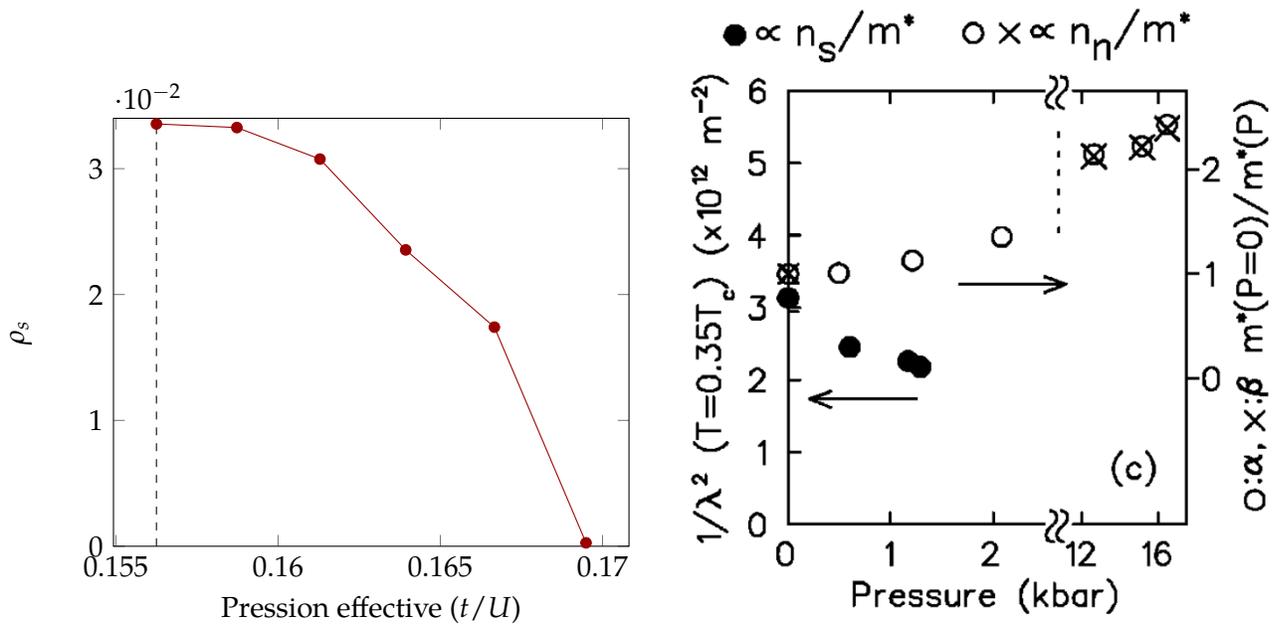
(a) Masse effective obtenue numériquement pour $t' = 0.58t$ à $\beta = 80/t$ à utilisant la dernière équation de PARCOLLET, BIROLI ET KOTLIAR [47]. Les valeurs obtenues dans la phase isolante ont été enlevées car la masse effective n'y est pas définie dû à l'absence de surface de Fermi.

(b) Masses effectives obtenues pour deux orbitales cyclotrons (α et β) pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ [12]. Les masses effectives ont été calculées en utilisant les oscillations de Shubnikov-de Haas.

FIGURE 4.22 Comparaison des résultats numériques avec la littérature expérimentale pour la masse effective du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$.

À la Fig. 4.23, nous comparons les résultats pour la rigidité superfluide ρ_s et l'inverse au carré de la longueur de pénétration $1/\lambda^2$ qui, tel que décrit à la Section 3.1.1, est la quantité physiquement mesurable correspondante. On voit que la diminution avec la pression apparaît dans les deux cas. Mentionnons toutefois que c'est la longueur de pénétration intra-plan qui est mesurée (voir Fig. 3.1). Cela inclut donc les interactions qui correspondent à des corrections de vertex. Celles-ci peuvent avoir un impact significatif [9]. Si l'on considère que la rigidité superfluide est la trace de la fonction de Gorkov au carré, des corrections sont alors nécessaires pour la relier à la longueur de pénétration. Si l'on mesure la longueur de pénétration interplan, la mesure expérimentale sera également affectée par le type de couplage interplan et les fluctuations de phase. Ces deux aspects doivent alors être étudiés indépendamment pour isoler la contribution de la rigidité superfluide. Un second facteur à considérer est le fait que le graphique expérimental comprend peu de points. Puisque la correspondance entre la pression et t/U n'est pas exacte, un plus grand nombre de points serait nécessaire pour définir dans quel régime nous sommes. À pression nulle, le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ demeure dans sa phase métallique et nous n'avons donc pas accès à la zone de coexistence. Cette dernière zone n'a alors pu être observée. Ainsi, uniquement les résultats obtenus entre $U = 0$ et U_{c1} peuvent être comparés à ces mesures. Il est également possible que la valeur de t/U correspondant à une pression nulle pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ soit encore plus élevée.

Il y a deux façons d'obtenir la totalité de la transition de Mott expérimentalement. La première est en appliquant la pression sur le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$, composé semi-conducteur à pression ambiante, pour obtenir une transition semi-conducteur-à-métal. La seconde manière est par application d'une pression chimique en remplaçant progressivement le Cl par du Br, c.-à-d. en faisant passer x de 1 à 0 dans le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x}$. Une expérience intéressante serait alors de mesurer la longueur de pénétration interplan du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Cl}$ en fonction de la pression. Si la température est suffisamment élevée pour que les fluctuations de phase deviennent moins importantes et suffisamment basses pour que la supraconductivité soit présente, nous aurons alors une mesure expérimentale qui devrait se rapprocher de la rigidité superfluide calculée dans notre modèle. La seule correction supplémentaire serait de déterminer le type de couplage entre les plans afin d'isoler la dépendance en k de $t_{\perp}(k_x, k_y)$.



(a) Rigidité superfluide obtenue numériquement pour $t' = 0.58t$ à $\beta = 80/t$. Les valeurs obtenues à partir de U_{c1} ont été enlevé puisque le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ est métallique à température ambiante. La phase de coexistence et la phase isolante ne peuvent donc être obtenues expérimentalement. La ligne pointillée représente t/U_{c1} .

(b) Inverse au carré de la longueur de pénétration $1/\lambda^2$ pour le $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$ obtenue expérimentalement par LARKIN et al. [39]. Puisque les mesures ont été effectuées avec le champ magnétique perpendiculaire aux plans de conduction, la comparaison avec les résultats numériques n'est pas directe.

FIGURE 4.23 Comparaison des résultats numériques avec la littérature expérimentale pour la longueur de pénétration du $\kappa - \text{ET}_2\text{Cu}[(\text{NCS})_2]$.

Puisque la rigidité superfluide ne suit pas la tendance de la température critique pour l'ensemble de ses valeurs, nous nous sommes également intéressés à la susceptibilité uniforme de

spin afin d'identifier une observable à laquelle elle pouvait être corrélée. Nous remarquons que dans le cas où la supraconductivité n'est pas autorisée, celle-ci croît linéairement en fonction de la répulsion coulombienne. La chute observée lors de l'entrée dans la phase supraconductrice s'explique par la formation de paires. En effet, lorsque sous la forme de paire, les électrons ne peuvent plus répondre en tant que spins indépendants. Selon notre modèle numérique, la température critique peut être liée à la rigidité superfluide à basse température pour une même répulsion coulombienne en dehors de la zone de coexistence. De plus, nous observons que la température critique croît comme la susceptibilité uniforme de spin.

Malheureusement, aucune explication théorique n'est satisfaisante pour expliquer la loi de Homes [19]. Toutefois, mentionnons ZAAANEN [79] qui explique la haute température critique des cuprates par le fait qu'ils sont aussi visqueux que possible dans les limites de la mécanique quantique dans la phase normale. TALLON et al. [69] interprètent la loi d'échelle dans la limite sale. Puisque les résultats de DORDEVIC, BASOV et HOMES contiennent des supraconducteurs qui ne sont pas dans cette limite, cette interprétation ne peut être généralisée. UEMURA et al. [73] avait déjà trouvé expérimentalement que $\rho_s \propto T_c$. L'ajout de Homes a alors été de trouver une constante de proportionnalité pour chaque matériel soit $\rho = 1/\sigma_{dc}$. BASOV et al. [6] avaient déjà observé que $1/\lambda_{\perp}^2(0) \propto \sigma_{dc}^{\perp}$. Ces deux mesures sont en effet, en réponse linéaire, des réponses courant-courant mais dans la limite dissipative dans le cas de la conductivité et dans la limite non-dissipative dans le cas de $1/\lambda_{\perp}^2(0)$. Le terme dominant sera alors proportionnel à t_{\perp}^2 dans les deux cas. L'ajout de la conductivité par Homes peut donc se justifier parce que nous sommes dans un même matériel et que les électrons, peu importe la phase, sont régis par les mêmes échelles d'énergie dues à la structure. Finalement, il est important de mentionner les travaux de TANNER et al. [70] qui ont observé que seulement environ 20-25% des porteurs actifs de la phase normale se condensent dans la phase supraconductrice dans les cuprates.

En bref, selon une approche traditionnelle BCS, la densité superfluide tendrait vers la densité normale de porteurs en s'éloignant de la transition de Mott $n_s \rightarrow n$. On observe toutefois, à travers la rigidité superfluide, que la densité de porteurs superfluide croît en se rapprochant de la transition de Mott, indiquant l'importance des interactions électron-électron pour la formation de paires dans ce type de supraconducteur. Pour les recherches futures, il serait intéressant de relier la hausse de la température critique aux fluctuations de spin. Nous pourrions alors nous inspirer de KYUNG, SÉNÉCHAL et TREMBLAY [37] qui associent les échelles d'énergies de l'apparition des paires de Coopers aux mêmes échelles dans les fluctuations de spin et des travaux expérimentaux de ITAYA et al. [33] qui ont étudié la relation entre la hausse de la température critique et le facteur de Korringa² [78]. Afin de compléter l'étude de la loi de Homes dans les supraconducteurs organiques

2. Le facteur de Korringa K caractérise le type de corrélation entre les électrons. Si $K = 1$, le système est considéré comme un métal standard, si $K > 1$, une contribution antiferromagnétique est attendue et si $K < 1$, une contribution ferromagnétique est attendue.

en CDMFT et obtenir un graphique de température critique en fonction de la rigidité superfluide, il resterait à extrapoler ρ_s à température nulle. Avec les valeurs actuelles, puisque le ratio T/T_c varie en fonction de U , une normalisation de ρ_s adaptée au comportement en température serait alors nécessaire pour bien caractériser la valeur à température nulle. Les résultats actuels suggèrent toutefois que la tendance de la loi de Homes est reproduite à l'extérieur de la zone de coexistence.

Conclusion

Dans l'histoire de la recherche, des lois phénoménologiques apparaissent souvent avant les explications théoriques plus profondes. En effet, un phénomène est par définition quelque chose qui se manifeste lui-même, qui apparaît de manière évidente. Un exemple de loi phénoménologique dans le domaine des supraconducteurs est la loi dite de Homes, soit que $1/\lambda^2(0) \sim \sigma_{dc} T_c$ obtenue en compilant les travaux de la communauté dans le domaine. Lorsque nous voulons établir une théorie, nous devons nous intéresser à ce qui n'est pas manifeste, à ce qui se trouve en dessous de la surface. Nous avons donc effectué des simulations numériques en CDMFT qui nous permettent d'observer l'impact d'un paramètre très précis, chose qui ne peut être faite expérimentalement. La CDMFT a été utilisée puisqu'elle permet d'aborder ce type de supraconductivité à proximité d'une transition de Mott. Dans ce mémoire c'est la rigidité superfluide ρ_s à basse température, proportionnelle à $1/\lambda^2$ qui a été étudiée près de la transition de Mott. Les paramètres utilisés dans les simulations reflètent les supraconducteurs organiques qui appartiennent à la catégorie des supraconducteurs à haute température critique.

En supposant que λ_{\perp} et λ_{\parallel} suivent la même tendance en fonction de la pression, des résultats en accord qualitatif avec l'expérience et incompréhensibles dans le cadre de la théorie BCS standard ont déjà été obtenus ici. Plus spécifiquement, en diminuant la pression, la rigidité superfluide augmente en se rapprochant de la transition de Mott, jusqu'à la zone de coexistence métal-isolant. Or, la formule BCS pour la rigidité superfluide dans la limite basse température, $\mu_0 n e^2 / m$, suggère que le scénario inverse se produit. En effet, pour ces supraconducteurs organiques, la densité n est constante et la masse effective augmente à mesure qu'on s'approche de la transition métal-isolant. Cette augmentation de la masse effective a été non seulement reproduite par nos calculs mais elle est en plus en accord presque quantitatif avec les expériences. L'augmentation de la température critique en s'approchant de la transition de Mott, déjà obtenue dans des travaux théoriques et expérimentaux, a été confirmée ici.

Le résultat que la température critique augmente avec la rigidité superfluide jusqu'à la zone de coexistence est un nouveau résultat théorique qui est en accord avec l'expérience. On doit cependant souligner que la chute de ρ_s dans la zone de coexistence doit être vue comme une prédiction théorique due à l'absence de mesures expérimentales dans cette région. Rappelons que dans la théorie BCS, ρ_s et T_c ne sont pas corrélées. Or, en plus de la loi de Homes mentionnée ci-haut, des

travaux récents démontrent que même dans les cuprates surdopés, il y a une relation entre rigidité superfluide et la température critique semblable à celle trouvée dans ce mémoire. Pour finir, notons que si on insiste pour appliquer une formule BCS du type $\mu_0 n_s e^2 / m$ à nos résultats pour la rigidité superfluide, on constate que la densité superfluide n_s doit augmenter de façon monotone en suivant T_c même dans la zone de coexistence. Cette augmentation de ρ_s à travers n_s ne serait pas alors due à l'augmentation des porteurs normaux n mais plutôt à celle des fluctuations de spins permettant l'appariement des paires de Cooper. Dans les études à suivre, il faudrait calculer la valeur de σ_{dc} et continuer l'étude de ρ_s jusqu'à température nulle pour compléter l'étude de la loi de Homes.

Annexe A

Complément numérique : Introduction aux fonctions de Green

Notebook disponible à l'adresse : <https://github.com/Simpliphy/memoire-figures>

Ce notebook sert à introduire la programmation python et donner un exemple de calcul numérique de fonction de Green. Pour exécuter l'ensemble du notebook, l'utilisateur peut cliquer sur kernel→restart and run all. Pour exécuter les cellules une à une, l'utilisateur peut utiliser la commande du clavier shift+enter après avoir sélectionné la cellule à exécuter.

L'entête de la majorité des codes est composée de l'importation des bibliothèques nécessaires pour son exécution.

```
In [1] : import numpy as np
         import matplotlib.pyplot as plt
```

La deuxième partie contient les déclarations. Nous allons attribuer des valeurs numériques aux paramètres de l'hamiltonien. Ceux-ci peuvent être changés par l'utilisateur pour observer leur impact. On retrouve également des "arrays" de la bibliothèque numpy qui sont une structure de données de type matrice.

```
In [2] : E1 = -0.25
         E2 = 0.25
         t = 0.5
         eta = 0.01
         H = np.array([[E1, -t], [-t, E2]])
```

```
In [3] : Energies = np.linspace(-1,1,201)
         GreenFunction = np.zeros([201,2,2], dtype = "complex128")
         A_spectraleFunction = np.zeros([201,2,2],dtype = "complex128")
         DensityOfStates = np.zeros([201])
```

Dans la section suivante, nous calculons les fonctions de Green, la fonction spectrale et la densité d'état pour chaque élément du maillage du domaine de l'énergie.

```
In [4] : ii = 0
         for E in Energies :

             GreenFunction[ii] = ...
                 ... np.linalg.inv( (E + 1j*eta)*np.identity(2) - H )
             A_spectraleFunction[ii] = 1j*(      GreenFunction[ii] - ...
                 ... np.conj(np.transpose(GreenFunction[ii])) )
             DensityOfStates[ii] = A_spectraleFunction[ii,0,0]

         ii += 1
```

Les résultats sont finalement affichés :

```
In [5] : plt.figure()

         plt.plot(Energies,DensityOfStates, "-ro",zorder=1)
         plt.xlabel( "E" )
         plt.title( "Densite d'etat au site 1" )

         plt.show()
         plt.close()
```

Annexe B

Rappel de physique statistique

Supposons que nous ayons un système avec une température définie et fixe. Plusieurs états propres du système peuvent correspondre à une même température fixée. La probabilité p_i d'être dans l'état i ayant une énergie E_i à une température T va donc être donnée par le poids de Boltzmann $p_i = e^{-E_i/k_B T}$ où k_B est la constante de Boltzmann. Pour évaluer la moyenne d'un opérateur O , nous allons donc utiliser cette pondération de la manière suivante :

$$\langle O \rangle \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr} [\rho O] \quad (\text{B.1})$$

où $Z \equiv \text{Tr} [\rho]$ et $\rho \equiv \exp [-H/k_B T]$. Nous allons définir la température inverse comme $\beta = 1/k_B T$. Supposons que nous ayons une base d'états propres $\{|n\rangle\}$ ayant des énergies propres $\{E_n\}$ du système, alors nous pouvons réécrire les définitions précédentes comme

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \rho O | n \rangle \quad (\text{B.2})$$

où $\rho = \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-\beta E_n}$. En travaillant dans l'ensemble grand canonique, nous avons les états où le site est occupé $|1\rangle$ et l'état où le site est vide $|0\rangle$. L'hamiltonien pour ce système est alors

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

où la base est composée de l'état occupé $|1\rangle$ et de l'état vide $|0\rangle$. La Fig. B.1 montre l'évolution de l'occupation du site en fonction de la température selon l'Éq. B.1.

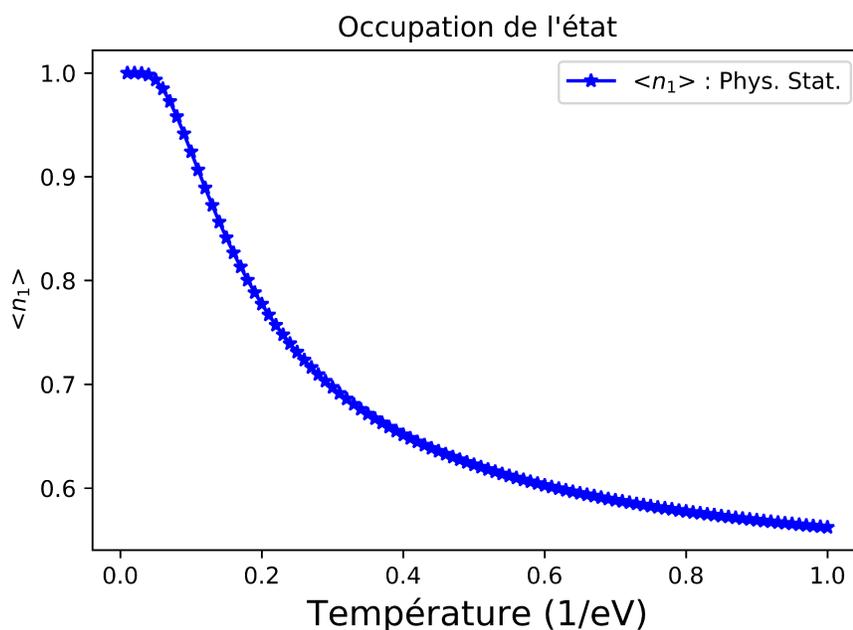


FIGURE B.1 Évolution de l’occupation des sites en fonction de la température selon l’Éq. B.1 en utilisant $\mu = 0$ eV et $E_1 = -0.25$ eV.

Dans cette section, nous avons rappelé à l’Éq. B.1 comment évaluer des moyennes thermodynamiques d’opérateurs. Nous avons utilisé cette définition afin d’observer l’évolution de l’occupation d’un site en fonction de la température. À l’Annexe C, nous calculerons la même quantité, mais en utilisant les fonctions de Green en fréquences de Matsubara.

Code python

Notebook disponible à l’adresse : <https://github.com/Simpliphy/memoire-figures>

Ce notebook sert à effectuer le calcul d’une moyenne thermodynamique à l’aide de la méthode “classique” en physique statistique.

L’entête de la majorité des codes est composée de l’importation des librairies nécessaires pour son exécution. Pour exécuter l’ensemble du notebook, l’utilisateur peut cliquer sur kernel→restart and run all. Pour exécuter les cellules une à une, l’utilisateur peut utiliser la commande du clavier shift+enter après avoir sélectionné la cellule à exécuter.

```
In [1] : import numpy as np
         from scipy.linalg import expm, sinm, cosm
         import matplotlib.pyplot as plt
```

La deuxième partie contient les déclarations. Nous allons attribuer des valeurs numériques aux paramètres de l'hamiltonien. Ceux-ci peuvent être changés par l'utilisateur pour observer leur impact. On retrouve également des "arrays" de la librairie numpy qui sont une structure de données de type matrice.

```
In [2] : E1 = -0.25
         mu = 0

         H = np.array([[E1 - mu, 0],[0,0]])
         observable = np.array([[1, 0],[0,0]])
```

```
In [3] : number_of_T = 100
         T_max = 1.0

         TemperatureValues = np.array([ ...
         ... (i+1)*T_max/(number_of_T+0.0) for i in range(number_of_T)])
         occupationClassique = np.zeros([number_of_T])
```

Dans la section suivante, nous calculons l'occupation du site selon la physique statistique standard.

```
In [4] : ii= 0

         for temperature in TemperatureValues :

             beta = 1.0/temperature

             # Methode classique de la physique statistique
             # -----

             densityOperator = expm(-beta*H)

             fonctionPartition = np.matrix.trace(densityOperator)
             occupationClassique[ii] = ...
```

```
...np.matrix.trace(np.dot(densityOperator,observable))
occupationClassique[ii] /= fonctionPartition

ii+= 1
```

Les résultats sont finalement affichés :

```
In [5] : plt.figure()
         ax = plt.subplot(111)

         plt.plot(TemperatureValues,occupationClassique[...]....
         ..., "-b*", label = "<$n_1$> : Phys. Stat. ")

         plt.xlabel( "Temperature", fontsize = 20 )
         plt.ylabel( "<$n_i$>", fontsize = 20, rotation = 0 )
         plt.title( "Occupation du site" )

         ax.legend()

         plt.show()
         plt.close()
```

Annexe C

Application des fonctions de Green de Matsubara

Dans cette section, nous allons appliquer les fonctions de Green de Matsubara pour connaître l'occupation d'un site en fonction de la température. L'occupation d'un état quantique peut être écrite à l'aide de la fonction de Green de Matsubara [11] comme

$$\langle c_v^\dagger c_v \rangle = \mathcal{G}(v, \tau = 0^+) \quad (\text{C.1})$$

En terme de séries de Fourier, cela peut s'écrire comme

$$\langle c_v^\dagger c_v \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \mathcal{G}(v, ik_n) e^{-i\omega_n 0^-} . \quad (\text{C.2})$$

Ce type de somme qui a la forme $S(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} g(ik_n) e^{ik_n \tau}$ est appelé somme de Matsubara. Elles peuvent être effectuées en utilisant le calcul de résidus pour obtenir une expression exacte. Dans le cas présent, nous avons que $g(ik_n) = \mathcal{G}(v, ik_n)$ et $\tau = 0^+$. Dans l'Éq. C.2, la somme devient

$$\langle c_v^\dagger c_v \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) A(v, \omega) . \quad (\text{C.3})$$

Malheureusement, les fonctions de Green se comportent en $\propto \frac{1}{ik_n}$. Les sommes convergent donc uniquement avec le facteur $e^{-i\omega_n 0^-}$ et très lentement. Numériquement, il est alors avantageux d'utiliser la forme [42]

$$\langle c_v^\dagger c_v \rangle = \frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \sum_{i\omega_n > 0} \text{Re} [\mathcal{G}(v, i\omega_n)] \quad (\text{C.4})$$

où la somme est $\propto \frac{1}{(ik_n)^2}$. La série sera alors convergente. Puisque nous nous intéressons à l'occupation des sites, nous aurons que $v \in 1, 2$. Cela nous permet d'obtenir l'évolution de l'occupation des sites en fonctions de la température telle qu'illustrée à la Fig. C.1.

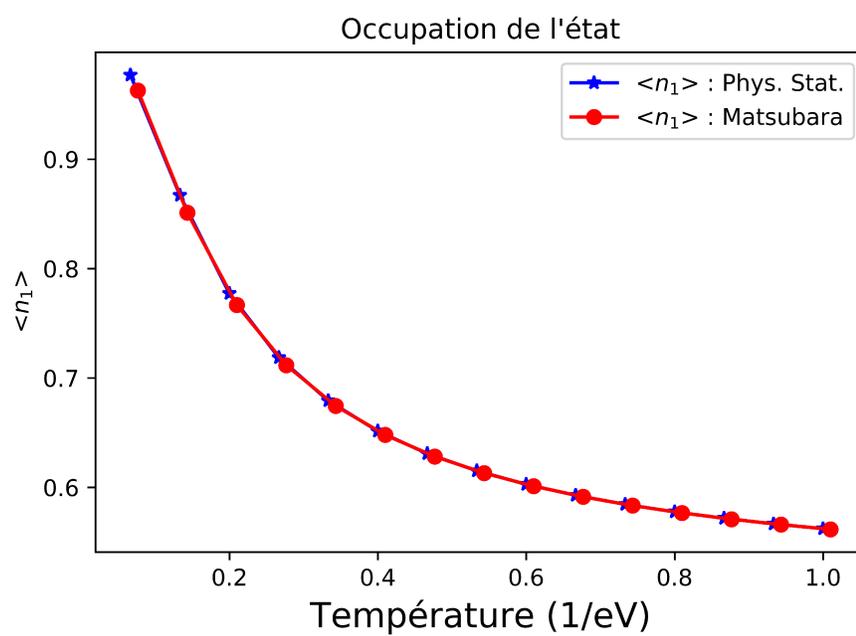


FIGURE C.1 Évolution de l'occupation du site en fonctions de la température selon l'Éq. B.1 et C.4 avec $E_1 = 0.25$ eV.. Remarquons que l'occupation tend vers 0.5 lorsque la température tend vers l'infini tel qu'attendu.

Code python

Ce notebook sert à calculer l'occupation moyenne d'un site en fonction de la température. La méthode utilisée est celle des fonctions de Green de Matsubara.

L'entête de la majorité des codes est composée de l'importation des bibliothèques nécessaires pour son exécution. Pour exécuter l'ensemble du notebook, l'utilisateur peut cliquer sur `kernel→restart and run all`. Pour exécuter les cellules une à une, l'utilisateur peut utiliser la commande du clavier `shift+enter` après avoir sélectionné la cellule à exécuter.

```
In [1] : import numpy as np
        from scipy.linalg import expm, sinm, cosm
        import matplotlib.pyplot as plt
```

La deuxième partie contient les déclarations. Nous allons attribuer des valeurs numériques aux paramètres de l'hamiltonien. Ceux-ci peuvent être changés par l'utilisateur pour observer leur impact. On retrouve également des "arrays" de la bibliothèque numpy qui sont une structure de données de type matrice.

```
In [2] : E1 = -0.25
        mu = 0

        H = np.array([[E1 - mu, 0], [0, 0]])
```

```
In [3] : number_of_omega = 1000
        number_of_T = 100
        T_max = 1.0

        TemperatureValues = np.array([...
        ... (i+1)*T_max/(number_of_T+0.0) for i in range(number_of_T)])
        occupation = np.zeros([number_of_T])
```

Dans la section suivante, nous calculons l'occupation des sites selon la méthode des fonctions de Green de Matsubara.

```
In [4] : ii= 0

        for temperature in TemperatureValues :
```

```

beta = 1.0/temperature

# Methode Fonctions de Green de Matsubara
# -----

OmegaValues = np.array([...
...(2*i + 1)*(np.pi/(beta+0.0))...
... for i in range(number_of_omega)])

GreenFunction = np.zeros([number_of_omega,2,2]...
..., dtype = "complex128")

jj= 0
for omega in OmegaValues :
GreenFunction[jj] = ...
...np.linalg.inv( (1j*omega)*np.identity(2) - H )
jj+= 1

occupation[ii] = 0.5
occupation[ii] += ...
...(2.0/beta)*np.sum(GreenFunction[...],0,0).real )

ii+= 1

```

Les résultats sont finalement affichés :

```

In [5] : plt.figure()
ax = plt.subplot(111)

plt.plot(TemperatureValues,occupation[...], "-ro"...
...,label = "<$n_1$> : Matsubara ")

plt.xlabel( "Temperature", fontsize = 20 )
plt.ylabel( "<$n_i$>", fontsize = 20, rotation = 0 )
plt.title( "Occupation des sites" )

ax.legend()

plt.show()
plt.close()

```

Annexe D

Démonstration et applications des équations du mouvement

Cette section est adaptée des sections 9.1 et 9.2 de [11]. Nous allons donc commencer par calculer l'équation du mouvement pour la fonction de Green retardée $G^R(\nu, \nu'; t) \equiv -i\theta(t) \langle [a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0)]_\zeta \rangle$ (Éq. 2.64 dans le texte). Nous pourrions ensuite utiliser cette équation du mouvement pour trouver la fonction de Green du modèle à deux orbitales (Section D.1.1) et du modèle de Anderson en champ moyen (Section D.1.2). Nous débutons en effectuant la dérivée partielle par rapport au temps pour obtenir

$$i\partial_t G^R(\nu, \nu'; t) \equiv i\partial_t \left[-i\theta(t) \langle [a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0)]_\zeta \rangle \right] \quad (\text{D.1})$$

$$= \left[(-i) (i\partial_t \theta(t)) \langle [a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0)]_\zeta \rangle \right] + \left[(-i)\theta(t) \langle [i\partial_t a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0)]_\zeta \rangle \right] \quad (\text{D.2})$$

$$= \delta(t)\delta_{\nu\nu'} + (-i)\theta(t) \langle [i\partial_t a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0)]_\zeta \rangle \quad (\text{D.3})$$

où entre la deuxième et la troisième ligne nous avons utilisé le fait que la dérivée de la fonction de Heaviside est une fonction delta de Dirac, que la relation de commutation est $[a_\nu(t), a_{\nu'}^\dagger(0)]_\zeta = \delta(t)\delta_{\nu\nu'}$ et que l'opérateur $a^\dagger(0)$ est indépendant du temps $\partial_t a^\dagger(0) = 0$. Dans le formalisme d'Heisenberg, les opérateurs varient dans le temps. La dérivée partielle par rapport au temps est alors exprimée comme

$$i\partial_t a_\nu = -[H, a_\nu](t) \quad (\text{D.4})$$

pour obtenir l'équation du mouvement

$$i\partial_t G^R(v, v'; t) = \delta(t)\delta_{vv'} + i\theta(t) \left\langle \left[[H, a_v](t), a_{v'}^\dagger(0) \right]_{\zeta} \right\rangle \quad (\text{D.5})$$

L'équation du mouvement n'est pas très utile sous sa forme actuelle pour résoudre le modèle à deux orbitales ou des hamiltoniens possédant une forme similaire. Nous allons donc premièrement supposer que l'hamiltonien est quadratique. Il peut donc s'écrire sous la forme

$$H_0 = \sum_{v', v''} t_{v', v''} a_{v'}^\dagger a_{v''} . \quad (\text{D.6})$$

Le commutateur H_0 peut être obtenu ainsi

$$- [H_0, a_v] = - \left[\sum_{v', v''} t_{v', v''} a_{v'}^\dagger a_{v''} , a_v \right] \quad (\text{D.7})$$

$$= - \sum_{v', v''} t_{v', v''} \left(a_{v'}^\dagger [a_{v''} , a_v]_{-1} - [a_{v'}^\dagger , a_v]_{-1} a_{v''} \right) \quad (\text{D.8})$$

$$= - \sum_{v', v''} t_{v', v''} \left(a_{v'}^\dagger 0 - \delta_{v, v'} a_{v''} \right) \quad (\text{D.9})$$

$$= \sum_{v''} t_{vv''} a_{v''} \quad (\text{D.10})$$

où nous avons utilisé les relations $[a_v, a_{v'}^\dagger]_{-1} = \delta_{vv'}$ (Éq. 2.10) et $[a_v, a_{v'}]_{-1} = [a_v^\dagger, a_{v'}^\dagger]_{-1} = 0$ (Éq. 2.11). Puisque la fonction de Green dépend uniquement de la différence de temps, le passage par transformée de Fourier aux fréquences peut être effectué à l'aide du théorème de convolution. Nous effectuons alors la transformée de Fourier

$$G^R(v, v'; t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i(\omega+i\eta)t} G^R(v, v'; \omega) . \quad (\text{D.11})$$

Cette dernière définition permet de remplacer $i\partial_t G^R(v, v'; t)$ par $(\omega + i\eta)G^R(v, v'; \omega)$. L'Éq. D.6 et la définition d'une fonction de Green $G^R(v, v'; t) \equiv -i\theta(t) \left\langle [a_v(t), a_{v'}^\dagger(0)]_{\zeta} \right\rangle$ permettent d'écrire le dernier terme comme $\sum_{v''} t_{vv''} G^R(v'', v'; \omega)$. Nous aurons finalement que la transformée de Fourier d'une fonction $\delta(t)$ est 1. Combinant ces résultats, nous obtenons que l'équation du mouvement devient

$$\sum_{v''} [\delta_{vv''}(\omega + i\eta) - t_{vv''}] G^R(v'', v'; \omega) = \delta_{vv'} . \quad (\text{D.12})$$

Cette forme est le résultat désiré pour résoudre le modèle à deux orbitales. Cette équation doit être

corrigée si nous avons un hamiltonien qui n'est pas quadratique. Nous allons maintenant pouvoir appliquer l'équation du mouvement obtenue pour des modèles avec des hamiltoniens quadratiques.

Applications

Modèle à deux orbitales

Nous allons maintenant utiliser l'équation du mouvement pour trouver la fonction de Green $G^R(1, 1, \omega)$. En considérant les états $\nu = \nu' = 1$ dans l'Éq. 2.66, nous obtenons

$$\sum_{\nu''} [\delta_{1\nu''}(\omega + i\eta) - t_{1\nu''}] G^R(\nu'' 1; \omega) = \delta_{11} \quad (\text{D.13})$$

L'hamiltonien en seconde quantification pour le modèle à deux orbitales est

$$H = E_1 a_1^\dagger a_1 + E_2 a_2^\dagger a_2 - t a_2^\dagger a_1 - t a_1^\dagger a_2 \quad (\text{D.14})$$

et donc $H = H_0$ puisque nous avons uniquement des termes quadratiques. L'équation du mouvement nous donnera donc

$$(\omega + i\eta - E_1) G^R(1, 1; \omega) = 1 - t G^R(2, 1; \omega). \quad (\text{D.15})$$

Nous pouvons constater à ce moment que si le site est isolé $t = 0$, alors nous aurons que $G^R(2, 1; \omega) = 0$. Cela donnera alors que $G^R(1, 1; \omega) = [\omega + i\eta - E_1]^{-1}$. Cela est le résultat (Éq. 2.30) obtenu dans le cas d'un site isolé. Nous avons présentement deux inconnus ($G^R(1, 1; \omega)$ et $G^R(2, 1; \omega)$) et une seule équation. Nous allons donc choisir ν et ν' dans l'équation du mouvement pour obtenir ces fonctions de Green. En utilisant l'Éq. D.12 et en posant $\nu = 2, \nu' = 1$, nous obtenons l'équation

$$t G^R(1, 1; \omega) + [(\omega + i\eta) - E_2] G^R(2, 1; \omega) = 0. \quad (\text{D.16})$$

On peut alors combiner ces deux résultats pour obtenir

$$G^R(1, 1; \omega) = \left[\omega + i\eta - E_1 - \frac{t^2}{\omega + i\eta - E_2} \right]^{-1} \quad (\text{D.17})$$

qui est le même résultat obtenu à l'Éq. 2.44 où nous avons procédé par une inversion de matrice. Nous avons donc pu obtenir les mêmes fonctions de Green que dans la section précédente, mais cette fois-ci en utilisant le formalisme de la seconde quantification plutôt que la représentation en opérateur de celle-ci. La fonction de Green de la seconde orbitale

$$G^R(2,2;\omega) = \left[\omega + i\eta - E_2 - \frac{t^2}{\omega + i\eta - E_1} \right]^{-1} \quad (\text{D.18})$$

est obtenue de manière similaire. Celle-ci peut également être déduite en remarquant que le choix de nommer les sites 1 et 2 est arbitraire.

Modèle de Anderson en champ moyen

Nous verrons comment solutionner le modèle de Anderson en prenant l'approximation du champ moyen et en couplant l'impureté à une seul site au niveau de Fermi. Ce système est décrit par

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_F n_{F,\sigma} + \sum_{\sigma} \left(t c_{F,\sigma}^{\dagger} c_{I,\sigma} + t c_{I,\sigma}^{\dagger} c_{F,\sigma} \right) + U n_{I,\uparrow} n_{I,\downarrow} + \sum_{\sigma} \epsilon_I n_{I,\sigma} \quad (\text{D.19})$$

qui est qualitativement le même que précédemment, mais avec le minimum d'états possibles. Nous avons également pris $t = t^*$. Si nous voulions appliquer l'équation du mouvement avec cet hamiltonien pour trouver la fonction de Green du système, le terme $U n_{I,\uparrow} n_{I,\downarrow}$ générerait une succession d'équations ne pouvant être fermée, d'où l'utilisation de sa forme en champ moyen

$$H_{MF} = \sum_{k\sigma} \epsilon_F n_{F,\sigma} + \sum_{\sigma} \left(t c_{F,\sigma}^{\dagger} c_{I,\sigma} + t c_{I,\sigma}^{\dagger} c_{F,\sigma} \right) + U \langle n_I \rangle n_{I,\downarrow} + U n_{I,\uparrow} \langle n_I \rangle + \sum_{\sigma} \epsilon_I n_{I,\sigma}. \quad (\text{D.20})$$

Nous ne voulons pas briser la symétrie du système donc nous posons que $\langle n_{I,\uparrow} \rangle = \langle n_{I,\downarrow} \rangle = \langle n_I \rangle$. Rappelons l'équation du mouvement

$$\sum_{v''} [\delta_{vv''}(\omega + i\eta) - t_{vv''}] G^R(v''v';\omega) = \delta_{vv'} \quad (\text{D.21})$$

Les quatre états possibles à une particule seront indexés comme $(I, \uparrow) = 1$, $(I, \downarrow) = 2$, $(R, \uparrow) = 3$ et $(F, \downarrow) = 4$. En prenant $v = v' = 1$, nous obtenons

$$[(\omega + i\eta) - \epsilon_I - U \langle n \rangle] G^R(1,1;\omega) - t G^R(3,1;\omega) = 1 \quad (\text{D.22})$$

tandis qu'en prenant $v = 3$ et $v' = 1$ nous obtenons

$$- t G^R(1,1;\omega) + [(\omega + i\eta) - \epsilon_R] G^R(3,1;\omega) = 0. \quad (\text{D.23})$$

La combinaison de ces résultats nous permet d'obtenir

$$G^R(1, 1; \omega) = \left[\omega + i\eta - \epsilon_I - \frac{t^2}{\omega + i\eta - \epsilon_R} - U \langle n \rangle \right]^{-1} \quad (\text{D.24})$$

$$= [\omega + i\eta - \epsilon_I - \Gamma - \Sigma]^{-1} \quad (\text{D.25})$$

où $\Gamma \equiv \frac{t^2}{\omega + i\eta - \epsilon_R}$ est la fonction d'hybridation et $\Sigma \equiv U \langle n \rangle$ est la self-energie. Nous retrouvons le terme d'hybridation du cas à deux orbitales. Toutefois, nous avons maintenant une self-energie qui apporte les corrections dues aux interactions.

Annexe E

Application de la formule de Kubo : fonction de corrélation densité-densité

Dans cette Annexe, nous appliquerons la formule de Kubo à la fonction de corrélation densité-densité. Cette réponse est liée à la dissipation d'un système due à un champ extérieur. Elle est également importante pour étudier l'écrantage dû aux autres électrons dans le système. Nous négligerons la somme sur les spins afin d'alléger la notation. Cette Annexe permettra de voir les étapes principales dans le calcul d'une fonction de réponse. La première sera d'effectuer la transformée de Fourier sur les coordonnées spatiales pour travailler dans l'espace des vecteurs d'ondes. Ensuite, nous passerons au formalisme de Matsubara pour le reste du calcul. Par la suite, nous appliquerons le théorème de Wick. La transformée de Fourier sera alors effectuée sur la coordonnée temporelle pour passer à l'espace des fréquences. La somme de Matsubara sera évaluée pour le cas sans interaction.

Formule de Kubo particulière

Commençons donc par le commencement et rappelons la formule de Kubo (Éq. 3.23) qui était

$$\delta \langle A(t) \rangle = -i \int_{t_0}^{\infty} dt' \Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 . \quad (\text{E.1})$$

Nous voulons évaluer la réponse de la fonction densité due à la perturbation donnée par

$$H' = \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') [-e\phi_{ext}(\mathbf{r}', t')] . \quad (\text{E.2})$$

En comparant avec l'équation précédente, nous notons que puisque nous nous intéressons à l'observable ρ alors $A \rightarrow \rho(\mathbf{r})$. Nous obtenons donc que

$$\delta \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = -i \int_{t_0}^{\infty} dt' \Theta(t - t') \langle [\rho(\mathbf{r}, t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 . \quad (\text{E.3})$$

En substituant la perturbation, la réponse peut être écrite

$$\delta \langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = -i \int_{t_0}^{\infty} \int_{\mathbf{r}'} dt' \Theta(t - t') \langle [\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t')] \rangle_0 [-e\phi_{ext}(\mathbf{r}', t')] \quad (\text{E.4})$$

$$\equiv \int_{t_0}^{\infty} \int_{\mathbf{r}'} dt' \chi^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') [-e\phi_{ext}(\mathbf{r}', t')] \quad (\text{E.5})$$

où $\chi^R(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') \equiv C_{\rho\rho}^R(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') \equiv -i\Theta(t - t') \langle [\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t')] \rangle_0$ est la fonction de corrélation densité-densité. C'est cette fonction que nous allons évaluer dans le reste de cette section. La fonction scalaire $\phi_{ext}(t')$ correspond à $f(t')$ dans notre formule de Kubo.

Transformée de Fourier des coordonnées spatiales

Nous allons considérer le cas invariant sous translation. Nous allons donc pouvoir effectuer la transformée de Fourier des coordonnées d'espace. Tout d'abord, puisque nous supposons une invariance sous translation, nous avons que la fonction de réponse dépend uniquement de la distance entre deux points. Cela est noté $\chi^R(\mathbf{r}t; \mathbf{r}'t') = \chi^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t, t')$. Puisque nous effectuons la moyenne à l'équilibre, nous avons également que la réponse dépend uniquement de la différence de temps et donc $\chi^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t, t') = \chi^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$. La transformée de Fourier des coordonnées spatiales est donnée par

$$\chi^R(\mathbf{q}, t - t') = \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (\text{E.6})$$

$$\equiv -i \int d\mathbf{r} \Theta(t - t') \langle [\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t')] \rangle_0 e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} . \quad (\text{E.7})$$

La représentation en vecteur d'onde de l'opérateur densité est donnée par $\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}_1} \rho(\mathbf{q}_1, t) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}}$. L'équation précédente peut donc être réécrite comme

$$\chi^R(\mathbf{q}, t - t') = -i \int d\mathbf{r} \Theta(t - t') \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \langle [\rho(\mathbf{q}_1, t), \rho(\mathbf{q}_2, t')] \rangle_0 e^{i(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} e^{i(\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'} \quad (\text{E.8})$$

$$(\text{E.9})$$

En effectuant l'intégrale sur \mathbf{r} et divisant par le volume, nous obtenons une fonction delta de Kronecker $\delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}}$. Cela nous permet d'effectuer la somme sur \mathbf{q}_1 et d'obtenir

$$\chi^R(\mathbf{q}, t - t') = -i\Theta(t - t') \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}_2} \langle [\rho(\mathbf{q}, t), \rho(\mathbf{q}_2, t')] \rangle_0 e^{i(\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}'} . \quad (\text{E.10})$$

Nous pouvons maintenant effectuer une intégrale sur \mathbf{r}' de part et d'autre et diviser par le volume. Puisque le terme de gauche est indépendant de \mathbf{r}' , il ne sera pas affecté. On obtiendra au terme droit de l'égalité un delta de Kronecker $\delta_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}, 0}$. En effectuant la somme sur \mathbf{q}_2 , nous obtenons alors

$$\boxed{\chi^R(\mathbf{q}, t - t') = -i\Theta(t - t') \frac{1}{V} \langle [\rho(\mathbf{q}, t), \rho(-\mathbf{q}, t')] \rangle_0} \quad (\text{E.11})$$

Passage en temps imaginaire

Nous avons donc effectué la transformée de Fourier des coordonnées spatiales de la fonction de réponse densité-densité. Ce type de calcul est si commun qu'il a été détaillé le plus possible dans cette section. Nous aimerions exprimer la fonction de réponse (Éq. E.11) à l'aide d'opérateurs de création et destruction. Le théorème de Wick pourrait alors être utilisé pour évaluer la fonction de réponse à quatre points à l'aide de fonctions de Green. Toutefois, cela nous forcerait à évaluer le commutateur de l'Éq. E.11. Pour simplifier le calcul, nous allons convertir notre expression en temps imaginaire. Cela nous permettra d'utiliser le théorème de Wick sans avoir à évaluer le commutateur. Ce dernier avec la fonction de Heaviside sera remplacé par l'opérateur d'ordre temporel. Pour ce faire, nous allons rappeler le lien existant entre les deux formalismes et introduire une classe de fonctions plus générales que les fonctions de Green qui inclue celles-ci et les fonction de corrélations.

Nous avons vu que les fonctions de Green en fréquences de Matsubara peuvent être converties en fréquences réelles en effectuant le prolongement analytique. Cela correspond analytiquement à faire la substitution $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$. Cela se traduit en coordonnée temporelle par le remplacement de t par τ dans les opérateurs de création et destruction. Nous avons également que la fonction de Heaviside qui assurait la causalité est remplacée par l'opérateur d'ordre temporel. Il est également possible d'effectuer le même type de transformation avec une classe de fonctions plus générale qui inclue les fonctions de Green. En effet, pour deux opérateurs A et B , nous avons qu'une fonction de corrélation retardée est définie comme

$$C_{AB}^R(t, t') \equiv -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_{\zeta} . \quad (\text{E.12})$$

Son équivalent en temps imaginaire est alors ¹

$$C_{AB}(\tau, \tau') \equiv - \langle T_\tau A(\tau) B(\tau') \rangle . \quad (\text{E.13})$$

En tenant compte de cette correspondance, nous obtenons alors que la fonction de corrélation densité-densité peut être écrite comme

$$\chi(\mathbf{q}, \tau) = - \frac{1}{V} \langle T_\tau \rho(\mathbf{q}, \tau) \rho(-\mathbf{q}, 0) \rangle \quad (\text{E.14})$$

où nous avons pris $\tau' = 0$.

Application du théorème de Wick

Nous voulons maintenant exprimer les opérateurs densité en terme d'opérateurs de création et destruction afin d'utiliser le théorème de Wick. On peut montrer que l'opérateur densité pour un vecteur d'onde \mathbf{q} est donné par [11]

$$\rho(\mathbf{q}, \tau) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) . \quad (\text{E.15})$$

Nous pouvons alors remplacer les opérateurs densité dans l'Éq. E.14 pour obtenir

$$\chi(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle \quad (\text{E.16})$$

Nous en sommes donc rendus à utiliser le théorème de Wick. Le théorème de Wick affirme que si l'hamiltonien est quadratique alors

$$\langle A_1 A_2 \dots A_{n-1} A_n \rangle = \sum_{\text{pair}} \zeta^{\mathcal{P}} \langle A_{i_1} A_{i_2} \rangle \dots \langle A_{i_{n-1}} A_{i_n} \rangle \quad (\text{E.17})$$

où \mathcal{P} est le nombre de permutations de l'ordre initiale et la somme est effectuée sur l'ensemble des paires possibles. Dans le cas qui nous intéresse, nous avons que

1. Remarquons que la convention de signe est choisie afin d'être le même pour les fonctions de Green lors du passage en temps imaginaire. Il est choisi afin de suivre la notation de BRUUS et FLENSBERG [11] qui également utilisée dans [42] qui est plus détaillé. Toutefois, ce choix diffère de celui de TREMBLAY [71] où le signe négatif est plutôt positif. Cela affectera le signe des fréquences dans la représentation spectrale et dans la représentation de Lehmann pour les fonctions de réponse mais n'affectera pas les fonctions de Green.

$$\begin{aligned}
\langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle &= \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle \\
&\quad - \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle \\
&\quad + \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \rangle \\
&\quad - \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \rangle .
\end{aligned} \tag{E.18}$$

Dans l'état normal, les moyennes de paires sont nulles $\langle c^\dagger c^\dagger \rangle = \langle cc \rangle = 0$. Le terme évalué devient alors

$$\begin{aligned}
\langle \dots \rangle &= \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle \\
&\quad - \langle T_\tau c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) \rangle \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \rangle
\end{aligned} \tag{E.19}$$

$$\begin{aligned}
&\equiv \langle \rho(\mathbf{q}, \tau) \rangle \langle \rho(-\mathbf{q}, 0) \rangle \\
&\quad - (-1) \langle T_\tau c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}(0) c_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \rangle (-1) \langle T_\tau c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \rangle
\end{aligned} \tag{E.20}$$

$$\equiv \langle \rho(\mathbf{q}, \tau) \rangle \langle \rho(-\mathbf{q}, 0) \rangle - \mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}' - \mathbf{q}; -\tau) \mathcal{G}_0(\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}; \tau) \tag{E.21}$$

où nous avons noté avec un indice 0 les fonctions de Green sans interaction. Rappelons la définition d'une fonction de Green en temps imaginaire comme étant $\mathcal{G}(v, v'; \tau) \equiv -\langle T_\tau c_v(\tau) c_{v'}^\dagger(0) \rangle$. Puisque $\mathcal{G}_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \tau) \propto \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$, il sera possible de simplifier une des sommes. Si nous considérons $\mathbf{q} \neq 0$, nous avons que $\langle \rho(\mathbf{q}, \tau) \rangle = 0$. Cela revient à dire que la densité est uniforme. Nous pouvons maintenant effectuer la somme sur \mathbf{k}' pour obtenir

$$\boxed{\chi(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}; -\tau) \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}; \tau)} . \tag{E.22}$$

Transformée de Fourier de la coordonnée temporelle

Nous allons maintenant effectuer la transformée de Fourier pour obtenir l'expression en fréquences. Rappelons qu'ici, τ représentait une différence de temps. Pour ce faire, il sera nécessaire d'utiliser la méthode de la preuve du théorème de convolution. Ce dernier permet de faire la transformée de Fourier d'un produit de fonctions.

Effectuons alors la transformée de Fourier de fonction de réponse

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau} \chi(\mathbf{q}, \tau) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}; -\tau) \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}; \tau) . \quad (\text{E.23})$$

Nous pouvons alors écrire les fonctions de Green en fréquences de Matsubara

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau} \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ik'_n} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}; ik'_n) e^{-ik'_n\tau} \right) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}; ik_n) e^{-ik_n\tau} \right) . \quad (\text{E.24})$$

En effectuant l'intégrale sur τ , nous obtenons un delta de Kronecker

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \beta \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ik'_n} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}; ik'_n) \right) \left(\frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}; ik_n) \right) \delta_{iq_n + ik'_n - ik_n, 0} \quad (\text{E.25})$$

qui nous permet d'effectuer la somme sur ik_n

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{ik'_n} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}; ik'_n) \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}; ik'_n + iq_n) . \quad (\text{E.26})$$

On obtient alors le résultat désiré

$$\boxed{\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_0(\mathbf{k}; ik_n) \mathcal{G}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}; ik_n + iq_n)} . \quad (\text{E.27})$$

Somme de Matsubara

Dans le cas sans interaction, la base des vecteurs d'ondes donne un hamiltonien diagonal et donc

$$\mathcal{G}_0(\mathbf{k}; ik_n) = \frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (\text{E.28})$$

Nous obtenons alors

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{ik_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \left(\frac{1}{ik_n + iq_n - \epsilon_{\mathbf{k} + \mathbf{q}}} \right) . \quad (\text{E.29})$$

Cela correspond à une somme de Matsubara. Nous allons la calculer en utilisant la formule pour une somme de Matsubara qui est

$$S(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} g(ik_n) e^{ik_n\tau} = \sum_j \text{Res}_{z=z_j} [g(z)] n_\zeta(z_j) e^{z_j\tau} . \quad (\text{E.30})$$

où z_j sont les pôles de la fonction $g(z)$. Nous avons dans le cas actuel que

$$g(z) = \left(\frac{1}{z - z_1} \right) \left(\frac{1}{z - z_2} \right) \quad (\text{E.31})$$

où $z_1 = \epsilon_{\mathbf{k}}$ et $z_2 = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - iq_n$. Le résidu d'une fonction $g(z)$ à un pôle simple z_1 est

$$\text{Res}_{z=z_1} [g(z)] = \lim_{z \rightarrow z_1} (z - z_1) g(z) . \quad (\text{E.32})$$

En remplaçant $g(z)$ par sa valeur dans notre cas particulier, nous obtenons

$$\text{Res}_{z=z_1} [g(z)] = \lim_{z \rightarrow z_1} (z - z_1) \left(\frac{1}{z - z_1} \right) \left(\frac{1}{z - z_2} \right) \quad (\text{E.33})$$

$$= \left(\frac{1}{z_1 - z_2} \right) \quad (\text{E.34})$$

$$\equiv \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + iq_n} \right) . \quad (\text{E.35})$$

De manière similaire nous obtenons que

$$\text{Res}_{z=z_2} [g(z)] = - \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + iq_n} \right) . \quad (\text{E.36})$$

Nous pouvons alors effectuer une somme de Matsubara avec les pôles à $z_1 = \epsilon_{\mathbf{k}}$ et $z_2 = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - iq_n$. Cela nous permet d'obtenir que

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\epsilon_{\mathbf{k}}) - n_F(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{iq_n + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \quad (\text{E.37})$$

où nous avons utilisé le fait que

$$n_F(\epsilon - iq_n) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} e^{-\beta iq_n} + 1} = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} + 1} \quad (\text{E.38})$$

puisque $iq_n = 2n\pi/\beta$.

Résumé

Dans cette Annexe, nous avons calculé notre première fonction de corrélation. Ce calcul nous a permis d'illustrer plusieurs concepts importants dans le type de démonstration. En effet, nous avons vu comment utiliser le passage du temps réel au temps imaginaire pour utiliser l'ordre temporel plutôt que des commutateurs. Nous avons ensuite pu utiliser le théorème de Wick pour réduire notre opérateur à quatre points à des fonctions de Green à deux points. Finalement, nous avons effectué une somme de Matsubara en utilisant le calcul des résidus. Ces outils analytiques sont essentiels pour le calcul de fonction de réponse et vont revenir souvent lors de l'application de la réponse linéaire.

Annexe F

Réponse paramagnétique inter-plan pour la rigidité superfluide

Le point de départ de ce complément est l'équation (Éq. 3.33 dans le texte)

$$J_z^p(t) = \sum_{j,k_x,k_y,\sigma} ie\delta_z t_{\perp}(k_x, k_y) \left(c_{j+1k_xk_y\sigma}^{\dagger} c_{jk_xk_y\sigma} - c_{jk_xk_y\sigma}^{\dagger} c_{j+1k_xk_y\sigma} \right) \quad (\text{F.1})$$

pour finalement obtenir le résultat (Éq.3.38 dans le texte)

$$\chi_z^p = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x,k_y} t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \text{Tr} \left[\overline{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \overline{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \right] . \quad (\text{F.2})$$

Changement de base

Nous savons que les opérateurs de création et de destruction peuvent être écrits dans le cas unidimensionnel dans la base des vecteurs d'ondes comme

$$c_{j,k_x,k_y}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_z}} \sum_{k_z} e^{ik_z \delta_z j} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (\text{F.3})$$

$$c_{j,k_x,k_y} = \frac{1}{\sqrt{N_z}} \sum_{k_z} e^{-ik_z \delta_z j} c_{\mathbf{k}} \quad (\text{F.4})$$

où $k = k_\perp$ dans le cas que l'on considère. Nous avons alors que

$$i\delta_z \sum_j c_{j+1, k_x, k_y, \sigma}^\dagger c_{j, k_x, k_y, \sigma} = i\delta_z \sum_j \left[\frac{1}{\sqrt{N_z}} \sum_{k_z} e^{ik_z \delta_z (j+1)} c_{k_z, k_x, k_y}^\dagger \right] \left[\frac{1}{\sqrt{N_z}} \sum_{k'_z} e^{-ik'_z \delta_z j} c_{k'_z, k_x, k_y} \right] \quad (\text{F.5})$$

$$= i\delta_z \sum_{k_z, k'_z} \frac{1}{N_z} \sum_j e^{i(k_z - k'_z) j \delta_z} e^{ik_z \delta_z} c_{k_z, k_x, k_y}^\dagger c_{k'_z, k_x, k_y} \quad (\text{F.6})$$

$$= i\delta_z \sum_{k_z, k'_z} \delta_{k_z, k'_z} e^{ik_z \delta_z} c_{k_z, k_x, k_y}^\dagger c_{k_z, k_x, k_y} \quad (\text{F.7})$$

$$= i\delta_z \sum_{k_z} e^{ik_z \delta_z} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (\text{F.8})$$

$$= \sum_{k_z} \frac{\partial e^{ik_z \delta_z}}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} . \quad (\text{F.9})$$

De manière similaire, nous obtenons

$$-i\delta_z \sum_j c_{j, k_x, k_y, \sigma}^\dagger c_{j+1, k_x, k_y, \sigma} = \sum_{k_z} \frac{\partial e^{-ik_z \delta_z}}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} . \quad (\text{F.10})$$

En substituant ces résultats dans l'Éq. F.1, l'opérateur courant paramagnétique s'exprime comme

$$J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} et_\perp(k_x, k_y) \left[\frac{\partial e^{ik_z \delta_z}}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{\partial e^{-ik_z \delta_z}}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \right] \quad (\text{F.11})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} et_\perp(k_x, k_y) \frac{\partial (2 \cos \delta_z k_z)}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} . \quad (\text{F.12})$$

Nous obtenons ainsi la forme compacte

$$\boxed{J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} e \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}} , \quad (\text{F.13})$$

où $\epsilon_{k_z} \equiv 2t_\perp(k_x, k_y) \cos(\delta_z k_z)$ et la charge e peut être négative.

Spineurs de Nambu

Nous allons maintenant exprimer l'opérateur courant à l'aide des spineurs de Nambu. Ceux-ci sont définis par

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \equiv \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \ c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \text{ et} \quad (\text{F.14})$$

$$\Psi_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{F.15})$$

En explicitant la somme sur les spins, nous obtenons

$$J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{F.16})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \right). \quad (\text{F.17})$$

Nous utilisons le fait que la somme sur \mathbf{k} est infinie et symétrique pour obtenir

$$J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}'} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} \quad (\text{F.18})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad (\text{F.19})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right). \quad (\text{F.20})$$

Nous utilisons maintenant la relation d'anticommuation des fermions

$$J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + 1 \right) \quad (\text{F.21})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) + \sum_{k_x, k_y} \sum_{k_z} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \quad (\text{F.22})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \quad (\text{F.23})$$

où nous avons que $\sum_{k_z} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} = 0$ puisque $\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \propto \sin \delta_z k_z$. Nous sommes alors une fonction avec le même poids positif et négatif sur la période. L'application de la définition des spineurs de Nambu nous permet d'obtenir

$$J_z^p(t) = \sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (\text{F.24})$$

Réponse paramagnétique

Rappelons que la formule de Kubo particulière

$$\delta \langle A(t) \rangle = \int dt' C_{AA}^R(t-t') f(t') \quad (\text{F.25})$$

permet de relier la moyenne d'une observable avec sa fonction de corrélation. Dans notre cas, nous avons que $A = J_z^p(\omega)$ et $f(\omega) = \mathbf{A}(\omega)$. Nous allons alors nous intéresser à la fonction de corrélation courant-courant. Nous cherchons donc à évaluer la fonction courant-courant paramagnétique. En utilisant le formalisme de Matsubara, celle-ci se note

$$C_{J_z^p J_z^p}(\tau) = -\frac{1}{V} \langle T_\tau J_z^p(\tau) J_z^p(0) \rangle \quad (\text{F.26})$$

où $V = N_{xy} N_z \delta_z$ est le volume puisque le paramètre de maille dans le plan xy est $a = 1$.

Nous allons maintenant faire le remplacement avec le résultat de l'Éq. F.13.

$$C_{J_z^p J_z^p}(\tau) = -\frac{1}{V} \left\langle T_\tau \left[-\sum_{\mathbf{k}} e^{\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z}} [\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}}(\tau)] \right] \left[-\sum_{\mathbf{k}'} e^{\frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k'_z}} [\Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \Psi_{\mathbf{k}'}(0)] \right] \right\rangle \quad (\text{F.27})$$

$$= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^2 \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k'_z} \langle T_\tau [\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}}(\tau)] [\Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \Psi_{\mathbf{k}'}(0)] \rangle. \quad (\text{F.28})$$

On explicite le produit scalaire des spineurs de Nambu

$$C_{J_z^p J_z^p}(\tau) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^2 \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k'_z} \langle T_\tau [\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}}(\tau)] [\Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \Psi_{\mathbf{k}'}(0)] \rangle \quad (\text{F.29})$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^2 \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k'_z} \sum_{\alpha, \beta} \langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}(\tau) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}^\dagger(0) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}(0) \rangle \quad (\text{F.30})$$

et applique le théorème de Wick

$$\begin{aligned} C_{J_z^p J_z^p}(\tau) &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^2 \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k'_z} \sum_{\alpha, \beta} \langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}(\tau) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}^\dagger(0) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^2 \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k'_z} \sum_{\alpha, \beta} \left(\langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}(\tau) \rangle \langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}', \beta}^\dagger(0) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}(0) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger(\tau) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}(0) \rangle \langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}(\tau) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}^\dagger(0) \rangle \right) \quad (\text{F.31}) \end{aligned}$$

Le premier terme est nul car proportionnel au produit de deux fois la moyenne de l'opérateur courant à l'équilibre. Ce dernier est pris comme étant égal à zéro. L'hamiltonien BCS est diagonal en \mathbf{k} . Cela signifie qu'ils couplent uniquement les termes avec le même \mathbf{k} . Il y a alors uniquement les termes où $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ qui sont non-nuls. En remplaçant l'ordre des opérateurs du second terme, on peut le réécrire, avec la définition des fonctions de Green de Nambu, comme

$$C_{J_z^p J_z^p}(\tau) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^2 \frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \frac{\partial \epsilon_{k'_z}}{\partial k_z} \sum_{\alpha, \beta} \left\langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}', \beta}(0) \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger(\tau) \right\rangle \left\langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}(\tau) \Psi_{\mathbf{k}', \beta}^\dagger(0) \right\rangle \quad (\text{F.32})$$

$$\equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^2 \left(\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \right)^2 \sum_{\alpha, \beta} \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau)_{\beta\alpha} \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, -\tau)_{\alpha\beta} \quad (\text{F.33})$$

$$\equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^2 \left(\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \right)^2 \text{Tr} \left[\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, -\tau) \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau) \right] \quad (\text{F.34})$$

où $\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau)_{\alpha\beta} \equiv \left\langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}, \alpha}(0) \Psi_{\mathbf{k}, \beta}^\dagger(\tau) \right\rangle$. Nous avons également utilisé la définition de la trace d'un produit de matrice $\text{Tr}[AB] = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ji}$. Nous pouvons alors effectuer la transformé de Fourier et utilisant le théorème de convolution inversé, nous obtenons

$$\boxed{C_{J_z^p J_z^p}(i\omega_n) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^2 \left(\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \right)^2 \frac{1}{\beta} \sum_n \text{Tr} \left[\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n + i\omega_n) \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right]}. \quad (\text{F.35})}$$

Cette dernière étape est plus détaillée dans l'Annexe E à partir de l'Éq. E.22. La fonction de corrélation courant-courant à fréquence nulle est alors

$$C_{J_z^p J_z^p}(i\omega_n = 0) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^2 \left(\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \right)^2 \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \text{Tr} \left[\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \right]. \quad (\text{F.36})$$

Le seul terme qui dépend de k_z est la relation de dispersion. Cette somme peut donc être effectuée à part.

$$\frac{1}{N_z \delta_z} \sum_{k_z} \left(\frac{\partial \epsilon_{k_z}}{\partial k_z} \right)^2 \equiv 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{N_z \delta_z} \sum_{k_z} \left(\frac{\partial \cos(\delta_z k_z)}{\partial k_z} \right)^2 \quad (\text{F.37})$$

$$= 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{N_z \delta_z} \sum_{k_z} \delta_z^2 \sin^2(\delta_z k_z) \quad (\text{F.38})$$

$$= 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{2\pi} \int_{\pi/\delta_z}^{-\pi/\delta_z} \delta_z^2 \sin^2(\delta_z k_z) dk_z \quad (\text{F.39})$$

$$= 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{2\pi} \delta_z \int_{\pi}^{-\pi} \sin^2(x) dx \quad (\text{F.40})$$

$$= 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{2} \delta_z \quad (\text{F.41})$$

$$= 2t_{\perp}^2(k_x, k_y) \delta_z . \quad (\text{F.42})$$

Puisque les quantités sont déjà normalisées, nous ne tiendrons pas compte du facteur $2\delta_z$ qui apparaît également dans le terme diamagnétique. Nous avons donc pu obtenir la réponse paramagnétique interplan

$$\chi_z^p = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \text{Tr} \left[\overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, ik_n) \overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, ik_n) \right] . \quad (\text{F.43})$$

par application directe de la formule du Kubo. Nous sommes partis de l'hamiltonien de couplage inter-plan, Éq. 3.30. La première étape fût de faire un développement selon le potentiel vecteur A. Nous avons gardé les termes linéaires pour obtenir des opérateurs courants diamagnétique et paramagnétique. La fonction de corrélation pour le courant paramagnétique a ensuite été calculée.

Annexe G

Réponse diamagnétique inter-plan pour la rigidité superfluide

Nous commençons avec le résultat (Éq. 3.36)

$$\chi_z^d = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \quad (\text{G.1})$$

où $\epsilon_{k_z} = t_\perp(k_x, k_y) 2 \cos(\delta_z k_z)$ pour obtenir la forme

$$\chi_z^p = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 2\delta_z t_\perp^2(k_x, k_y) \sum_{ik_n} \text{Tr} \left[\tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, ik_n) \right]. \quad (\text{G.2})$$

Débutons en réécrivant le terme $\langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle$ à l'aide des fonctions de Green de Nambu. En effectuant la somme sur les spins, nous obtenons

$$\sum_{\sigma} \langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \quad (\text{G.3})$$

Évaluons le terme

$$\text{Tr} \left[\tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau = 0^-) \right] = \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\langle T_\tau c_{\uparrow\mathbf{k}}(0^-) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{\uparrow\mathbf{k}}(0^-) c_{-\downarrow\mathbf{k}} \rangle \\ -\langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(0^-) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(0^-) c_{\downarrow-\mathbf{k}} \rangle \end{pmatrix} \right] \quad (\text{G.4})$$

$$= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} -\langle T_\tau c_{\uparrow\mathbf{k}}(0^-) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle T_\tau c_{\uparrow\mathbf{k}}(0^+) c_{-\downarrow\mathbf{k}} \rangle \\ \langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(0^-) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & \langle T_\tau c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(0^-) c_{\downarrow-\mathbf{k}} \rangle \end{pmatrix} \right] \quad (\text{G.5})$$

$$= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} \langle c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger c_{\uparrow\mathbf{k}}(0^-) \rangle & -\langle c_{\uparrow\mathbf{k}}(0^-) c_{-\downarrow\mathbf{k}} \rangle \\ \langle c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(0^-) c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle c_{\downarrow-\mathbf{k}} c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger(0^-) \rangle \end{pmatrix} \right] \quad (\text{G.6})$$

$$= \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} \langle c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger c_{\uparrow\mathbf{k}} \rangle & -\langle c_{\uparrow\mathbf{k}} c_{-\downarrow\mathbf{k}} \rangle \\ \langle c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger \rangle & -\langle (1 - c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger c_{\downarrow-\mathbf{k}}) \rangle \end{pmatrix} \right] \quad (\text{G.7})$$

$$= \langle c_{\uparrow\mathbf{k}}^\dagger c_{\uparrow\mathbf{k}} \rangle + \langle c_{\downarrow-\mathbf{k}}^\dagger c_{\downarrow-\mathbf{k}} \rangle - 1 \quad (\text{G.8})$$

Le terme de courant peut alors être écrit à l'aide des fonction de Green de Nambu comme

$$\chi_z^d = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \left(\text{Tr} \left[\tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, \tau = 0^-) \right] + 1 \right) \quad (\text{G.9})$$

En effectuant la transformé de Fourier de la fonction de Green de Nambu, nous obtenons que

$$\chi_z^d = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left(\text{Tr} \left[\tau_3 \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] + 1 \right). \quad (\text{G.10})$$

On effectue le développement au premier ordre en $\epsilon_{k_z} = 2t_\perp(k_x, k_y) \cos k_z$ de la fonction de Green afin que les contributions diamagnétique et paramagnétique soient en t_\perp^2 .

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \sim \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) |_{\epsilon_{k_z}=0} - \epsilon_{k_z} \left[\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \left(\frac{\partial \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1}}{\partial \epsilon_{k_z}} \right) \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \Big|_{\epsilon_{k_z}=0} \quad (\text{G.11})$$

où la dérivé a été calculée en utilisant l'identité $\partial_{\epsilon_z} [G^{-1}G] = 0$. Puisque $\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1} = \left[(i\omega_n + \mu) \mathbb{I} - \tau_3(\epsilon_{k_x, k_y} + \epsilon_{k_z}) - \Delta \tau_1 \right]$ où τ_1 et τ_3 sont des matrices de Pauli, nous obtenons que

$$\frac{\partial \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{k}, i\omega_n)^{-1}}{\partial \epsilon_{k_z}} = -\tau_3 \quad (\text{G.12})$$

La réponse diamagnétique est maintenant

$$\chi_z^d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left(\text{Tr} \left[\tau_3 \left(\overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \Big|_{\epsilon_{k_z}=0} + \epsilon_{k_z} \left[\overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \tau_3 \overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \Big|_{\epsilon_{k_z}=0} \right) \right] + 1 \right). \quad (\text{G.13})$$

La seule dépendance en k_z est dans ϵ_{k_z} . Les termes linéaires s'annulent en ϵ_{k_z} puisque qu'on sommerait un cosinus ayant autant de valeurs positives que négatives. Négligeant ces termes qui sont nuls, on obtient que

$$\chi_z^d = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \epsilon_{k_z} \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left(\text{Tr} \left[\tau_3 \overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \tau_3 \overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \right). \quad (\text{G.14})$$

Nous allons maintenant faire la somme sur k_z .

$$\frac{1}{N_z \delta_z} \sum_{k_z} \frac{\partial^2 \epsilon_{k_z}}{\partial k_z^2} \epsilon_{k_z} = -4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \delta_z^2 \frac{1}{N_z \delta_z} \sum_{k_z} \cos^2(\delta_z k_z) \quad (\text{G.15})$$

$$= -4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \delta_z \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2(x) dx \quad (\text{G.16})$$

$$= -2t_{\perp}^2(k_x, k_y) \delta_z. \quad (\text{G.17})$$

La réponse paramagnétique sous forme de Nambu et quadratique en t_{\perp} est alors

$$\chi_z^d = -\frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left(\text{Tr} \left[\tau_3 \overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \tau_3 \overline{\overline{\mathcal{G}}}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right] \right) \quad (\text{G.18})$$

où comme dans la réponse paramagnétique, nous avons absorbé le facteur constant $2\delta_z$.

Annexe H

Rigidité superfluide en champ moyen (BCS)

Dans cette section, nous évaluerons la rigidité superfluide dans le cas BCS en champ moyen. Cela permettra d'avoir un cas analytique pour tester les calculs numériques. En plus, cela correspondra à un cas limite auquel nous pourrons comparer les résultats. Nous avons obtenu à l'Éq. 3.39 que la rigidité superfluide est donnée par

$$\rho_s = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \|\mathcal{F}_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n)\|^2 . \quad (\text{H.1})$$

Dans le cas BCS en champ moyen, nous avons que la fonction de Green anormale est

$$\mathcal{F}_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n) = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{[(i\omega_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2]} \quad (\text{H.2})$$

ce qui donne la rigidité superfluide dans le cas sans interactions

$$\rho_s^0 = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \sum_{i\omega_n} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{[(i\omega_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2]^2} . \quad (\text{H.3})$$

Les sommes sur k_x et k_y sont lourdes à faire analytiquement dû à la dépendance en $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}}$. Toutefois, la somme de Matsubara peut être effectuée de manière plus systématique.

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[(i\omega_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2]^2} = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left[\frac{1}{(i\omega_n - E_{\mathbf{k}})(i\omega_n + E_{\mathbf{k}})} \right]^2 \quad (\text{H.4})$$

$$= \left[\frac{1}{(2E_{\mathbf{k}})^2} \right] \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left[\frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{i\omega_n + E_{\mathbf{k}}} \right]^2 \quad (\text{H.5})$$

$$= \left[\frac{1}{(2E_{\mathbf{k}})^2} \right] \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left[\left(\frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}}} \right)^2 + \left(\frac{1}{i\omega_n + E_{\mathbf{k}}} \right)^2 - \frac{2}{(i\omega_n - E_{\mathbf{k}})(i\omega_n + E_{\mathbf{k}})} \right] \quad (\text{H.6})$$

$$= \left[\frac{1}{(2E_{\mathbf{k}})^2} \right] \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \left[\frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{i\omega_n + E_{\mathbf{k}}} \right) - \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left[\frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{i\omega_n + E_{\mathbf{k}}} \right] \right] \quad (\text{H.7})$$

$$(\text{H.8})$$

Nous pouvons maintenant utiliser $\frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \frac{1}{ik_n - \epsilon} = n_F(\epsilon)$ pour obtenir

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[(i\omega_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2]^2} = \left[\frac{1}{(2E_{\mathbf{k}})^2} \right] \left[\frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} n_F(E_{\mathbf{k}}) - \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} n_F(-E_{\mathbf{k}}) - \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} [n_F(E_{\mathbf{k}}) - n_F(-E_{\mathbf{k}})] \right]. \quad (\text{H.9})$$

$$(\text{H.10})$$

Nous utilisons maintenant $n_F(-E_{\mathbf{k}}) = (1 - n_F(E_{\mathbf{k}}))$ pour obtenir

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[(i\omega_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2]^2} = \left[\frac{1}{(2E_{\mathbf{k}})^2} \right] \left[2 \frac{\partial}{\partial E_{\mathbf{k}}} n_F(E_{\mathbf{k}}) - \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} [2n_F(E_{\mathbf{k}}) - 1] \right] \quad (\text{H.11})$$

Il est plus pratique d'exprimer ce résultat comme

$$\rho_s = \frac{1}{N_{xy}} \sum_{k_x, k_y} 4t_{\perp}^2(k_x, k_y) \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{4E_{\mathbf{k}}^2} \left[\frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) - \frac{\beta}{2} \cosh^{-2}\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right]. \quad (\text{H.12})$$

Annexe I

Résultats supplémentaires partiels : Rigidité superfluide en fonction de la température

Une partie du projet était initialement d'étudier la dépendance en température de la rigidité superfluide en fonction de la température. Puisque nous ne pouvons pas descendre à très basses température dû au problème de signe, l'analyse des résultats et sa comparaison avec l'expérience s'en voient compromises. En effet, le mécanisme de couplage interplan pour les supraconducteurs organiques a été peu étudié et l'auteur n'a pu trouver dans la littérature celui qui est le plus vraisemblable. Différents facteurs influencent le comportement à basse température de la longueur de pénétration interplan. Les principales qui viennent à l'esprit de l'auteur sont le type de couplage, la symétrie du gap supraconducteur et les fluctuations de phases.

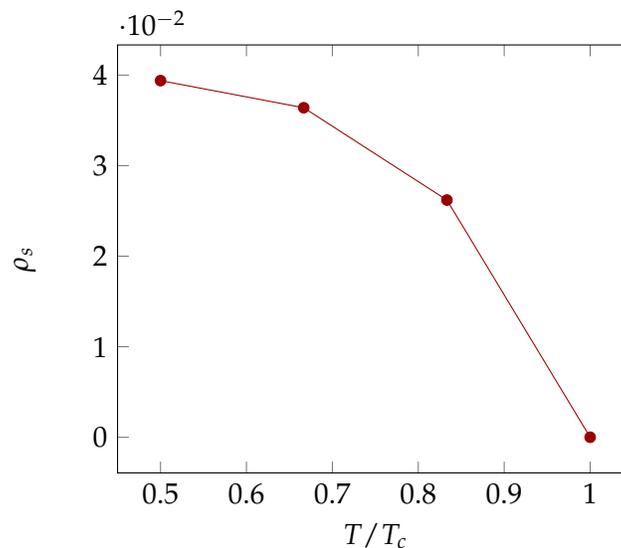


FIGURE I.1 Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.42t$ et $U = 6.0$.

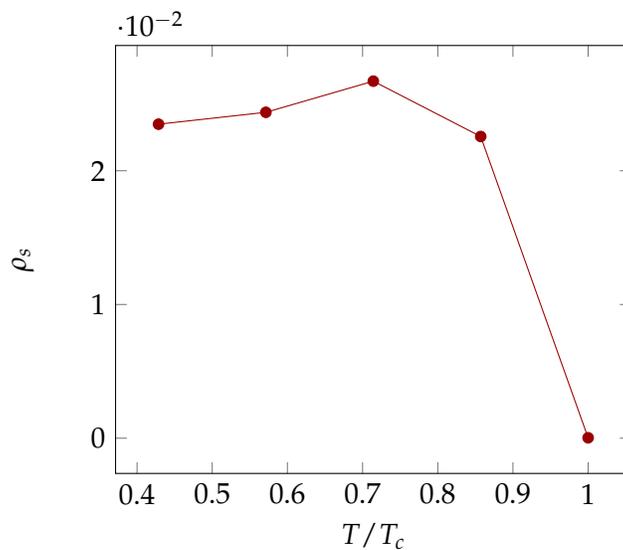


FIGURE I.2 Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.42t$ et $U = 6.15$

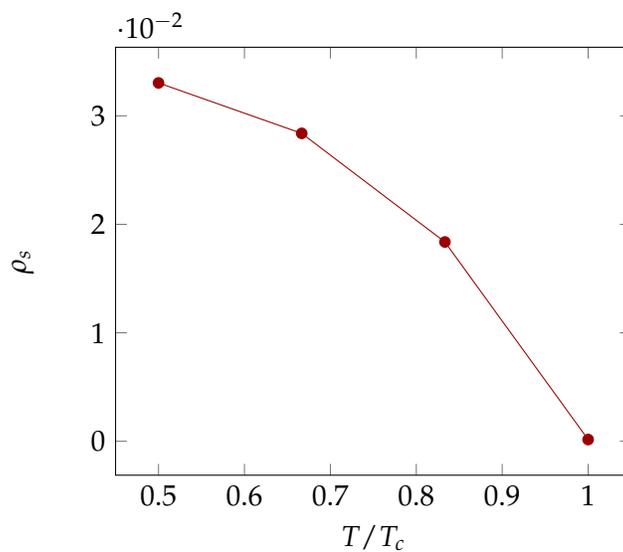


FIGURE I.3 Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.58t$ et $U = 6.4$.

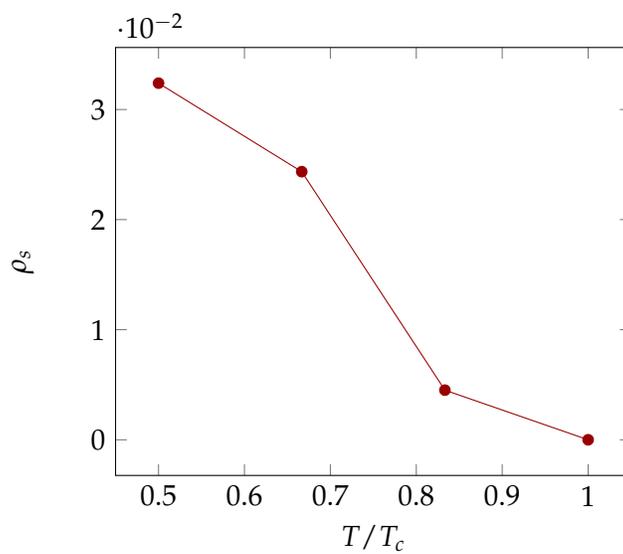


FIGURE I.4 Rigidité superfluide en fonction de la température pour $t' = 0.58t$ et $U = 6.3$.

Bibliographie

- [1] Louis-François ARSENAULT, Patrick SÉMON et A.-M. S. TREMBLAY. “Benchmark of a modified iterated perturbation theory approach on the fcc lattice at strong coupling”. *Physical Review B* 86.8 (2012), p. 085133. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.085133> (cf. p. 47).
- [2] Neil W. ASHCROFT et N. David MERMIN. “Solid State Physics (Saunders College, Philadelphia, 1976)”. *Appendix N* (2010) (cf. p. 5).
- [3] Adolfo AVELLA et Ferdinando MANCINI, éd. *Strongly Correlated Systems*. T. 180. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2015. URL : <http://link.springer.com/10.1007/978-3-662-44133-6> (cf. p. 43).
- [4] Matthias BALZER et al. “First order Mott transition at zero temperature in two dimensions : Variational plaquette study”. *EPL (Europhysics Letters)* 85.1 (jan. 2009). arXiv : 0808.2364, p. 17002. URL : <http://arxiv.org/abs/0808.2364> (cf. p. 11).
- [5] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. “Theory of Superconductivity”. *Physical Review* 108.5 (1957), p. 1175–1204. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175> (cf. p. 4).
- [6] D. N. BASOV et al. “c-axis response of $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$: A pseudogap and possibility of Josephson coupling of CuO_2 planes”. *Physical Review B* 50.5 (1994), p. 3511–3514. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.3511> (cf. p. 70).
- [7] K. S. D. BEACH, R. J. GOODING et F. MARSIGLIO. “Reliable Pad\’e analytical continuation method based on a high-accuracy symbolic computation algorithm”. *Physical Review B* 61.8 (2000), p. 5147–5157. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.5147> (cf. p. 29).
- [8] Dominic BERGERON et A.-M. S. TREMBLAY. “Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation”. *arXiv:1507.01012 [cond-mat, physics:physics]* (juil. 2015). arXiv : 1507.01012. URL : <http://arxiv.org/abs/1507.01012> (cf. p. 29).
- [9] Dominic BERGERON et al. “Optical and dc conductivity of the two-dimensional Hubbard model in the pseudogap regime and across the antiferromagnetic quantum critical point including vertex corrections”. *Physical Review B* 84.8 (2011), p. 085128. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.085128> (cf. p. 43, 68).
- [10] Stephen J. BLUNDELL. *Superconductivity: a very short introduction*. OUP Oxford, 2009. URL : <https://books.google.ca/books?hl=fr&lr=&id=GxUWMrm4dxsC&oi=fnd&pg=PR9&dq=superconductivity+very+short+introduction+blundell&ots=09JYMQ017r&sig=vsGh-ThwTuRkK7oCpzujo9ACiNQ> (cf. p. 1).

- [11] Henrik BRUUS et Karsten FLENSBERG. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. OUP Oxford, 2004. URL : http://books.google.ca/books?hl=fr&lr=&id=zeaMBAAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=bruus+flensburg&ots=n02MsFo_9u&sig=5SysMGi_-bz-ZtYHQwe3y98gTKc (cf. p. 21, 29, 32, 46, 80, 84, 92).
- [12] J. CAULFIELD et al. "Magnetotransport studies of the organic superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ under pressure : the relationship between carrier effective mass and critical temperature". *Journal of Physics: Condensed Matter* 6.15 (1994), p. 2911. URL : <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/6/15/013/meta> (cf. p. 66, 68).
- [13] Sudip CHAKRAVARTY et al. "Interlayer tunneling and gap anisotropy in high-temperature superconductors". *Science* 261.5119 (1993), p. 337–340. URL : <http://search.proquest.com/openview/49826e216ac85064eacdce9aa29de915/1?pq-origsite=gscholar> (cf. p. 43).
- [14] Maxime CHARLEBOIS. "Théorie de champ moyen dynamique pour les systèmes inhomogènes". Thèse de doct. Université Laval, 2015. URL : <http://theses.ulaval.ca/archimede/fichiers/32286/32286.pdf> (cf. p. 31, 65).
- [15] Biplab CHATTOPADHYAY et Subodh R. SHENOY. "Kosterlitz-Thouless signatures from 3D vortex loops in layered superconductors". *Physical Review Letters* 72.3 (jan. 1994), p. 400–403. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.72.400> (cf. p. 65).
- [16] Piers COLEMAN. *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press, 2015 (cf. p. 44).
- [17] Leon N. COOPER. "Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas". *Physical Review* 104.4 (nov. 1956), p. 1189–1190. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.1189> (cf. p. 5).
- [18] Supriyo DATTA. *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge University Press, 2005. URL : <http://books.google.ca/books?hl=fr&lr=&id=Yj50EJoS224C&oi=fnd&pg=PR9&dq=quantum+transport+datta&ots=joQjowCpKy&sig=ydVJpNW4-7WAgLXUr9a20P75nM> (cf. p. 19).
- [19] S. V. DORDEVIC, D. N. BASOV et C. C. HOMES. "Do organic and other exotic superconductors fail universal scaling relations?" *Scientific Reports* 3 (avr. 2013). URL : <http://www.nature.com/doi/10.1038/srep01713> (cf. p. 6, 7, 70).
- [20] S. V. DORDEVIC et al. "Global trends in the interplane penetration depth of layered superconductors". *Physical Review B* 65.13 (mar. 2002), p. 134511. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.134511> (cf. p. 6).
- [21] M. DRESSEL et al. "Electrodynamics of the organic superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ and κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Br". *Physical Review B* 50.18 (nov. 1994), p. 13603–13615. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.13603> (cf. p. 7, 38, 39).
- [22] Michael DUMM et al. "Bandwidth-controlled Mott transition in κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Br_xCl_{1-x} : Optical studies of correlated carriers". *Physical Review B* 79.19 (2009), p. 195106. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.195106> (cf. p. 9).
- [23] V. J. EMERY et S. A. KIVELSON. "Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density". *Nature* 374.6521 (1995), p. 434–437. URL : <http://www.nature.com/nature/journal/v374/n6521/abs/374434a0.html> (cf. p. 65).

- [24] Alexander L. FETTER et John Dirk WALECKA. *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Corporation, 2003. URL : <http://books.google.ca/books?hl=fr&lr=&id=0wekf1s83b0C&oi=fnd&pg=PA1&dq=fetter+walecka&ots=d-2kddh850&sig=Y5Wsi713eSThRCYBS0JYhFMZRi4> (cf. p. 20).
- [25] Alexandre FOLEY. “Effet des impuretés sur la supraconductivité et l’antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard” (2015) (cf. p. 65).
- [26] Mark FRIESEN. “Vortex unbinding and layer decoupling in a quasi-two-dimensional superconductor”. *Physical Review B* 51.1 (jan. 1995), p. 632–635. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.632> (cf. p. 65).
- [27] Antoine GEORGES et al. “Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions”. *Reviews of Modern Physics* 68.1 (jan. 1996), p. 13–125. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.68.13> (cf. p. 5).
- [28] Emanuel GULL et Andrew J. MILLIS. “Superconducting and pseudogap effects on the interplane conductivity and Raman scattering cross section in the two-dimensional Hubbard model”. *Physical Review B* 88.7 (2013), p. 075127. URL : <http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.88.075127> (cf. p. 7).
- [29] Daniel GUTERDING, Roser VALENTI et Harald O. JESCHKE. “Influence of molecular conformations on the electronic structure of organic charge transfer salts”. *Physical Review B* 92.8 (2015), p. 081109. URL : <http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.92.081109> (cf. p. 64).
- [30] Charles-David HÉBERT, Patrick SÉMON et A. TREMBLAY. “Superconducting dome in doped quasi-2d organic Mott insulators : a paradigm for strongly-correlated superconductivity”. *arXiv preprint arXiv:1509.07086* (2015). URL : <http://arxiv.org/abs/1509.07086> (cf. p. 10).
- [31] Iulian HETEL, Thomas R. LEMBERGER et Mohit RANDEIRA. “Quantum critical behaviour in the superfluid density of strongly underdoped ultrathin copper oxide films”. en. *Nature Physics* 3.10 (oct. 2007), p. 700–702. URL : <http://www.nature.com/nphys/journal/v3/n10/full/nphys707.html> (cf. p. 65).
- [32] P. J. HIRSCHFELD, S. M. QUINLAN et D. J. SCALAPINO. “c-axis infrared conductivity of a $d_{x^2-y^2}$ -wave superconductor with impurity and spin-fluctuation scattering”. *Physical Review B* 55.18 (1997), p. 12742–12747. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.12742> (cf. p. 43).
- [33] Megumi ITAYA et al. “Antiferromagnetic Fluctuations in the Organic Superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ under Pressure”. *Physical Review Letters* 102.22 (2009), p. 227003. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.227003> (cf. p. 8, 70).
- [34] Wolfhard JANKE et Tetsuo MATSUI. “Crossover in the XY model from three to two dimensions”. *Physical Review B* 42.16 (1990), p. 10673–10681. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.42.10673> (cf. p. 65).
- [35] Mark JARRELL et J.E. GUBERNATIS. “Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data”. en. *Physics Reports* 269.3 (mai 1996), p. 133–195. URL : <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0370157395000747> (cf. p. 29).
- [36] Hem C. KANDPAL et al. “Revision of model parameters for κ -type charge transfer salts : An Ab initio study”. *Physical review letters* 103.6 (2009), p. 067004. URL : <http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.103.067004> (cf. p. 9, 10).

- [37] B. KYUNG, D. SÉNÉCHAL et A.-M. S. TREMBLAY. "Pairing dynamics in strongly correlated superconductivity". *Physical Review B* 80.20 (nov. 2009), p. 205109. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.205109> (cf. p. 70).
- [38] B. KYUNG et A.-M. S. TREMBLAY. "Mott Transition, Antiferromagnetism, and d -Wave Superconductivity in Two-Dimensional Organic Conductors". *Physical Review Letters* 97.4 (2006), p. 046402. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.046402> (cf. p. 10, 11, 29).
- [39] M. I. LARKIN et al. "Pressure dependence of the magnetic penetration depth in κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂". *Physical Review B* 64.14 (sept. 2001), p. 144514. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.64.144514> (cf. p. 69).
- [40] E. Y. LOH et al. "Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems". *Physical Review B* 41.13 (1990), p. 9301–9307. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.9301> (cf. p. 32).
- [41] Fritz LONDON et Heinz LONDON. "The electromagnetic equations of the supraconductor". *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. T. 149. The Royal Society, 1935, p. 71–88. URL : <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/royprsa/149/866/71.full.pdf> (cf. p. 4, 36).
- [42] Gerald D. MAHAN. *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013. URL : https://books.google.ca/books?hl=fr&lr=&id=TFDUBwAAQBAJ&oi=fnd&pg=PA1&dq=mahan+many+particle+physics&ots=nh4SeTURzH&sig=JuYTCc3XoGAiK_Bu_I EW6a_S0YQ (cf. p. 80, 92).
- [43] Kazuma NAKAMURA et al. "Ab initio derivation of low-energy model for κ -ET type organic conductors". *Journal of the Physical Society of Japan* 78.8 (2009), p. 083710. URL : <http://journals.jps.jp/doi/abs/10.1143/JPSJ.78.083710> (cf. p. 9).
- [44] John W. NEGELE et Henri ORLAND. *Quantum many-particle systems*. T. 200. Addison-Wesley New York, 1988. URL : <http://tocs.ulb.tu-darmstadt.de/657436X.pdf> (cf. p. 17–19).
- [45] H. OIKE et al. "Pressure-Induced Mott Transition in an Organic Superconductor with a Finite Doping Level". *Physical Review Letters* 114.6 (2015), p. 067002. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.067002> (cf. p. 10, 11).
- [46] Tyson A. OLHEISER et al. "Interplane penetration depth and coherent transport in organic superconductors". *Physical Review B* 80.5 (2009), p. 054519. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.054519> (cf. p. 38).
- [47] O. PARCOLLET, G. BIROLI et G. KOTLIAR. "Cluster Dynamical Mean Field Analysis of the Mott Transition". *Physical Review Letters* 92.22 (2004), p. 226402. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.226402> (cf. p. 58, 68).
- [48] Stephen W. PIERSON. "Critical behavior of vortices in layered superconductors". *Physical Review B* 51.10 (mar. 1995), p. 6663–6674. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.51.6663> (cf. p. 65).
- [49] Stephen W. PIERSON. "Length-scale-dependent layer decoupling and critical fluctuations in high-temperature superconductors". en. *Physical Review B* 54.1 (juil. 1996), p. 688–692. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.688> (cf. p. 65).
- [50] Stephen W. PIERSON. "Length-Scale-Dependent Layer Decoupling in Layered Systems". *Physical Review Letters* 75.25 (1995), p. 4674–4677 (cf. p. 65).

- [51] M. PINTERÍĆ et al. "Influence of internal disorder on the superconducting state in the organic layered superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Br". *Physical Review B* 66.17 (nov. 2002), p. 174521. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.174521> (cf. p. 38).
- [52] B. J. POWELL et ROSS H. MCKENZIE. "Strong electronic correlations in superconducting organic charge transfer salts". *Journal of Physics: Condensed Matter* 18.45 (2006), R827. URL : <http://iopscience.iop.org/0953-8984/18/45/R03> (cf. p. 6, 9, 10).
- [53] B. J. POWELL, Eddy YUSUF et ROSS H. MCKENZIE. "Spin fluctuations and the pseudogap in organic superconductors". *Physical Review B* 80.5 (2009), p. 054505. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.054505> (cf. p. 10).
- [54] R. J. RADTKE, V. N. KOSTUR et K. LEVIN. "Theory of the *c*-axis penetration depth in the cuprates". *Physical Review B* 53.2 (jan. 1996), R522–R525. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.53.R522> (cf. p. 43).
- [55] A. REYMBAUT, D. BERGERON et A.-M. S. TREMBLAY. "Maximum entropy analytic continuation for spectral functions with nonpositive spectral weight". *Physical Review B* 92.6 (2015), p. 060509. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.060509> (cf. p. 29).
- [56] Alexis REYMBAUT. "Universalité du crossover de Mott à demi-remplissage et effets de la répulsion coulombienne aux premiers voisins sur la dynamique supraconductrice des isolants de Mott dopés aux trous" (2016) (cf. p. 31).
- [57] P. SAHEBSARA et D. SÉNÉCHAL. "Antiferromagnetism and Superconductivity in Layered Organic Conductors : Variational Cluster Approach". *Phys. Rev. Lett.* 97 (25 2006), p. 257004. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.257004> (cf. p. 11).
- [58] Shiro SAKAI et al. "Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory". *Physical Review B* 85.3 (2012), p. 035102. URL : <http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.85.035102> (cf. p. 44).
- [59] D. J. SCALAPINO. "A common thread : The pairing interaction for unconventional superconductors". *Reviews of Modern Physics* 84.4 (oct. 2012), p. 1383–1417. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84.1383> (cf. p. 5).
- [60] Douglas J. SCALAPINO, S. R. WHITE et S. C. ZHANG. "Superfluid density and the Drude weight of the Hubbard model". *Physical review letters* 68.18 (1992), p. 2830. URL : <http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.68.2830> (cf. p. 43).
- [61] J. E. SCHIRBER et al. "Pressure-temperature phase diagram, inverse isotope effect, and superconductivity in excess of 13 K in κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl where BEDT-TTF is bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene". *Physical Review B* 44.9 (sept. 1991), p. 4666–4669. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.4666> (cf. p. 64, 67).
- [62] JE SCHIRBER et al. "Effect of pressure on the superconducting transition temperature of κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂". *Physica C: Superconductivity* 152.2 (1988), p. 157–158 (cf. p. 64).
- [63] JE SCHIRBER et al. "Pressure dependence of T_c in the highest T_c organic superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Br". *Physica C: Superconductivity* 170.3-4 (1990), p. 231–232 (cf. p. 64).
- [64] Patrick SÉMON. "Continuous-Time Quantum Monte Carlo Impurity Solvers : Improvements and Applications" (2014). URL : <http://savoirs.usherbrooke.ca/handle/11143/5289> (cf. p. 31).
- [65] D. SÉNÉCHAL, D. PEREZ et M. PIORO-LADRIÈRE. "Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory". *Phys. Rev. Lett.* 84 (3 2000), p. 522–525. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.522> (cf. p. 44).

- [66] John SINGLETON et Charles MIELKE. "Quasi-two-dimensional organic superconductors : a review". *Contemporary Physics* 43.2 (2002), p. 63–96. URL : <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00107510110108681> (cf. p. 10, 64).
- [67] John SINGLETON et Charles MIELKE. "Quasi-two-dimensional organic superconductors : a review". *Contemporary Physics* 43.2 (mar. 2002). arXiv : cond-mat/0202442, p. 63–96. URL : <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0202442> (cf. p. 64).
- [68] Yu. V. SUSHKO et K. ANDRES. "Superconducting Meissner effect under hydrostatic pressure in the ambient-pressure semiconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl, where BEDT-TTF is bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene". *Physical Review B* 47.1 (jan. 1993), p. 330–333. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.47.330> (cf. p. 65, 67).
- [69] J. L. TALLON et al. "Scaling relation for the superfluid density of cuprate superconductors : Origins and limits". *Physical Review B* 73.18 (2006), p. 180504. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.180504> (cf. p. 70).
- [70] D.B. TANNER et al. "Superfluid and normal fluid density in high-T_c superconductors". en. *Physica B: Condensed Matter* 244 (jan. 1998), p. 1–8. URL : <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0921452697004535> (cf. p. 70).
- [71] André-Marie TREMBLAY. "PHY-892 Problème à N-corps (notes de cours)" (2011) (cf. p. 92).
- [72] C. C. TSUEI et J. R. KIRTLEY. "Pairing symmetry in cuprate superconductors". *Reviews of Modern Physics* 72.4 (2000), p. 969. URL : <http://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.72.969> (cf. p. 43).
- [73] Y. J. UEMURA et al. "Universal Correlations between T_c and n_s m* (Carrier Density over Effective Mass) in High-T_c Cuprate Superconductors". *Physical review letters* 62.19 (1989), p. 2317. URL : <http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.62.2317> (cf. p. 70).
- [74] H. J. VIDBERG et J. W. SERENE. "Solving the Eliashberg equations by means of N-point Padé approximants". *Journal of Low Temperature Physics* 29.3-4 (1977), p. 179–192. URL : <http://link.springer.com/article/10.1007/BF00655090> (cf. p. 29).
- [75] Y. M. VILK et A. M. S. TREMBLAY. "Destruction of the fermi liquid by spin fluctuations in two dimensions". *Journal of Physics and Chemistry of Solids. Proceedings of the Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors* 56.12 (1995), p. 1769–1771. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369795001689> (cf. p. 47).
- [76] Hans WEBER et Henrik Jeldtoft JENSEN. "Crossover from three- to two-dimensional behavior of the vortex energies in layered XY models for high-T_c superconductors". *Physical Review B* 44.1 (1991), p. 454–457. URL : <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.44.454> (cf. p. 65).
- [77] Jie YONG et al. "Superfluid Density Measurements of Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x} Films from Optimal Doping to Strong Underdoping". en. *Journal of Physics: Conference Series* 400.2 (2012), p. 022141. URL : <http://stacks.iop.org/1742-6596/400/i=2/a=022141> (cf. p. 65).
- [78] Eddy YUSUF, B J POWELL et ROSS H MCKENZIE. "Vertex corrections and the Korringa ratio in strongly correlated electron materials". *Journal of Physics: Condensed Matter* 21.19 (2009), p. 195601. URL : <http://stacks.iop.org/0953-8984/21/i=19/a=195601> (cf. p. 70).
- [79] Jan ZAAANEN. "Superconductivity : Why the temperature is high". en. *Nature* 430.6999 (2004), p. 512–513. URL : <http://www.nature.com/nature/journal/v430/n6999/full/430512a.html> (cf. p. 70).