

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

par

Alexis Reymbaut

Thèse présentée au département de physique
en vue de l'obtention du grade de docteur ès sciences (Ph.D.)

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 21 janvier 2016

Le 21 janvier 2016

le jury a accepté la thèse de Monsieur Alexis Reymbaut 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 Marcello Civelli
Membre externe
Laboratoire de physique des solides
Université Paris-Sud, Orsay, France

Professeur Alexandre Blais
Président rapporteur
Département de physique

À mes parents, mes sœurs, ma famille, et mes ami(e)s

"If you start wielding a hammer, then all your problems look like nails. And maybe they're not. Maybe it's more subtle than that. And so your toolkit has to be able to morph into what is necessary for what it is that you confront at that moment."

Neil deGrasse Tyson

"If you manage to find one idea that's not obviously wrong, it's a big accomplishment. Now, that's not to say that it's right. But not obviously being wrong is already a huge accomplishment in this field."

Nima Arkani-Hamed

Les 100 mots ou symboles apparaissant le plus fréquemment dans cette thèse

Sommaire

Le mécanisme d'appariement donnant naissance à la supraconductivité non conventionnelle reste disputé à ce jour. Une des principales difficultés sous-jacentes nous vient du lien entre cette supraconductivité et la physique de Mott. Dans le but d'éclaircir cela, cette thèse propose de traiter trois points.

Tout d'abord, nous nous intéressons aux crossovers caractérisant le régime à haute température du modèle de Hubbard demi-rempli, soit dans une situation où les fluctuations à grande longueur d'onde et même l'ordre à longue portée suggèrent que la transition de Mott n'est pas pertinente. En comparant les résultats issus de la théorie de champ moyen dynamique (DMFT), de la théorie de champ moyen dynamique cellulaire (CDMFT), et de l'approximation d'amas dynamique (DCA), nous montrons que, bien que la plupart des crossovers soient masqués par la température de Néel, le crossover de Mott (séparant le mauvais isolant de l'isolant de Mott et caractérisé par l'ouverture prononcée du gap de Mott) survit à toute température. De plus, les différentes techniques numériques voient leurs crossovers de Mott se rejoindre à une température de l'ordre de $0.45 t$, démontrant qu'à ces températures, l'effet est dominé par la physique à très courte portée.

La deuxième partie de cette thèse cherche à rendre possible l'extraction de quantités donnant accès à la dynamique supraconductrice à température finie, telle que la fonction spectrale anormale, *via* la méthode d'entropie maximale. Nous avons ainsi développé la méthode MaxEntAux qui permet de calculer la fonction spectrale anormale à partir d'une fonction spectrale auxiliaire et de fonctions spectrales normales, toutes de signe constant positif et donc toutes calculables à travers la méthode d'entropie maximale.

La dernière partie de cette thèse applique la méthode MaxEntAux à l'étude de la dynamique supraconductrice d'un isolant de Mott dopé aux trous et décrit par le modèle de Hubbard étendu, incorporant l'effet de la répulsion aux premiers voisins V . Nous montrons que V joue deux rôles antagonistes dans la dynamique supraconductrice : cette répulsion renforce l'appariement à basse fréquence à travers la constante d'échange antiferromagnétique $J = 4t^2/(U - V)$ tout en accroissant la répulsion coulombienne à haute fréquence. La compétition non triviale qui en résulte tend à augmenter la température critique à faible dopage et à la diminuer à fort dopage. En parallèle, les valeurs du célèbre rapport Δ_{SC}/T_c que nous obtenons sont significativement plus grandes que les valeurs prédites par la théorie BCS, mais sont en très bel accord avec l'expérience et présentent une certaine universalité, notamment dans le régime de dopages intermédiaires. Enfin, V semble également pousser le système étudié vers un ordre de charge commensurable en y favorisant la double occupation.

Note quant aux contributions personnelles

Les chapitres, sections, et annexes construits exclusivement à partir de mes contributions personnelles à l'avancement des connaissances seront marqués d'une étoile rouge "★" dans la table des matières ainsi que dans le corps principal de cette thèse.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont tout naturellement à André-Marie Tremblay, mon incroyable directeur de thèse. André-Marie, j'ai vraiment eu une chance inouïe de travailler à tes côtés. Tu es une véritable encyclopédie de la physique, en plus d'être une magnifique personne, généreuse, humble, patiente, et à l'écoute. J'ai toujours été impressionné par le fait que tu aies gardé un peu de cet esprit enfantin qui te permet, après toutes ces années, d'être encore émerveillé devant les surprises que la nature nous réserve et d'émerveiller les personnes qui t'entourent à coups de blagues (drôles en plus), d'anecdotes passionnantes, et de tours de cartes. Tu as également su me soutenir dans tous mes projets, notamment dans mes projets de vulgarisation qui prenaient beaucoup de temps sur ma recherche. Tu m'as vraiment donné l'occasion de réaliser mon plein potentiel. Je peux sincèrement dire qu'aucun autre doctorat n'aurait pu être aussi plaisant et formateur pour moi. Merci beaucoup, ces dernières années resteront gravées dans ma mémoire pour toujours...

Je remercie également mon comité de thèse, Alexandre Blais, Jeffrey Quilliam, Marcello Civelli, et André-Marie Tremblay, pour leur relecture attentive de mon manuscrit de thèse initial (pendant les vacances de fin d'année) et pour leurs commentaires constructifs et subtils qui ont grandement amélioré la qualité de cette version finale de thèse.

J'aimerais fortement remercier les personnes qui m'ont formé et/ou accompagné aux côtés d'André-Marie : Giovanni Sordi pour ton introduction à la physique de Mott et pour ton enthousiasme communicatif, Patrick Sémon pour ton introduction aux programmes de Monte-Carlo quantique en temps continu, Dominic Bergeron pour ton programme de prolongement analytique des plus performants, Maxime Charlebois pour ton interface Python des plus versatiles, Lorenzo Fratino pour les

discussions à distance enrichissantes et tes précieuses données numériques, et enfin David Sénéchal qui s'est toujours montré disponible pour répondre à mes questions.

Un grand merci aux membres du groupe pour les discussions du quotidien, pas toujours reliées à la physique (heureusement), qui m'ont permis de décrocher un peu de la routine : Maxime Charlebois, Simon Verret, Anne-Marie Gagnon, Reza Nourafkan (I don't want you to be bothered by the French writing so here it is, just for you, "Thank you for everything Reza"), Louis Bourassa, Shaheen Acheche (aussi connu sous le nom de "BG interstellaire"), Charles-David Hébert, Wei Wu, et Jan Gukelberger. Merci aussi aux stagiaires qui m'ont formé autant que je les ai formés et qui m'ont permis d'avancer plus vite dans mes projets : Maxime Boulay, Shaheen Acheche (encore, décidément), et Marco Fellous-Asiani.

C'est maintenant le moment de remercier tous les étudiants et étudiantes que j'ai eu la chance d'avoir dans mes charges d'exercices. Vous êtes des personnes formidables qui ont fait de moi un bien meilleur pédagogue et je suis vraiment content de pouvoir compter certain(e)s d'entre vous parmi mes ami(e)s. J'en profite pour saluer les professeurs qui m'ont donné l'opportunité de les assister avec mes charges d'exercices : Mario Poirier, Jeffrey Quilliam, et Ion Garate.

Pour des remerciements moins académiques, j'aimerais remercier tous les gens qui font partie de mes activités de vulgarisation et qui m'ont donné l'occasion de faire autre chose que de la recherche durant mon doctorat. Je pense ici aux filles du Conseil du loisir scientifique de l'Estrie et aux personnes du Centre des sciences de Montréal, du Musée de la nature et des sciences de Sherbrooke, et de l'Agence Science Presse. Vous êtes vraiment des personnes dynamiques qui font beaucoup pour la promotion de la science et on ne vous remercie sûrement pas assez pour ça. Merci enfin au Regroupement des étudiants-chercheurs en sciences de l'Université de Sherbrooke (RECSUS) pour qui j'ai été attaché à la promotion de la science pendant une année et demie bien remplie.

Pour des remerciements encore moins académiques, je voudrais dire un grand merci à tous mes ami(e)s pour le soutien moral inestimable qu'ils m'ont apporté. Par "soutien moral inestimable", j'entends bien sûr la bonne compagnie, les bières au 5 à 8, les pizzas, les chocolats chauds, les massages, les bons brunchs, les belles soirées, et les discussions portant sur tout et n'importe quoi (surtout n'importe quoi)!

Mes derniers remerciements vont évidemment à ma famille parce que j'ai la chance d'avoir une famille formidable. Commençons par ma tante Eva et à sa petite famille. Merci de m'avoir accueilli durant mes nombreux passages à Paris et de m'avoir fait découvrir quelques petits troquets parisiens bien sympathiques. Merci également à mes sœurs, Ludivine, Léa, et Hélène, pour votre amour inconditionnel et pour le simple fait d'être vous. Vous vous en doutez bien, j'ai gardé le meilleur pour la fin. Mes dernières pensées vont en effet à mes parents qui m'ont toujours soutenu dans ma soif de connaissance et qui s'en sont donné les moyens en faisant de nombreux sacrifices. Papa, maman, je ne pourrai jamais vous remercier assez pour tout ça. Je veux juste que vous sachiez que j'écris cette thèse tout d'abord pour vous, parce que c'est beaucoup grâce à vous que j'en suis arrivé ici. Vous m'avez aussi offert du réconfort et de précieux conseils durant nos innombrables discussions sur Skype. Bref, je ne pourrais pas être plus fier d'être votre fils, merci pour tout...

Table des matières

Sommaire	v
1 Ma thèse, vulgarisée pour mes parents	1
1.1 Que contient ma thèse succinctement?	1
1.2 Est-ce qu'il existe une composante universelle des résultats de tous nos programmes quant au comportement des métaux et des isolants que nous étudions?	3
1.2.1 À la rencontre entre la mécanique quantique et la conduction électrique	3
1.2.2 La "surprise isolante" de Mott et le concept d'émergence	4
1.2.3 L'universalité du crossover de Mott	5
1.3 Quelle est l'origine de la supraconductivité à haute température critique?	6
1.3.1 Les cuprates et la supraconductivité à haute température critique	6
1.3.2 Le mécanisme d'appariement supraconducteur comme sujet majeur de controverse	7
1.3.3 Comment avoir accès à ce mécanisme d'appariement	8
1.3.4 Un plongeon dans les profondeurs de l'appariement non conventionnel	10
2 Problème à N corps et modèle de Hubbard	13
2.1 Représentations de l'opérateur d'évolution	13
2.1.1 Représentations de Schrödinger et de Heisenberg	13
2.1.2 Représentation d'interaction et théorie des perturbations	14
2.2 Seconde quantification	18
2.2.1 Opérateurs de création et d'annihilation fermioniques	18

2.2.2	Changement de base - Opérateurs $\hat{N}$ et $\hat{\mathcal{H}}_0$	20
2.3	Fonction de Green retardée à une particule - Propagateur	21
2.4	Fonction de Green retardée à une particule pour le problème à N corps	23
2.4.1	Expression en seconde quantification	23
2.4.2	Cas des systèmes invariants sous translation dans l'espace	25
2.4.3	Fonction de Green pour des électrons libres	27
2.5	Représentation de Lehmann et fonction spectrale	30
2.6	Self-energy	36
2.6.1	Comment prendre en compte les interactions de façon simpliste ?	36
2.6.2	Comment prendre en compte les interactions en général ?	37
2.7	Fonction de Green de Matsubara à température finie	39
2.7.1	Temps imaginaire	39
2.7.2	Fonction de Green de Matsubara fermionique	40
2.7.3	β -antipériodicité et fréquences de Matsubara fermioniques	41
2.7.4	Prolongement analytique	42
2.8	Modèle de Hubbard	44
2.8.1	Hamiltonien de Hubbard	44
2.8.2	Demi-remplissage et symétrie particule-trou éventuelle	45
2.8.3	Modèle t - J	47
2.9	Impureté quantique et fonction d'hybridation	48
	Résumé	51
3	La physique derrière l'informatique	53
3.1	Le besoin en informatique de la physique	53
3.2	Quelques approches théoriques envisageables	55
3.3	La théorie de champ moyen dynamique (DMFT)	57
3.4	La théorie de champ moyen dynamique cellulaire (CDMFT)	64
3.5	L'approximation d'amas dynamique (DCA)	68
3.6	Solutionneurs d'impureté Monte-Carlo quantique en temps continu	69
3.6.1	Introduction	69
3.6.2	Principe général	70
3.6.3	Algorithme de Metropolis-Hastings	72
3.6.4	Ergodicité	74
3.6.5	Le problème de signe	77

3.7	Méthode d'entropie maximale pour le prolongement analytique	79
3.7.1	Un problème très mal conditionné	79
3.7.2	La vraisemblance	80
3.7.3	La probabilité <i>a priori</i>	81
3.7.4	Récapitulatif et recherche du α optimal	85
3.7.5	Problème avec l'étude de la supraconductivité	87
	Résumé	88
4	Physique de Mott	91
4.1	Brève revue historique	91
4.1.1	La théorie des bandes	91
4.1.2	Isolant de Mott et transition de Mott	92
4.2	Fortes corrélations électroniques	94
4.2.1	Considérations qualitatives	94
4.2.2	Considérations expérimentales	95
4.3	Description de la transition de Mott	96
4.3.1	Quantités thermodynamiques pertinentes	96
4.3.2	Diagramme de phase général à basse température	98
	Résumé	100
5	Crossovers "au-dessus" de la transition de Mott ★	103
5.1	Un diagramme de phase universel à haute température	103
5.2	Méthodes numériques employées	107
5.3	Caractérisation des crossovers	107
5.3.1	Lignes de Widom	107
5.3.2	Crossover de Mott	108
5.4	Une nouvelle perspective pour comprendre et appréhender la transi- tion de Mott	111
5.4.1	Réseaux triangulaires	111
5.4.2	Réseaux carrés	113
5.4.3	Comparaison des crossovers de Mott	114
5.4.4	Comment le prolongement analytique permet d'approfondir notre compréhension des crossovers	117
	Résumé	120

6	Supraconductivité	123
6.1	Brève revue historique	123
6.2	Supraconductivité conventionnelle à faible couplage - Théorie BCS .	127
6.2.1	Diagonalisation du hamiltonien effectif	127
6.2.2	Équation de gap	131
6.2.3	Cohérence de phase macroscopique	133
6.3	Supraconductivité conventionnelle à fort couplage	134
6.3.1	La colle d'appariement électron-phonon	134
6.3.2	Formalisme de Nambu - Fonction de Green et fonction spec- trale anormales	135
6.3.3	Fonction de gap dans la théorie d'Eliashberg	137
6.4	Symétrie du gap supraconducteur et appariement singulet	138
6.5	Les cuprates, des matériaux défiant ce qu'on croyait acquis en supra- conductivité	140
6.5.1	Les six règles de Bernd Matthias	140
6.5.2	Structure cristalline typique et dopage	141
6.5.3	Isolant, antiferroaimant, supraconducteur, et métal	141
6.5.4	Pseudogap	144
6.5.5	Ordre de charge	148
6.5.6	Des points critiques quantiques pour forger le dôme supra- conducteur	150
6.5.7	Une supraconductivité émergeant dans un isolant de Mott . .	155
6.5.8	Singulet de Zhang-Rice	158
6.6	Une colle d'appariement magnétique?	159
6.6.1	L'archétype de l'hélium 3 liquide	159
6.6.2	Super-échange à haute fréquence	159
6.6.3	Échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques à basse fréquence	161
	Résumé	164
7	Outils avancés pour comprendre la supraconductivité ★	167
7.1	Le sens physique de la fonction spectrale anormale	167
7.1.1	Imparité pour l'appariement singulet	167
7.1.2	Un changement de signe riche de sens physique	169

7.2	Paramètre d'ordre cumulatif à température nulle	171
7.3	Et à température finie?	173
7.4	Méthode MaxEntAux	175
7.4.1	L'astuce de la fonction de Green auxiliaire	175
7.4.2	Fonctions de Green auxiliaires généralisées pour l'appariement singulet ou triplet multi-bandes	178
7.5	Application au plomb	180
7.5.1	Démarche	180
7.5.2	Fonction de gap	184
7.5.3	Fonction spectrale anormale et paramètre d'ordre cumulatif	185
7.6	Comment distinguer des appariements retardé et <i>quasi</i> instantané et évaluer quantitativement une contribution <i>quasi</i> instantanée à l'appariement	186
	Résumé	190
8	Répulsion aux premiers voisins et supraconductivité à $T = 0$	193
8.1	Une physique plus réaliste	193
8.1.1	Modèle de Hubbard étendu	193
8.1.2	Modèle t - J étendu	194
8.2	Approximation de Hartree pour la répulsion aux premiers voisins	196
8.3	Dynamique supraconductrice à température nulle	199
8.3.1	Comparaison entre J et la dynamique de la partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique	199
8.3.2	Effets de V sur le paramètre d'ordre supraconducteur	199
8.3.3	Effets de V sur le paramètre d'ordre cumulatif	203
8.4	Une répulsion <i>quasi</i> instantanée plus quantitative pour la brisure de paires ★	206
	Résumé	208
9	Dynamique supraconductrice à température finie dans les cuprates ★	211
9.1	Dynamique supraconductrice	212
9.1.1	Température critique	212
9.1.2	Paramètre d'ordre supraconducteur	214
9.1.3	Densité d'états locale et ordre de singulets de spins à courte portée	217

9.1.4	Gap supraconducteur et rapport Δ_{SC}/T_c	219
9.1.5	Fréquence de brisure d'appariement	226
9.1.6	Contributions positive et négative au paramètre d'ordre supraconducteur	229
9.2	Un système poussé vers l'ordre de charge	238
9.3	Rôle de l'antiferromagnétisme à longue portée et lien avec la discussion des crossovers	243
	Résumé	244
Conclusion		247
A Moments d'une fonction de Green normale		253
A.1	Dérivation générale	253
A.2	Réécriture du hamiltonien de Hubbard étendu	255
A.3	Propriétés de l'opérateur densité	257
A.4	Calcul du deuxième moment dans le cadre du modèle de Hubbard étendu ★	259
B Caractérisation du crossover de Mott ★		267
B.1	Contexte général	267
B.2	Cas des systèmes symétriques particule-trou	270
B.3	Cas des systèmes non symétriques particule-trou	270
C Calcul de la fonction de gap dans la théorie d'Eliashberg		275
C.1	Incidence sur les fonctions spectrales normale et anormale locales	275
C.2	Généralisation de la fonction de gap	279
D Expression du paramètre d'ordre cumulatif à température finie ★		285
D.1	Calcul préliminaire	285
D.2	Lien avec le paramètre d'ordre cumulatif	288
E Expression de l'énergie de condensation pour la CDMFT		291
E.1	Expression de l'énergie cinétique	291
E.2	Expression de l'énergie potentielle avec répulsion coulombienne aux premiers voisins ★	294
E.3	Expression de l'énergie de condensation	297

F	Détails de calcul concernant l'expression de l'énergie cinétique	299
F.1	Lien avec l'ordre de développement en puissances de la fonction d'hybridation	299
F.2	Calcul de $t_{\vec{K}}^{amas}$	303
F.3	Calcul de $n_{\vec{K}}^{amas}$	304
G	Guide pour le lancement des simulations	313
G.1	Fichiers d'entrée	313
G.1.1	Fichier modèle	313
G.1.2	Fichier de paramètres	318
G.1.3	Fichiers de fonction d'hybridation et de self-energy	322
G.1.4	Fichier de mise à jour	322
G.2	Fichiers de sortie	325
G.3	Utiliser le supercalculateur Mammouth	326
G.4	Prolongement analytique	327
	Bibliographie	329

Liste des tableaux

3.1	Tableau introduisant les probabilités du problème des kangourous .	82
3.2	Tableau détaillant trois cas spéciaux du problème des kangourous : le cas de corrélations positives maximales, le cas de corrélations négatives maximales, et le cas sans corrélation	83
5.1	Tableau résumant les techniques numériques et les solutionneurs d'impureté utilisés dans l'étude des crossovers.	108
9.1	Tableau résumant les résultats issus de mesures de spectroscopie par photoémission résolue en angle de la densité d'états tomographique pour $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$	226

Table des figures

2.1	Interprétation physique de la fonction de Green retardée	25
2.2	Contours $\mathcal{C}_{t>0}$ et $\mathcal{C}_{t<0}$ utilisés pour démontrer l'importance du réel infinitésimal positif η dans la causalité de la fonction de Green libre retardée	30
2.3	Illustration du modèle de Hubbard	46
3.1	Illustration du concept de champ moyen	58
3.2	Illustration de la DMFT	61
3.3	Définition des coordonnées dans l'espace réel et dans l'espace réci- proque illustrée pour des amas de 4 sites	65
3.4	Illustration de l'intégrande de la divergence de Kullback-Leibler	85
3.5	Recherche du α optimal au sein de la méthode d'entropie maximale .	86
4.1	Évolution de la densité d'états locale dans le cadre du modèle de Hub- bard dans la phase paramagnétique à $T = 0$ et à demi-remplissage en fonction du rapport entre la largeur de bande du cas sans interaction W et l'interaction coulombienne locale U	93
4.2	Transition de Mott et effet Pomeranchuk dans le diagramme de phase de l'oxyde de vanadium	95
4.3	Illustration du diagramme de phase T - U d'un système d'électrons corrélés demi-rempli présentant une transition de Mott à basse tem- pérature	99
5.1	Transition de Mott et régime de crossovers autour du point critique dans le diagramme de phase T - U d'un système d'électrons corrélés demi-rempli	105

5.2	Diverses transitions et régime de crossovers dans le diagramme de phase T - P d'un fluide	106
5.3	Détermination des lignes de Widom de la CDMFT 2×2 à $\beta = 11$. . .	109
5.4	Détermination du crossover de Mott de la CDMFT 2×2 à $U = 8$. . .	110
5.5	Crossovers dans le diagramme de phase $T - U$ de la DMFT Triangle et de la CDMFT Triangle	112
5.6	Crossovers dans le diagramme de phase $T - U$ de la DMFT Square, de la CDMFT 2×2 et de la DCA 2×2	114
5.7	Étalonnage de plusieurs techniques numériques utilisant l'aimantation locale moyenne $\langle S_z^2 \rangle$ en fonction de β à $U = 4$	115
5.8	Diagramme de phase $T - U$ pour les différents crossovers de Mott . . .	116
5.9	Densité d'états locale de la CDMFT 2×2 prolongée analytiquement à $\beta = 9$ pour différentes valeurs de l'interaction à travers la ligne de Widom thermodynamique ($U_W \simeq 6.17$) et la ligne de Widom dynamique ($U_W^d \simeq 6.22$). Encart : Valeur de la densité d'états locale à $\omega = 0$ en fonction de U	118
5.10	Densité d'états locale de la CDMFT 2×2 prolongée analytiquement à $U = 8$ pour différentes températures à travers le crossover de Mott. Encart : Vue approchée de l'ouverture du gap de Mott autour du niveau de Fermi $\omega = 0$	119
6.1	Illustration naïve du mécanisme d'appariement <i>via</i> l'interaction électron-phonon	125
6.2	Évolution de la température critique en fonction des années de découverte pour différents supraconducteurs	126
6.3	Module du gap supraconducteur $ \Delta_{\vec{k}} $ vis-à-vis d'une surface de Fermi typique dans l'espace réciproque en deux dimensions pour une supraconductivité de type s et une supraconductivité de type d	139
6.4	Structure cristalline de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$	142
6.5	Diagramme de phase général des cuprates	143
6.6	a) Diagramme de phase schématique des cuprates dopés en trous. b) et c) Distribution de l'intensité spectrale mesurée grâce à la spectroscopie par émission de photons résolue en angle (ARPES) dans un quart de la zone de Brillouin	145

6.7	Température d'émergence de l'ordre de charge et vecteur d'onde associé pour toutes les familles de cuprates	149
6.8	a) Diagramme de phase de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ en champ magnétique nul $H = 0$. b) Diagramme de phase de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ à $H = 50$ T	151
6.9	Dépendance en dopage du nombre de Hall $n_H = V/(eR_H)$ (où V est le volume occupé par un atome de cuivre dans les plans de cuivre-oxygène et R_H est la résistance Hall) qui constitue une mesure directe de la densité de porteurs de charge	154
6.10	Schémas présentant la différence entre un semiconducteur et un isolant de Mott dopés aux trous à température nulle	156
6.11	Spectre d'absorption de rayons X mous dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ pour différents dopages en trous	157
6.12	Diagramme schématique d'un amas CuO_4 et de l'hybridation de la superposition cohérente symétrique des états de trou des quatre atomes d'oxygène O $2p$ entourant l'ion de cuivre avec l'état de trou du cuivre Cu $3d$ (singulet de Zhang-Rice)	158
6.13	Illustration de l'opinion de Philip W. Anderson quant à l'origine de l'appariement supraconducteur dans les cuprates	162
6.14	Illustration du mécanisme d'appariement <i>via</i> l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques à basse fréquence	163
7.1	Allure typique d'une fonction spectrale anormale	170
7.2	Paramètre d'ordre cumulatif premiers voisins à température nulle pour un supraconducteur d -wave BCS (vert) avec une fréquence de coupure $\omega_c = 0.5$, et paramètre d'ordre cumulatif local à température nulle pour le plomb dans le cadre de la théorie d'Eliashberg (magenta). Paramètres d'ordre cumulatifs $I_F(\omega)$ à température nulle pour différents dopages en trous dans le cadre du modèle de Hubbard en CDMFT 2×2 avec diagonalisation exacte. Partie imaginaire de la susceptibilité de spin χ'' à température nulle dans le cadre du modèle de Hubbard en CDMFT 2×2 avec diagonalisation exacte	172
7.3	Interpolations des parties réelle et imaginaire de la fonction de gap tirées de l'article de Scalapino, Schrieffer, et Wilkins datant de 1966	182

7.4	Comparaison entre les fonctions de gap obtenues avant et après prolongement analytique, avec la méthode MaxEntAux	184
7.5	Comparaison entre les fonctions spectrales anormales et les paramètres d'ordre cumulatifs obtenus avant et après prolongement analytique, avec la méthode MaxEntAux	185
7.6	Paramètre d'ordre cumulatif à $\vec{k} = (0, 0)$ du modèle de Hubbard attractif demi-rempli à $U = -8$ et température nulle	187
7.7	Parties réelles de la self-energy anormale à $\vec{k} = (0, 0)$ du modèle de Hubbard attractif demi-rempli à $U = -4$ et $U = -8$, à température nulle	189
8.1	Coût en énergie d'un saut électronique menant à la double occupation d'un site premier voisin à demi-remplissage dans le cadre du modèle de Hubbard standard et du modèle de Hubbard étendu	195
8.2	Numérotation des sites d'un amas 2×2 et des sites premiers voisins de cet amas pour le calcul du traitement Hartree de l'interaction coulombienne aux premiers voisins	196
8.3	Comparaison à demi-remplissage entre l'inverse de la fréquence ω_χ où se produit le pic dominant dans la partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique et l'inverse de la constante d'échange $J = 4t^2/(U - V)$	200
8.4	Effets de V sur le paramètre d'ordre supraconducteur ψ en fonction du dopage en trous x en CDMFT 2×2 pour différentes valeurs de U .	201
8.5	a) Partie imaginaire de la susceptibilité de spin locale à $U = 8$ et $V = 1$ en fonction de la fréquence dans les régimes sous-dopé ($x = 0.05$) et sur-dopé ($x = 0.20$). b) Partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique à $U = 8$ et $x = 0.05$ en fonction de la fréquence pour différentes valeurs de V	202
8.6	Paramètre d'ordre cumulatif $I_F(\omega)$ pour différentes valeurs de V et de U	204
8.7	Partie réelle de la self-energy anormale en $\vec{k} = (\pi, 0)$ à $U = 8$ ($t = 1$, $t' = -0.3$, et $t'' = 0.2$), 4% de dopage aux trous, et à $T = 0$ pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$	207
9.1	Effets de V sur la température critique supraconductrice	212

9.2	Paramètre d'ordre supraconducteur à différentes valeurs de V en fonction de la température pour les dopages aux trous $\delta = 0.08$, $\delta = 0.10$, et $\delta = 0.12$. Le paramètre d'ordre à $V = 4$ semble marquer un saut en température pour 10 et 12% de dopage, annonçant la présence éventuelle d'une transition du premier ordre	213
9.3	Comparaison des paramètres d'ordre supraconducteurs φ_{SC} à $U = 9$ et 4% de dopage aux trous tirés de la diagonalisation exacte à $T = 0$ et des simulations Monte Carlo quantique en temps continu à $T = 0.01$	214
9.4	Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur. Droite : Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation du paramètre d'ordre supraconducteur entre différentes valeurs de V . .	216
9.5	Évolution de la densité d'états locale en fonction de la température à 4% de dopage aux trous	217
9.6	Évolution de la densité d'états locale en fonction du dopage aux trous à $T = 0.02$	218
9.7	Gauche : Fonction spectrale locale pour trois frustrations magnétiques t'/t différentes. Droite : Fonction spectrale anormale pour trois frustrations magnétiques t'/t différentes. Les données sont toutes prises en plein milieu de leurs dômes supraconducteurs respectifs . .	219
9.8	Convergence du prolongement analytique extrayant la densité d'états locale pour un très bon cas et un cas moins bon. Les traits tiretés correspondent à la position des pics de basse énergie dans la densité d'états locale	220
9.9	Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur du gap supraconducteur. Droite : Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation du gap supraconducteur entre différentes valeurs de V	221
9.10	Évolution en température de la densité d'états locale à 4% de dopage et $V = 2$ en dessous de T_c et au-dessus de T_c	223

9.11	Évolution en dopage aux trous de la fonction spectrale anormale et du paramètre d'ordre cumulatif à $\beta = 100$ et $V = 0$. Gauche : Régime globalement sous-dopé. Droite : Régime globalement sur-dopé . . .	224
9.12	Rapport Δ_{SC}/T_c en fonction du dopage aux trous à $U = 9$, $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$, et à $U = 6.2$ et $U = 16$ à $V = 0$. Le gap supraconducteur est pris à $\beta = 100$	225
9.13	Convergence des prolongements analytiques extrayant la fonction spectrale anormale et le paramètre d'ordre cumulatif pour un très bon cas et un cas moins bon. Les traits tiretés correspondent au gap supraconducteur tandis que les traits pointillés correspondent à la fréquence de brisure d'appariement	227
9.14	Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la fréquence de brisure d'appariement. Droite : Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation de la fréquence de brisure d'appariement entre différentes valeurs de V . .	228
9.15	Évolution de la fonction spectrale anormale et du paramètre d'ordre cumulatif à 4% de dopage aux trous en fonction de la température pour différentes valeurs de V	230
9.16	Vue d'ensemble de la figure Fig.9.15 sur une plus large plage de fréquences	231
9.17	Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la contribution positive au paramètre d'ordre supraconducteur. Droite : Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation de la contribution positive au paramètre d'ordre supraconducteur entre différentes valeurs de V	232
9.18	Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la contribution négative au paramètre d'ordre supraconducteur. Droite : Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation de la contribution négative au paramètre d'ordre supraconducteur entre différentes valeurs de V	233

9.19	Partie réelle de la self-energy anormale en $\vec{k} = (\pi, 0)$ à 4% de dopage aux trous et $\beta = 100$ pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$. Lignes tiretées : contributions à haute fréquence obtenues en moyennant la partie réelle des self-energies anormales en $\vec{k} = (\pi, 0)$ sur la plage de fréquences violette	235
9.20	Contribution à fréquence infinie dans la partie réelle de la self-energy anormale en fonction du dopage aux trous à $\beta = 100$ pour différentes valeurs de V	236
9.21	Contribution à fréquence infinie dans la partie réelle de la self-energy anormale en fonction de la température à 4% de dopage aux trous pour différentes valeurs de V	237
9.22	Double occupation en fonction de la répulsion aux premiers voisins V pour différents dopages aux trous à $T = 0.01$. Du point de vue de la charge, le système à $V = 4$ diffère notablement des systèmes à $V = 0$ et $V = 2$ car sa double occupation augmente avec le dopage aux trous	238
9.23	Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la double occupation	240
9.24	Si V est suffisamment grand par rapport à U (avec $V < U/2$), il peut devenir très avantageux d'un point de vue énergétique d'occuper doublement des sites. Cet effet tend à former de fortes corrélations de charge à courte portée et à mimer une sorte d'interaction effective attractive entre électrons, comme au sein du modèle de Hubbard attractif	241
9.25	Différences en énergie cinétique (ΔE_{cin}), en énergie potentielle (ΔE_{pot}) et en énergie totale (ΔE_{tot}) entre l'état supraconducteur et l'état normal à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous en fonction de V	242
B.1	Valeur du potentiel chimique à demi-remplissage obtenue avec la CDMFT Triangle pour une interaction U donnée en fonction de la température	271
D.1	Contours employés dans le cas des sommes sur les fréquences de Matsubara fermioniques simples	287

Chapitre 1

Ma thèse, vulgarisée pour mes parents

1.1 Que contient ma thèse succinctement?

Commençons par quelques généralités. La thèse est le document que vous êtes en train de lire à l'instant ! Elle se veut être une description complète et détaillée sanctionnant le travail de recherche original d'un jeune chercheur (au sens professionnel de "jeune"), dans les sciences ou les lettres. Notons que le genre masculin est bien sûr employé à des fins de concision ici. La thèse est rendue et examinée par le comité de thèse à la fin d'un doctorat dans le but d'obtenir le grade de *docteur en philosophie*, ou encore *philosophiæ doctor* en latin (souvent abrégé en *Ph.D.*), après des soutenance privée et publique. Le terme "docteur" vient comme d'habitude du latin *docere* signifiant *enseigner*) mais le terme "philosophie" est ici utilisé dans son sens antérieur au 20^{ème} siècle, soit l'étude générale des connaissances. Faut-il encore savoir ce qu'est le "travail de recherche original" dans mon cas.

Mon doctorat aura duré environ 3 ans et demi durant lesquels j'ai cherché à répondre à des questions dont personne ne connaissait encore les réponses avec les méthodes utilisées dans le groupe d'André-Marie Tremblay. Ces méthodes sont des méthodes de physique mathématique et de physique numérique, soient des calculs faits à la main et des calculs faits à l'aide du supercalculateur Mammouth et de mon bon vieil ordinateur portable. Les programmes que nous utilisons simplifient le problème incroyablement complexe de milliards et de milliards d'atomes partageant

des électrons sous la forme suivante : quelques atomes sont pris à part tandis que l'effet de tous les atomes restants sur ces atomes singuliers se résume à un effet moyen où la plupart des détails ont été gommés pour rendre le problème "traitable". On parle d'*approximations de champ moyen dynamique*, le terme "dynamique" venant du fait que les électrons peuvent se mouvoir au cours du temps. Ces approximations peuvent paraître extrêmement grossières *a priori* mais vous pourriez être surpris des excellents résultats qu'elles donnent la plupart du temps ! Quant aux questions qui m'ont intéressé, elles ne sont pas évidentes à résumer en peu de mots simples, comme le montre le titre de ma thèse :

*"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."*

Mais en faisant un petit effort, on peut résumer le tout en deux questions principales :

- "Est-ce qu'il existe une composante universelle des résultats de tous nos programmes quant au comportement des métaux et des isolants que nous étudions?" ;
- "Quelle est l'origine de la supraconductivité à haute température critique?".

Malgré mes efforts, vous voyez que plus d'explications s'imposent encore. Je vais donc prendre les prochaines pages de ce chapitre pour vous amener à comprendre ces questions et les réponses que je leur ai apportées au cours de mon doctorat. Bonne lecture !

1.2 Est-ce qu'il existe une composante universelle des résultats de tous nos programmes quant au comportement des métaux et des isolants que nous étudions ?

1.2.1 À la rencontre entre la mécanique quantique et la conduction électrique

On se doutait depuis l'antiquité que la matière devait être faite de minuscules blocs élémentaires. À l'époque, on décide même de les appeler des *atomes* du grec *atomos* signifiant *insécable* ou *indivisible* (on sait désormais que ces atomes sont loin d'être indivisibles, comme le prouve, entre autres, la bombe atomique). Il faut néanmoins attendre le début du 20^{ème} siècle pour pouvoir s'aventurer à l'échelle de l'atome grâce au développement de la *mécanique quantique*. Derrière cette appellation un peu obscure se cache en fait la théorie qui nous permet de comprendre le monde atomique, de saisir par exemple ce qui rend le graphite, dont les mines de crayon sont faites, si différent du diamant, alors qu'ils sont tous deux composés des mêmes atomes de carbone.

Un des premiers succès de la mécanique quantique est d'avoir su expliquer pourquoi certains matériaux, comme le cuivre, conduisent bien l'électricité tandis que d'autres matériaux, comme le plastique, sont isolants. Bien qu'il s'agisse d'un constat simple à réaliser par soi-même, ce n'est qu'en 1928 que le suisse Felix Bloch présente la théorie expliquant cela : la *théorie des bandes*. Elle nous apprend que les matériaux conducteurs ont une structure atomique telle que les électrons peuvent très facilement y gagner de l'énergie : ces derniers se meuvent alors aisément lorsqu'ils sont soumis à une tension électrique, créant ainsi un courant électrique. Les matériaux isolants ont, au contraire, une structure atomique rendant difficile ce gain d'énergie : les électrons ne peuvent donc pas y former de courant électrique. L'énigme du caractère conducteur ou isolant des matériaux solides semble alors résolue, elle ne l'est en fait que partiellement.

1.2.2 La "surprise isolante" de Mott et le concept d'émergence

En 1937, les hollandais Jan Hendrik de Boer et Evert Johannes Willem Verwey décident d'étudier l'oxyde de nickel NiO. Imaginez leur surprise lorsqu'ils se rendent compte que ce solide, simplement fait de nickel et d'oxygène, est isolant alors que la théorie des bandes prédit qu'il doit être conducteur ! Les anglais Sir Nevill Francis Mott et Sir Rudolf Ernst Peierls cherchent alors à établir une théorie expliquant cela. Il faut bien comprendre que la théorie des bandes fait loi en la matière à l'époque grâce à de très nombreux succès retentissants et qu'elle est sérieusement mise en défaut pour la première fois. Ils finissent par réaliser que la solution à ce problème vient d'un aspect qui était mis de côté dans la théorie des bandes par souci de simplicité : l'effet des fortes répulsions entre électrons. En effet, tous les électrons portent une charge négative et se repoussent donc entre eux, de la même façon que deux aimants de pôles identiques se repoussent violemment. Si cette répulsion est suffisamment forte, ce qui se produit entre autres dans l'oxyde de nickel, il est alors possible que les électrons se gênent énormément dans leurs mouvements, créant ainsi un véritable "embouteillage électronique" les empêchant de conduire l'électricité. Un tel matériau isolant est alors appelé *isolant de Mott*, décrit par un ensemble de phénomènes totalement nouveaux appelé *physique de Mott*.

Par ailleurs, que l'on prenne en compte ou pas ces interactions, le seul fait de considérer de nombreux électrons vient changer la donne. En effet, un des concepts les plus importants de la physique moderne nous enseigne que le fait de considérer de nombreux électrons peut mener à l'émergence de nouveaux comportements pour ces derniers, de la même manière qu'un poisson se comporte différemment selon qu'il soit seul ou au sein d'un banc. Ce concept, appelé *émergence*, est introduit dans l'article *More is different* écrit en 1972 par l'américain Philip Warren Anderson, Prix Nobel de physique en 1977. Pour résumer, on sera toujours incapable de prédire le comportement d'un groupe d'électrons dans un matériau solide si on ne connaît que la manière dont se comporte un seul électron livré à lui-même. Cette incapacité à prédire les choses représente pour l'instant un des plus gros échecs de la physique théorique de la matière condensée, d'où l'importance d'étudier de tels systèmes d'électrons en interaction.

1.2.3 L'universalité du crossover de Mott

Nos programmes informatiques nous donnent l'occasion de simuler un système d'électrons en interaction tout en ajustant sa température et la force des interactions répulsives entre électrons. On peut également choisir le nombre d'électrons que nous mettons dans le système au départ. Dans le cadre de mon premier projet, j'ai considéré le cas le plus drastique où il y a un électron par atome du solide. Cela signifie que si la répulsion entre électrons est trop forte, il n'y aura absolument aucun espace libre pour se déplacer et l'embouteillage électronique sera parfait ! Dans le jargon technique, le fait d'avoir un électron par atome du solide correspond au fait d'être à *demi-remplissage*, expression qui apparaît dans le début du titre de ma thèse.

À demi-remplissage et à suffisamment haute température, augmenter la répulsion entre électrons résulte en un changement graduel entre un mauvais isolant électrique et un isolant de Mott, qu'on appelle plus communément un *crossover*. Nous avons décidé d'appeler ce crossover le *crossover de Mott* pour rendre une fois de plus hommage à ce grand physicien du 20^{ème} siècle. Après avoir développé une méthode mathématique permettant de caractériser ce crossover afin de noter les températures et interactions auxquelles nous le trouvions, nous nous sommes rendu compte qu'on le trouvait aux mêmes endroits quand la température était suffisamment haute, et ce, quelle que soit la nature du programme employé ! Ce crossover de Mott est donc une composante universelle des résultats de tous nos programmes. Aussi, la chose la plus étonnante était de voir cela se produire à des températures deux fois plus faibles que celles auxquelles on aurait pu s'attendre *a priori*, après une petite revue de la littérature scientifique sur le sujet. Cela est d'autant plus intéressant que de telles températures dans nos programmes équivalent à des températures réelles où le matériau étudié n'est pas encore fondu !

Ces travaux rendent également service en un sens beaucoup plus technique car ils nous permettent de tester la confiance qu'on peut avoir dans les résultats de nos programmes. Chaque programme représente en effet un degré d'approximation plus ou moins élevé et il n'est pas toujours très facile de s'y retrouver quand on compare les résultats de différents types de programme informatique.

1.3 Quelle est l'origine de la supraconductivité à haute température critique ?

1.3.1 Les cuprates et la supraconductivité à haute température critique

La physique de Mott que nous venons de rencontrer pourrait encore paraître bien peu intéressante si elle n'intervenait pas en réalité dans la quasi-totalité des matériaux les plus complexes et innovants étudiés depuis les vingt-cinq dernières années ! Parmi ces matériaux se trouvent notamment les *cuprates*, des céramiques découvertes en 1986 par les suisses Johannes Georg Bednorz et Karl Alexander Müller, tous deux Prix Nobel de physique en 1987. Bien qu'étant des isolants de Mott au départ, ces céramiques se mettent à :

- conduire parfaitement l'électricité ;
- repousser les champs magnétiques ;

sous une certaine température lorsqu'on retire une partie de leurs électrons *via* un procédé chimique appelé *dopage*. On dit qu'elles deviennent ainsi *supraconductrices*.

Néanmoins, il faut savoir que la découverte de la supraconductivité est antérieure aux années 80 : c'est en effet en 1911 que Heike Kamerlingh Onnes, Prix Nobel de physique en 1913, découvre les propriétés précédemment mentionnées dans le mercure à très basse température. Les cuprates se distinguent par le fait que leur température dite *critique* sous laquelle ils deviennent supraconducteurs est relativement haute (entre -180°C et -130°C environ) par rapport au zéro absolu, soit $-273,15^{\circ}\text{C}$. À titre de comparaison, la température critique du mercure est de l'ordre de -269°C . C'est pour cela qu'on les appelle des *supraconducteurs à haute température critique*. Imaginez les applications possibles pour un matériau pouvant conduire l'électricité à l'autre bout du monde sans la moindre perte d'énergie !

Cependant, leur application à très grande échelle est encore très limitée, et ce, pour deux raisons :

- il faut encore énormément les refroidir pour bénéficier de leurs propriétés fascinantes ;

- ces céramiques sont très peu malléables, ce qui empêche d'en faire des câbles fiables (autant essayer de faire un câble avec une assiette en céramique).

Nous avons donc grand besoin de trouver de nouveaux supraconducteurs plus "pratiques". Dans le cadre de ma thèse, la recherche sur la physique de Mott vise à améliorer notre compréhension des isolants de Mott pour améliorer celle que nous avons des cuprates. Il serait alors possible d'en extraire une sorte de recette de cuisine permettant de fabriquer de nouveaux matériaux supraconducteurs bien plus performants !

1.3.2 Le mécanisme d'appariement supraconducteur comme sujet majeur de controverse

Il nous manque encore une information fondamentale sur la supraconductivité : son fonctionnement. Il a globalement fallu attendre 1957 pour avoir une idée profonde de ce qu'est la supraconductivité. C'est cette année qu'est publiée la *théorie BCS*, du nom de ses trois concepteurs : John Bardeen, Leon Neil Cooper, et John Robert Schrieffer. On y apprend que les électrons d'un matériau supraconducteur peuvent en fait se mettre par *paires* à suffisamment basse température s'il existe une certaine interaction attractive vainquant leur forte répulsion, une *colle d'appariement* en quelque sorte.

Dès maintenant, deux cas doivent être distingués :

- le cas des premiers supraconducteurs découverts (entre 1911 et 1973), sous la forme de métaux et d'alliages métalliques comme le mercure, le plomb, l'étain, ou encore l'alliage de niobium-germanium par exemple ;
- le cas des supraconducteurs découverts à partir des années 80, comme les cuprates et d'autres familles exotiques de matériaux supraconducteurs.

Le premier cas correspond à ce qu'on appelle communément la *supraconductivité conventionnelle*, dans le sens où elle est très bien expliquée par la théorie BCS et ses versions plus travaillées. Entre autres, on sait que la colle permettant de former des paires d'électrons vient des vibrations des atomes dans la matière. Le deuxième cas correspond à ce qu'on appelle communément la *supraconductivité non conventionnelle*, dans le sens où la théorie BCS ne permet en rien d'expliquer son fonctionnement. On sait par exemple que la colle que nous venons de mentionner n'existe que très

peu, voire pas du tout, dans ces *supraconducteurs non conventionnels*. La question de la nature du mécanisme d'appariement au sein de cette supraconductivité non conventionnelle est donc toujours le sujet de recherches intenses !

En général, deux mécanismes d'appariement d'origine magnétique, favorisés par le fait que la supraconductivité non conventionnelle naît dans un matériau où les interactions entre électrons sont très fortes, sont envisagés :

- une colle d'appariement, où un électron affecte ce qui l'entoure sur son passage, s'éloigne, puis affecte indirectement un autre électron passant plus tard dans la même zone (on parle d'un *appariement retardé*) ;
- un autre mécanisme où un électron affecte directement et instantanément un autre électron relativement proche (on parle d'un *appariement quasi instantané*).

L'importance du retard dans l'appariement (soit du fait qu'un premier électron affecte un deuxième électron uniquement après un certain temps) est le sujet majeur de controverse ici. Cependant, de nombreux indices expérimentaux comme théoriques semblent nous pousser dans la direction d'une colle d'appariement d'origine magnétique.

1.3.3 Comment avoir accès à ce mécanisme d'appariement

Nous venons de voir que la supraconductivité était due à la formation de paires d'électrons et que ces paires pouvaient exister grâce à un certain mécanisme d'appariement surmontant la force de la répulsion entre électrons afin de les lier. D'un point de vue théorique, on peut accéder à des informations sur ce mécanisme d'appariement en calculant et en analysant des quantités dépendantes de l'énergie mise en jeu dans le processus d'appariement. En effet, ces quantités présenteront des structures particulières (pics, creux, changements de signe) à des énergies particulières que nous pourrions alors comparer avec des échelles d'énergie typiques (liées au magnétisme par exemple). Cependant, il était auparavant complètement impossible d'accéder correctement à ces quantités à une température autre que le zéro absolu !

En effet, on s'intéresse ici à la dynamique d'un système, soit à l'évolution de ses

électrons (ou de paires d'électrons) dans le temps. Ainsi, on se retrouve souvent à calculer des quantités pertinentes comme suit :

1. le programme informatique de départ génère tout un ensemble de données que nous noterons G , qui ne dépendent pas exactement de l'énergie mise en jeu dans le processus d'appariement.
2. on utilise un autre programme réalisant ce qu'on appelle un *prolongement analytique* qui transforme ces données G en une nouvelle quantité, notée A , qui dépend de l'énergie mise en jeu dans le processus d'appariement.
3. cette nouvelle quantité A , obligatoirement *positive ou nulle* pour toute énergie, nous donne de nombreuses informations sur la dynamique du système.

La précision "positive ou nulle" est très importante ici : le programme de prolongement analytique le plus performant à ce jour ne peut absolument rien faire si on lui demande de calculer une quantité A qui change de signe. Pas de chance : c'est justement le problème qu'on rencontre lorsqu'on étudie la supraconductivité. La quantité A qui décrit la dynamique des paires d'électrons change de signe en fonction de l'énergie mise en jeu dans le processus d'appariement ! Et ce changement de signe est en fait essentiel car la quantité A est positive pour des énergies où les paires d'électrons peuvent se former, et négative dans le cas contraire.

Pour contourner ce problème, nous avons créé une toute nouvelle méthode, appelée *méthode MaxEntAux*, qui fait simplement la chose suivante :

1. on définit deux jeux de données à la sortie du programme principal, notés G_1 et G_2 et construits de façon à ce qu'on puisse utiliser le prolongement analytique pour trouver les quantités A_1 et A_2 correspondantes (positives ou nulles).
2. G_1 et G_2 sont aussi soigneusement choisis pour qu'on ait en réalité $A_1 = A_2 + A_{SC}$, où A_{SC} est la quantité qui contient de l'information sur la dynamique des paires d'électrons.
3. on peut alors très facilement extraire cette quantité recherchée en écrivant $A_{SC} = A_1 - A_2$, et le tour est joué !

Il faut bien comprendre que cette nouvelle méthode rend désormais possible une étude extrêmement détaillée des mécanismes internes de la supraconductivité. Elle a aussi fait l'objet du tout premier article de mon doctorat, sous le charmant nom de

"Maximum entropy analytic continuation for spectral functions with nonpositive spectral weight".

1.3.4 Un plongeon dans les profondeurs de l'appariement non conventionnel

Maintenant que nous avons accès à toutes les quantités dont nous avons besoin, il est temps de les utiliser pour étudier le mécanisme d'appariement de la supraconductivité non conventionnelle ! On décide également de rajouter une nouvelle subtilité au problème. On donne les règles suivantes aux électrons :

- un électron a le droit de sauter d'un site du réseau sur un des premiers voisins de ce site, mais pas plus loin ;
- si deux électrons finissent sur le même site, ils se repoussent violemment !

Ces règles sont habituellement données dans beaucoup de papiers scientifiques connus mais nous rajoutons une règle supplémentaire, rendant le tout plus réaliste, qui dit que deux électrons devraient aussi se repousser s'ils sont sur des sites premiers voisins. Ça paraît logique car des électrons se repoussent à distance normalement, mais cette interaction est souvent omise car elle est trop difficile à traiter correctement. C'est pourtant ce que nous avons fait, ce qui nous a permis de faire un plongeon au cœur du mécanisme d'appariement supraconducteur !

Nous avons remarqué que cette nouvelle interaction permettait de renforcer le magnétisme du système en plus de renforcer la répulsion entre électrons. Cela a donné naissance à deux effets antagonistes sur la supraconductivité :

- un effet bénéfique qui renforce la supraconductivité à travers son mécanisme d'appariement magnétique ;
- un effet néfaste qui rend la formation de paires plus difficile car les électrons se repoussent plus violemment.

La somme des deux effets ne donne pas toujours le même résultat sur la température critique de la supraconductivité non conventionnelle : elle augmente si la tendance du matériau étudié à devenir magnétique est forte, mais diminue sinon.

Chapitre 2

Problème à N corps et modèle de Hubbard

Toute personne ayant de bonnes connaissances en matière de :

- fonction de Green retardée ;
- fonction spectrale normale ;
- fonction de Green de Matsubara et prolongement analytique ;
- modèle de Hubbard ;
- modèle t - J ;

peut parfaitement sauter ce chapitre.

2.1 Représentations de l'opérateur d'évolution

2.1.1 Représentations de Schrödinger et de Heisenberg

Les représentations de Schrödinger et de Heisenberg sont des manières équivalentes de traiter un problème quantique, bien qu'elles regardent les choses de points de vue légèrement différents. En effet, la représentation de Schrödinger est celle à laquelle nous sommes généralement habitués : les fonctions d'onde dépendent du temps tandis que les opérateurs sont indépendants du temps. La représentation de

Heisenberg considère quant à elle que les fonctions d'onde sont indépendantes du temps tandis que les opérateurs dépendent du temps.

La fonction d'onde dans la représentation de Heisenberg se construit aisément en utilisant l'opérateur d'évolution en temps pour la fonction d'onde dans la représentation de Schrödinger :

$$|\psi_S(t)\rangle = e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} |\psi_H\rangle \quad (2.1)$$

où $\hat{\mathcal{H}}$, indépendant du temps ici, est le hamiltonien grand-canonique du système et $\hbar \equiv 1$. Considérons maintenant l'opérateur $\hat{\mathcal{O}}_S$ indépendant du temps dans la représentation de Schrödinger. Sa valeur moyenne temporelle s'écrit

$$\langle \psi_S(t) | \hat{\mathcal{O}}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{\mathcal{O}}_S e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} | \psi_H \rangle \quad (2.2)$$

et il devient alors pratique de définir un opérateur dépendant du temps qui correspond à l'opérateur dans la représentation de Heisenberg :

$$\boxed{\hat{\mathcal{O}}_H(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}t} \hat{\mathcal{O}}_S e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}} . \quad (2.3)$$

On peut remarquer que les valeurs moyennes temporelles d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ donné sont bien sûr les mêmes dans chaque représentation :

$$\langle \psi_S(t) | \hat{\mathcal{O}}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | \hat{\mathcal{O}}_H(t) | \psi_H \rangle . \quad (2.4)$$

Pour résumer :

$$\text{Schrödinger :} \quad \psi_S(t) \quad \hat{\mathcal{O}}_S . \quad (2.5)$$

$$\text{Heisenberg :} \quad \psi_H \quad \hat{\mathcal{O}}_H(t) . \quad (2.6)$$

2.1.2 Représentation d'interaction et théorie des perturbations

La représentation d'interaction peut se montrer utile car elle fait apparaître clairement la théorie des perturbations à travers des fonctions d'onde et des opérateurs évoluant tous en fonction du temps.

Séparons la partie sans interaction $\hat{\mathcal{H}}_0$ de la partie avec interaction $\hat{\mathcal{H}}_{int}$ (pouvant

dépendre du temps) dans le hamiltonien grand-canonique du problème $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int} . \quad (2.7)$$

La dépendance en temps d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ quelconque est alors donnée dans cette représentation par

$$\boxed{\hat{\mathcal{O}}_I(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{O}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t}} . \quad (2.8)$$

L'opérateur d'évolution dans la représentation d'interaction $\hat{\mathcal{U}}_I(t)$ est quant à lui défini par

$$\boxed{e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} = e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{U}}_I(t)} \quad (2.9)$$

avec

$$\boxed{\hat{\mathcal{U}}_I(t=0) = 1} . \quad (2.10)$$

On a ainsi

$$\frac{\partial e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{U}}_I(t) \right] = -i\hat{\mathcal{H}}_0 e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{U}}_I(t) + e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \frac{\partial \hat{\mathcal{U}}_I(t)}{\partial t} , \quad (2.11)$$

et bien sûr

$$\frac{\partial e^{-i\hat{\mathcal{H}}t}}{\partial t} = -i\hat{\mathcal{H}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t} = -i[\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int}] e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{U}}_I(t) . \quad (2.12)$$

En combinant les deux équations précédentes, on obtient facilement

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{U}}_I(t)}{\partial t} = -i \left(e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{H}}_{int} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \right) \hat{\mathcal{U}}_I(t) = -i\hat{\mathcal{H}}_{int}(t) \hat{\mathcal{U}}_I(t) . \quad (2.13)$$

Intégrons cette équation :

$$\int_0^t \frac{\partial \hat{\mathcal{U}}_I(t')}{\partial t'} dt' = \hat{\mathcal{U}}_I(t) - 1 = -i \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') \hat{\mathcal{U}}_I(t') dt' . \quad (2.14)$$

D'où

$$\hat{\mathcal{U}}_I(t) = 1 - i \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') \hat{\mathcal{U}}_I(t') dt' . \quad (2.15)$$

On peut alors résoudre cette équation par itérations :

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{U}}_I(t) = & 1 - i \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' + (-i)^2 \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' \int_0^{t'} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t'') dt'' \\ & + (-i)^3 \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' \int_0^{t'} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t'') dt'' \int_0^{t''} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t''') dt''' + \dots\end{aligned}\quad (2.16)$$

Il est cependant possible d'écrire cela de manière plus condensée. Regardons à titre d'exemple le terme d'ordre 3. Les intégrales sont ici ordonnées en temps de la droite vers la gauche avec $t''' \leq t'' \leq t' \leq t$. On peut introduire l'opérateur d'ordonnancement chronologique $\hat{\mathcal{T}}_t$ qui range naturellement les opérateurs qui le suivent dans l'ordre chronologique de la droite vers la gauche :

$$\boxed{\hat{\mathcal{T}}_t [\hat{A}(t)\hat{B}(t')] = \theta(t - t') \hat{A}(t)\hat{B}(t') - \theta(t' - t) \hat{B}(t')\hat{A}(t) = \begin{cases} \hat{A}(t)\hat{B}(t') & \text{si } t > t' \\ -\hat{B}(t')\hat{A}(t) & \text{si } t' > t \end{cases}}$$

(2.17)

où A et B sont deux opérateurs fermioniques dépendant du temps. θ est la fonction de Heaviside et le signe $-$ vient de l'anticommutation des opérateurs fermioniques. Le terme d'ordre 3 de Eq.(2.16) est alors donné 3! fois par

$$(-i)^3 \hat{\mathcal{T}}_t \left[\int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' \int_0^{t'} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t'') dt'' \int_0^{t''} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t''') dt''' \right] \quad (2.18)$$

car il existe 3! façons de ranger les différentes intégrales dont les bornes vont toutes finir par couvrir l'intervalle $[0, t]$. Le terme d'ordre 3 de Eq.(2.16) peut finalement s'écrire

$$\frac{(-i)^3}{3!} \hat{\mathcal{T}}_t \left[\int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' \int_0^{t'} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t'') dt'' \int_0^{t''} \hat{\mathcal{H}}_{int}(t''') dt''' \right], \quad (2.19)$$

ou encore

$$\frac{(-i)^3}{3!} \hat{\mathcal{T}}_t \left[\left(\int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' \right)^3 \right]. \quad (2.20)$$

En utilisant cette astuce pour tous les termes de Eq.(2.16), on va plus généralement avoir

$$\hat{\mathcal{U}}_I(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-i)^k}{k!} \hat{\mathcal{T}}_t \left[\left(\int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt' \right)^k \right] \quad (2.21)$$

et la série donnant la fonction exponentielle permet également d'écrire

$$\boxed{\hat{\mathcal{U}}_I(t) = \hat{\mathcal{T}}_t e^{-i \int_0^t \hat{\mathcal{H}}_{int}(t') dt'} .} \quad (2.22)$$

La fonction d'onde et les opérateurs évoluent ainsi en fonction du temps *via* les relations

$$\boxed{\psi_I(t) = \hat{\mathcal{U}}_I(t) \psi} \quad \text{et} \quad \boxed{\hat{\mathcal{O}}_I(t) = e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{O}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} .} \quad (2.23)$$

Il est important de préciser qu'en utilisant la définition de l'opérateur d'évolution Eq.(2.9), les moyennes comme celles de l'équation Eq.(2.2) sont bien représentées à condition que les fonctions d'onde soient les mêmes dans toutes les représentations à $t = 0$, ce qui est le cas ici.

Par la suite, nous utiliserons globalement la représentation de Heisenberg (en accordant une dépendance temporelle aux différents opérateurs que nous rencontrerons), ce qui justifie le fait de se demander à quoi peut bien servir la représentation d'interaction. C'est en fait dans les programmes informatiques qui seront décrits plus tard que cette représentation entre en jeu. Il est en effet impossible de prendre pleinement en compte les interactions dans les calculs mais on peut se ramener à la représentation d'interaction et utiliser l'opérateur d'évolution Eq.(2.21) pour prendre progressivement les interactions en compte en y rajoutant autant de termes que l'on veut. C'est aussi la raison pour laquelle les simulations numériques sont plus lentes à l'approche d'une transition de phase : les interactions deviennent essentielles à la compréhension du système et le programme a besoin de plus de termes pour converger correctement.

On peut aussi noter que d'autres approches, d'autres décompositions du hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$, sont possibles. Une de ces approches, appelée *solutionneur d'impureté par expansion en hybridation* (ou CT-HYB), sera presque tout le temps utilisée par la suite dans cette thèse car elle est plus rapide à forte interaction. Cette approche sera davantage détaillée dans la section Sec.3.6.

2.2 Seconde quantification

2.2.1 Opérateurs de création et d'annihilation fermioniques

Considérons l'état vide de fermion $|0\rangle$. Nous allons introduire les opérateurs de création $\hat{\Psi}^\dagger$ et d'annihilation $\hat{\Psi}$ créant et détruisant un électron, respectivement. Commençons par l'opérateur de création $\hat{\Psi}^\dagger$, défini *via* la relation

$$\boxed{|\vec{r}\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) |0\rangle} \quad (2.24)$$

où l'état $|\vec{r}\rangle$ est l'état à une particule fermionique localisée à la position $\vec{r}$. On voit alors que l'opérateur de création crée une particule dans l'état qui est associé à cet opérateur, comme son nom l'indique. Partons maintenant de la définition de l'état fermionique à deux particules :

$$|\vec{r}, \vec{r}'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\vec{r}\rangle|\vec{r}'\rangle - |\vec{r}'\rangle|\vec{r}\rangle) . \quad (2.25)$$

En seconde quantification, cet état s'écrit simplement comme

$$|\vec{r}, \vec{r}'\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') |0\rangle . \quad (2.26)$$

Il est très important d'insister sur le fait qu'en plus de créer des particules, les opérateurs de création construisent bien sûr l'état Eq.(2.26) de façon à ce qu'il soit normalisé et antisymétrique sous l'échange de particules, soit $|\vec{r}, \vec{r}'\rangle = -|\vec{r}', \vec{r}\rangle$. L'équation Eq.(2.26) nous assure ainsi que les opérateurs de création fermioniques *anticommutent* :

$$\boxed{\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') = -\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})} . \quad (2.27)$$

Si on ne tient pas compte d'une éventuelle dégénérescence quantique provenant par exemple d'un spin, le *principe d'exclusion de Pauli* $|\vec{r}, \vec{r}\rangle = 0$ s'obtient finalement *via*

$$\boxed{\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) |0\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) |\vec{r}\rangle = 0} \quad (2.28)$$

car on ne peut pas avoir deux fermions dans le même état quantique, ce qui se traduit ici par une même position $\vec{r}$. Notons que la relation d'anticommutation précédente

redonne directement le principe de Pauli pour $\vec{r}' = \vec{r}$.

Par extension, on peut alors définir l'opérateur d'annihilation $\hat{\Psi}$, conjugué hermitique de l'opérateur création, qui détruit une particule dans l'état qui est associé à cet opérateur. On a alors

$$\boxed{\hat{\Psi}(\vec{r}) |\vec{r}\rangle = |0\rangle \quad \text{et} \quad \hat{\Psi}(\vec{r}) |0\rangle = 0} \quad (2.29)$$

car on ne peut pas détruire une particule qui n'existe pas. Les opérateurs d'annihilation fermioniques anticommulent également.

La base des positions étant orthogonale, les définitions précédentes permettent d'établir que

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \langle 0 | \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') | 0 \rangle = \langle 0 | \left\{ \hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \right\} | 0 \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.30)$$

où le crochet $\{\cdot, \cdot\}$ représente l'anticommutateur

$$\boxed{\left\{ \hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \right\} = \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') + \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r})}. \quad (2.31)$$

On a ainsi la relation d'anticommutation

$$\boxed{\left\{ \hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \right\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')}, \quad (2.32)$$

où δ est la distribution de Dirac, qui vient se rajouter aux autres relations d'anticommutation

$$\boxed{\left\{ \hat{\Psi}(\vec{r}), \hat{\Psi}(\vec{r}') \right\} = 0 \quad \text{et} \quad \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') \right\} = 0}. \quad (2.33)$$

On peut noter que la relation Eq.(2.32) est plus générale que la relation Eq.(2.30) car elle est valide pour des opérateurs, pas seulement pour un cas particulier d'élément de matrice.

2.2.2 Changement de base - Opérateurs $\hat{N}$ et $\hat{\mathcal{H}}_0$

Nous venons de voir les opérateurs création et annihilation dans la base des vecteurs position. Il est cependant possible de trouver leur expression dans une autre base complète d'états à une particule $|\alpha\rangle$ (telle que celle des vecteurs d'onde $\vec{k}$ par exemple). Le changement de base s'opère de façon similaire à celui qu'on utilise pour les vecteurs traditionnels :

$$|\vec{r}\rangle = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha | \vec{r} \rangle . \quad (2.34)$$

En effet, étant donnée la définition des opérateurs création, on peut montrer que l'opérateur de création $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$ pour une particule dans l'état $|\vec{r}\rangle$ est relié à l'opérateur de création $\hat{c}_\alpha^\dagger$ pour une particule dans l'état $|\alpha\rangle$ par la relation

$$\boxed{\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \hat{c}_\alpha^\dagger \langle \alpha | \vec{r} \rangle} . \quad (2.35)$$

On peut également montrer que ces opérateurs $\hat{c}_\alpha^\dagger$ obéissent aux mêmes relations d'anticommuation que les opérateurs $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r})$:

$$\boxed{\left\{ \hat{c}_\alpha, \hat{c}_\beta^\dagger \right\} = \delta_{\alpha\beta} \quad \left\{ \hat{c}_\alpha, \hat{c}_\beta \right\} = 0 \quad \left\{ \hat{c}_\alpha^\dagger, \hat{c}_\beta^\dagger \right\} = 0} , \quad (2.36)$$

$$\boxed{\left\{ \hat{c}_\alpha, \hat{c}_\alpha^\dagger \right\} = \hat{c}_\alpha \hat{c}_\alpha^\dagger + \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha = 1} . \quad (2.37)$$

L'opérateur nombre total de particules $\hat{N}$ peut être exprimé simplement comme

$$\boxed{\hat{N} = \sum_{\alpha} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha = \sum_{\alpha} \hat{n}_\alpha} \quad (2.38)$$

tandis que le hamiltonien pour des particules libres $\hat{\mathcal{H}}_0$ s'écrit généralement

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \hat{n}_\alpha} \quad (2.39)$$

où $\hat{n}_\alpha = \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha$ est l'*opérateur nombre* qui compte s'il y a un fermion ou pas dans l'état

$|\alpha\rangle$ et ξ_α est l'énergie associée à l'état $|\alpha\rangle$.

2.3 Fonction de Green retardée à une particule - Propagateur

Puisque les représentations de Schrödinger et de Heisenberg coïncident à $t = 0$, on peut écrire la fonction d'onde à une particule sous la forme suivante :

$$\psi_S(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}t} | \psi_H \rangle. \quad (2.40)$$

Si on connaît l'état initial de la fonction d'onde de Schrödinger avant toute perturbation au temps t' , notée $|\psi_S(t')\rangle_0$ ici, on sait aussi que

$$|\psi_S(t')\rangle_0 = e^{-i\hat{H}t'} | \psi_H \rangle, \quad (2.41)$$

et on obtient alors la fonction d'onde $\psi_S(\vec{r}, t)$ en fonction de cet état initial :

$$\psi_S(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | \psi_S(t') \rangle_0. \quad (2.42)$$

On utilise la relation de fermeture sur les états de position pour écrire

$$\psi_S(\vec{r}, t) = \iiint d^3\vec{r}' \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi_S(t') \rangle_0. \quad (2.43)$$

On explicite alors la causalité $t \geq t'$ en multipliant l'équation précédente par une fonction de Heaviside $\theta(t - t')$ et on utilise le fait que la fonction d'onde initiale de Schrödinger s'écrit $\psi_S^0(\vec{r}', t') = \langle \vec{r}' | \psi_S(t') \rangle_0$ pour avoir

$$\psi_S(\vec{r}, t) \theta(t - t') = \iiint d^3\vec{r}' \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | \vec{r}' \rangle \psi_S^0(\vec{r}', t') \theta(t - t'). \quad (2.44)$$

Cette dernière équation peut finalement être réécrite sous la forme

$$\boxed{\psi_S(\vec{r}, t) \theta(t - t') = i \iiint d^3\vec{r}' G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') \psi_S^0(\vec{r}', t')} \quad (2.45)$$

où nous avons introduit la *fonction de Green retardée* G^R dans la représentation de position :

$$\boxed{G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | \vec{r}' \rangle} . \quad (2.46)$$

On peut tout de suite remarquer que cette fonction de Green ne dépend pas de la condition initiale $\psi_S^0(\vec{r}', t')$ et qu'elle contient toutes les informations dont nous avons *a priori* besoin pour décrire la physique d'une particule se propageant dans un système à N corps (on peut en extraire les fonctions d'onde et les énergies propres à une particule). On appelle également cette fonction de Green un *propagateur* car elle donne la fonction d'onde à tout temps et toute position, du moment que la condition initiale est donnée. Son nom de fonction de Green *retardée* vient du fait qu'elle requiert $t > t'$: la fonction d'onde de la particule à la position $\vec{r}$ et au temps t dépend de sa fonction d'onde initiale en $\vec{r}'$ et à un temps passé t' . On aurait également pu définir la *fonction de Green avancée*

$$G^A(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = i\theta(t' - t) \langle \vec{r} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | \vec{r}' \rangle \quad (2.47)$$

qui requiert $t' > t$: la fonction d'onde de la particule à la position $\vec{r}$ et au temps t dépend de sa fonction d'onde initiale en $\vec{r}'$ et à un temps futur t' . Cette fonction de Green ne sera cependant pas utilisée par la suite.

Enfin, la fonction de Green retardée Eq.(2.46) est l'analogue de la fonction de Green classique utilisée dans le contexte des équations différentielles. En effet, un problème commun en électromagnétisme est de calculer le potentiel électrique $\phi(\vec{r})$ pour une distribution de charge donnée $\rho_e(\vec{r})$, ce qui se ramène à résoudre l'équation de Poisson :

$$\nabla_{\vec{r}}^2 \phi(\vec{r}) = -\frac{\rho_e(\vec{r})}{\varepsilon_0} . \quad (2.48)$$

Ceci se fait très facilement en posant une fonction de Green comme solution de

$$\nabla_{\vec{r}}^2 G(\vec{r}) = \delta(\vec{r}) \quad (2.49)$$

pour trouver

$$\phi(\vec{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \iiint d^3\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') \rho_e(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \iiint d^3\vec{r}' \frac{\rho_e(\vec{r}')}{||\vec{r} - \vec{r}'||} . \quad (2.50)$$

Dans le cas qui nous intéresse ici, on peut montrer que la fonction de Green retardée Eq.(2.46) est solution de

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}}(\vec{r}) \right] G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.51)$$

où $\hat{\mathcal{H}}(\vec{r})$ est le hamiltonien grand-canonique dans l'espace réel.

2.4 Fonction de Green retardée à une particule pour le problème à N corps

2.4.1 Expression en seconde quantification

Considérons la fonction de Green Eq.(2.46) et utilisons la définition des opérateurs création et annihilation pour écrire

$$G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle 0 | \hat{\Psi}(\vec{r}) e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}') | 0 \rangle \quad (2.52)$$

où $|0\rangle$ est l'état vide de particules dans le cadre du problème à N corps décrit par $\hat{\mathcal{H}}$ (état fondamental). En choisissant de façon appropriée le zéro d'énergie avec $\hat{\mathcal{H}}|0\rangle = 0$, on peut utiliser la définition des opérateurs dans la représentation d'Heisenberg Eq.(2.3) pour écrire

$$G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle 0 | \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t') | 0 \rangle. \quad (2.53)$$

Cependant, ce n'est pas exactement ce à quoi on s'attendrait pour la propagation d'une particule dans l'équation Eq.(2.45). En effet, une condition nécessaire pour conserver le sens physique de propagateur ici est d'avoir

$$G^R(\vec{r}, t + 0^+; \vec{r}', t) = -i\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.54)$$

Cette condition reflète le fait que la fonction d'onde de l'équation Eq.(2.45) n'a pas le temps de se propager en un temps infinitésimalement petit. L'incohérence que l'on constate ici vient du fait que dans notre problème à N fermions, le vide de particules

est en réalité une combinaison linéaire de déterminants de Slater qui prennent en compte l'antisymétrie quantique et l'indiscernabilité des fermions.

On retrouve néanmoins ces deux propriétés dans la relation d'anticommutation des opérateurs de création et d'annihilation fermioniques Eq.(2.32). Il est donc possible d'adopter la définition suivante pour le problème à N corps :

$$G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle 0 | \left\{ \hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t') \right\} | 0 \rangle. \quad (2.55)$$

Notons que cette définition n'est valide qu'à température nulle. En introduisant le spin des fermions, nous prendrons en général

$$\boxed{G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_\sigma(\vec{r}, t), \hat{c}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}', t') \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}} \quad (2.56)$$

où la moyenne $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}$ d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ quelconque est la moyenne thermodynamique. Cette moyenne est définie à température finie comme

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{O}})}{\text{Tr} e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}} = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{O}})}{\mathcal{Z}} \quad (2.57)$$

où $\mathcal{Z}$ est la fonction de partition du système et $\beta = 1/k_B T \equiv 1/T$ si $k_B \equiv 1$. À température nulle, la moyenne thermodynamique se simplifie pour donner :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}^{T=0} = \langle 0 | \hat{\mathcal{O}} | 0 \rangle. \quad (2.58)$$

Bien que cette fonction de Green retardée soit une fonction de Green décrivant la propagation d'une seule particule, elle est vraiment un objet à N corps parce qu'elle décrit la propagation d'une seule particule gouvernée par un hamiltonien à N corps.

Par ailleurs, on peut pousser davantage le sens physique de ce propagateur retardé en disant qu'il représente l'amplitude de probabilité de créer une particule de spin σ' dans le système à la position $\vec{r}'$ au temps t' , et de la voir se propager dans le système pour devenir une particule de spin σ à la position $\vec{r}$ au temps t qui peut finalement être détruite, comme l'illustre la figure Fig.2.1. Rappelons que l'ordre chronologique de ces deux événements est déterminé par le caractère retardé de

la fonction de Green. L'interprétation en terme d'amplitude de probabilité peut paraître un peu saugrenue mais sort plutôt bien de l'équation Eq.(2.45) : l'amplitude de probabilité finale $\psi_S(\vec{r}, t)$ dépend linéairement des amplitudes de probabilité de propagation $G^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ pondérant les amplitudes de probabilité initiales $\psi_S^0(\vec{r}', t')$.

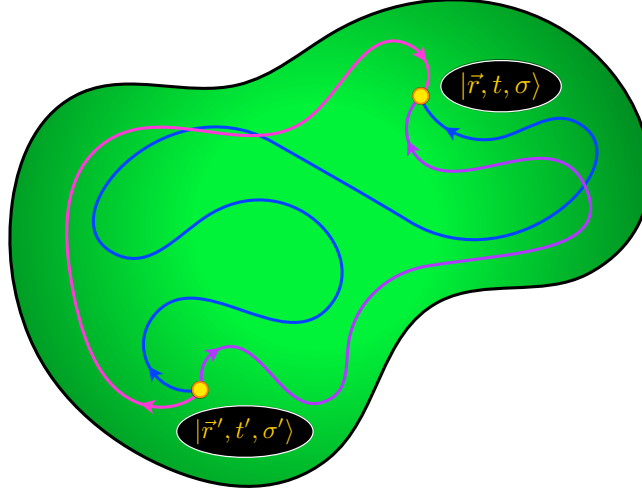


FIGURE 2.1 Interprétation physique de la fonction de Green retardée. La fonction de Green retardée G^R représente l'amplitude de probabilité de créer une particule de spin σ' dans le système à la position $\vec{r}'$ au temps t' , et de la voir se propager dans le système pour devenir une particule de spin σ à la position $\vec{r}$ au temps t . Trois chemins pris en compte dans ce processus sont tracés ici à titre d'exemple.

On voit aussi sur la figure Fig.2.1 que la fonction de Green retardée indique le niveau de *corrélation* dans le système. En effet, plus l'état $|\vec{r}, t, \sigma\rangle$ est corrélé à l'état $|\vec{r}', t', \sigma'\rangle$, plus il est probable d'arriver dans l'état $|\vec{r}, t, \sigma\rangle$ en partant de l'état $|\vec{r}', t', \sigma'\rangle$, et plus l'amplitude de probabilité liant ces deux états va être grande. Il en va ainsi de même pour la fonction de Green retardée.

2.4.2 Cas des systèmes invariants sous translation dans l'espace

Dans le cadre d'un système invariant sous translation dans l'espace, la fonction de Green $G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ ne peut dépendre spatialement que de la différence $\vec{r} - \vec{r}'$. La représentation en termes des vecteurs d'onde $\vec{k}$ devient alors une base naturelle.

Si la physique ne dépend que de $\vec{r} - \vec{r}'$, on peut décaler les positions de $-\vec{r}'$ dans la moyenne thermodynamique de la fonction de Green retardée, de façon à avoir

$$G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{r} - \vec{r}', t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_\sigma(\vec{r} - \vec{r}', t), \hat{c}_{\sigma'}^\dagger(\vec{0}, t') \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} . \quad (2.59)$$

On écrit la transformée de Fourier

$$G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{k}, \vec{k}', t, t') = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{r} - \vec{r}', t, t') e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \vec{k}' \cdot \vec{r}')} \quad (2.60)$$

où N_s est le nombre de sites du réseau invariant sous translation dans l'espace.

Faisons les changements de variables suivants : $\vec{r} = \vec{R} + \vec{x}/2$ et $\vec{r}' = \vec{R} - \vec{x}/2$. On fait ainsi apparaître le mouvement du centre de masse $\vec{R} = (\vec{r} + \vec{r}')/2$ et le mouvement relatif $\vec{x} = \vec{r} - \vec{r}'$. On a alors

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{k}, \vec{k}', t, t') &= \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{R}, \vec{x}} G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{x}, t, t') e^{-i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{R}} e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}/2} \\ &= \frac{1}{N_s} \left[\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{R}} \right] \sum_{\vec{x}} G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{x}, t, t') e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}/2} \\ &= \frac{N_s \delta(\vec{k} + \vec{k}')}{N_s^2} \sum_{\vec{x}} G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{x}, t, t') e^{-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}/2} \\ &= \frac{\delta(\vec{k} + \vec{k}')}{N_s} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{r} - \vec{r}', t, t') e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \end{aligned} \quad (2.61)$$

en utilisant le fait que

$$\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{R}} = N_s \delta(\vec{k} + \vec{k}') . \quad (2.62)$$

On peut revenir à l'expression Eq.(2.56) pour la fonction de Green retardée en utilisant l'invariance sous translation dans le temps de la moyenne thermodynamique :

$$G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{k}, \vec{k}', t, t') = -i\theta(t - t') \frac{\delta(\vec{k} + \vec{k}')}{N_s} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \left\langle \left\{ \hat{c}_\sigma(\vec{r}, t), \hat{c}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}', t') \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} . \quad (2.63)$$

On redistribue ensuite les sommes dans la moyenne thermodynamique puis dans

l'anticommutateur :

$$G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{k}, \vec{k}', t, t') = -i\theta(t-t') \frac{\delta(\vec{k} + \vec{k}')}{N_s} \left\langle \left\{ \sum_{\vec{r}} \hat{c}_{\sigma}(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \sum_{\vec{r}'} \hat{c}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}', t') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} . \quad (2.64)$$

On reconnaît alors les transformées de Fourier

$$\hat{c}_{\vec{k}\sigma}(t) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\vec{r}} \hat{c}_{\sigma}(\vec{r}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\vec{r}'} \hat{c}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}', t') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} . \quad (2.65)$$

On trouve donc l'expression de $G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{k}, \vec{k}', t, t')$ qui ne dépend pas en réalité de $\vec{k}'$ (à cause du $\delta(\vec{k} + \vec{k}')$) :

$$\boxed{G_{\sigma\sigma'}^R(\vec{k}, t, t') = -i\theta(t-t') \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\sigma}(t), \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^{\dagger}(t') \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}} . \quad (2.66)$$

2.4.3 Fonction de Green pour des électrons libres

Considérons le hamiltonien pour des fermions libres vu à l'équation Eq.(2.39) et appliquons-le au cas d'électrons libres d'énergie

$$\xi_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} . \quad (2.67)$$

On obtient

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}\sigma} . \quad (2.68)$$

On cherche à calculer dans un premier temps la fonction de Green libre retardée

$$G_0^R(\vec{k}, \sigma, t, t') = -i\theta(t-t') \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\sigma}(t), \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}(t') \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \quad (2.69)$$

qui ne comporte qu'un spin car aucune interaction n'est présente pour éventuellement renverser un spin. Il faut pour cela trouver la dépendance en temps des opérateurs de création et annihilation. Utilisons alors la dépendance en temps de

ces opérateurs dans la représentation de Heisenberg pour écrire

$$\frac{\partial \hat{c}_{\vec{k}}}{\partial t} = i[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{c}_{\vec{k}}] = i \left[\sum_{\vec{k}'} \xi_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}'}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}} \right] = i \sum_{\vec{k}'} \xi_{\vec{k}'} [\hat{c}_{\vec{k}'}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}}] \quad (2.70)$$

où on s'est débarrassé des indices de spin pour alléger la notation. Le seul terme de la somme sur $\vec{k}'$ qui ne commute pas avec $\hat{c}_{\vec{k}}$ est le terme où $\vec{k}' = \vec{k}$. On obtient alors facilement (en utilisant $\hat{c}_{\vec{k}}^2 = 0$ et $\hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} = \hat{c}_{\vec{k}}$) :

$$\frac{\partial \hat{c}_{\vec{k}}}{\partial t} = -i\xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}} \quad \implies \quad \hat{c}_{\vec{k}}(t) = e^{-i\xi_{\vec{k}}t} \hat{c}_{\vec{k}} \quad \implies \quad \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t) = e^{i\xi_{\vec{k}}t} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger. \quad (2.71)$$

On a ainsi avec les équations Eq.(2.69) et Eq.(2.71) :

$$G_0^R(\vec{k}, \sigma, t, t') = -i\theta(t - t') e^{-i\xi_{\vec{k}}(t-t')} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} = -i\theta(t - t') e^{-i\xi_{\vec{k}}(t-t')} \quad (2.72)$$

grâce à la relation d'anticommutation Eq.(2.37). On voit que la fonction de Green ne dépend que de $t - t'$, ce qui est normal car le hamiltonien est indépendant du temps.

Obtenons désormais la fonction de Green $G_0^R(\vec{k}, \omega)$ en faisant une transformée de Fourier de $G_0^R(\vec{k}, t - t')$:

$$\begin{aligned} G_0^R(\vec{k}, \sigma, \omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} [-i\theta(t - t') e^{-i\xi_{\vec{k}}(t-t')}] e^{i\omega(t-t')} d(t - t') \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} [-i\theta(t - t')] e^{i(\omega - \xi_{\vec{k}})(t-t')} d(t - t'). \end{aligned} \quad (2.73)$$

En apparence, nous avons un problème ici. En effet, la fonction de Heaviside ramène l'intervalle d'intégration à $[0, +\infty]$ mais la fonction dans l'intégrale ne s'annule pas à l'infini. Normalement, certains mécanismes de relaxation détruisent les corrélations (et tendent donc à annuler la fonction de Green retardée) sur de longs intervalles de temps mais de tels mécanismes ne sont pas présents pour des électrons libres. On sait pourtant que la physique n'y est pas infiniment corrélée en temps.

Pour contourner ce problème, la solution revient en fait à autoriser la fréquence à être complexe en considérant $\omega + i\eta$ au lieu de ω . Le terme η est supposé positif et

infinitésimalement petit. On a ainsi

$$G_0^R(\vec{k}, \sigma, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} [-i\theta(t-t')] e^{i(\omega-\xi_{\vec{k}})(t-t')} e^{-\eta(t-t')} d(t-t') \quad (2.74)$$

qui ne pose plus de problème. On peut finalement utiliser l'expression de la transformée de Fourier

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} [-i\theta(t)] e^{i(\omega+i\eta)t} dt = \frac{1}{\omega + i\eta}} \quad (2.75)$$

pour avoir

$$\boxed{G_0^R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\vec{k}} + i\eta}}. \quad (2.76)$$

L'ajout de ce réel η a une utilité bien plus profonde encore car il permet d'assurer la causalité de la fonction de Green retardée en temps réel. En effet, en prenant $t' = 0$ comme temps de référence et écrivant la transformée de Fourier inverse de la fonction de Green libre retardée en fréquence réelle, on a

$$G_0^R(\vec{k}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_0^R(\vec{k}, \omega) e^{-i(\omega+i\eta)t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t} e^{\eta t}}{\omega - \xi_{\vec{k}} + i\eta}. \quad (2.77)$$

On peut alors résoudre ce problème par le biais du théorème des résidus sur les contours $\mathcal{C}_{t>0}$ et $\mathcal{C}_{t<0}$ présentés à la figure Fig.2.2.

L'introduction de η décale infinitésimalement le pôle $\xi_{\vec{k}} - i\eta$ de l'intégrande de l'équation Eq.(2.77) hors de l'axe réel, dans le demi-plan complexe inférieur. Or, seul le contour $\mathcal{C}_{t>0}$ se trouve dans ce demi-plan (pour $t > 0$, $e^{i\omega t} \rightarrow 0$ uniquement lorsque $\text{Im } \omega \rightarrow -\infty$). Le théorème des résidus nous donne donc directement un résultat nul pour le cas $t < 0$ car le contour $\mathcal{C}_{t<0}$ ne contiendra jamais de pôle. Tout cela assure ainsi la causalité de la fonction de Green libre retardée :

$$G_0^R(\vec{k}, t < 0) = 0. \quad (2.78)$$

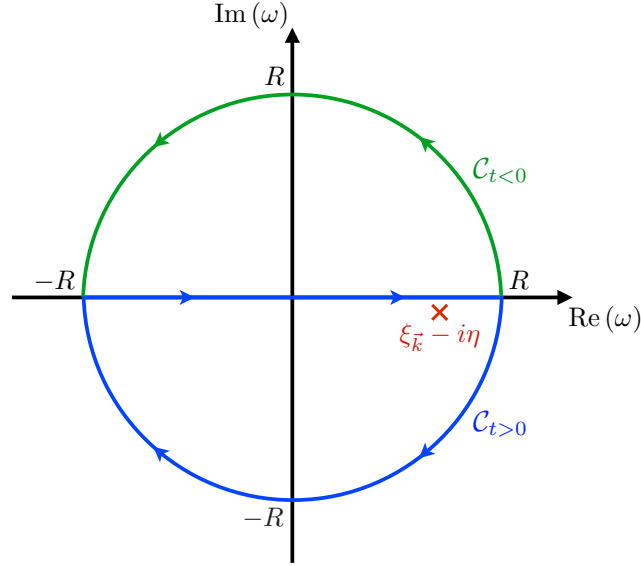


FIGURE 2.2 Contours $\mathcal{C}_{t>0}$ et $\mathcal{C}_{t<0}$ utilisés pour démontrer l'importance du réel infinitésimal positif η dans la causalité de la fonction de Green libre retardée. Les deux contours sont utilisés suivant que le temps t soit positif ou négatif afin que les intégrales sur les demi-cercles s'annulent à l'infini lorsque l'on fait tendre leur rayon R vers l'infini.

2.5 Représentation de Lehmann et fonction spectrale

La représentation de Lehmann est importante pour faire des démonstrations formelles. Elle consiste en l'utilisation des états propres $|n\rangle$ du hamiltonien complet $\hat{\mathcal{H}}$. Avant de continuer, rappelons que la moyenne thermodynamique d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ s'écrit comme

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{O}})}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}} = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{O}})}{\mathcal{Z}} = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{\mathcal{O}} | n \rangle}{\mathcal{Z}} \quad (2.79)$$

où $\beta = 1/k_B T$, $\mathcal{Z} = \sum_n e^{-\beta E_n}$ est la fonction de partition, et E_n sont les énergies propres associées aux états propres $|n\rangle$. On va donc pouvoir se servir de cette définition pour exprimer les moyennes thermodynamiques qui apparaissent dans les différentes fonctions de Green. Il est important de noter que cette représentation met en jeu les énergies propres du système étudié qui sont des grandeurs fondamentales pour comprendre le spectre d'excitation d'un matériau au cours d'une expérience.

Nous en reparlerons d'ici peu. Les calculs vont être menés à température finie sur la fonction de Green de l'équation Eq.(2.66) en considérant deux spins identiques pour les opérateurs formant la fonction de Green ($\sigma = \sigma'$). Nous verrons que la fonction spectrale de la prochaine section est très bien interprétée dans ce cas-là. Pour alléger la notation, nous allons omettre le spin :

$$\begin{aligned}
G^R(\vec{k}, t, t') &= -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}}(t), \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\
&= -i\theta(t - t') \left[\left\langle \hat{c}_{\vec{k}}(t) \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} + \left\langle \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') \hat{c}_{\vec{k}}(t) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \right] \\
&= -i\theta(t - t') \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_n e^{-\beta E_n} \left[\langle n | \hat{c}_{\vec{k}}(t) \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') | n \rangle + \langle n | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') \hat{c}_{\vec{k}}(t) | n \rangle \right] \\
&= -i\theta(t - t') \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \left[\langle n | \hat{c}_{\vec{k}}(t) | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') | n \rangle \right. \\
&\quad \left. + \langle n | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(t') | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}(t) | n \rangle \right] \\
&= -i\theta(t - t') \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \left[\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle e^{i(E_n - E_{n'})(t - t')} \right. \\
&\quad \left. + \langle n | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}} | n \rangle e^{-i(E_n - E_{n'})(t - t')} \right] \quad (2.80)
\end{aligned}$$

où on a introduit des relations de fermeture $\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| = 1$ et où on a utilisé la dépendance en temps des opérateurs de création et d'annihilation dans la représentation de Heisenberg pour ces états propres. Là encore, la fonction de Green ne dépend temporellement que de $t - t'$ car le hamiltonien n'a pas de dépendance explicite en temps.

Obtenons alors $G^R(\vec{k}, \omega)$:

$$\begin{aligned}
G^R(\vec{k}, \omega) &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \left[\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} -i\theta(t) e^{i(\omega + E_n - E_{n'})t} dt \right. \\
&\quad \left. + \langle n | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}} | n \rangle \int_{-\infty}^{+\infty} -i\theta(t) e^{i(\omega - E_n + E_{n'})t} dt \right] \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{nn'} \left[\frac{\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle}{\omega + E_n - E_{n'} + i\eta} e^{-\beta E_n} + \frac{\langle n | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}} | n \rangle}{\omega - E_n + E_{n'} + i\eta} e^{-\beta E_n} \right] \quad (2.81)
\end{aligned}$$

On peut alors jouer sur le deuxième terme car la somme est la même sur n et sur n' : on peut donc échanger les indices n et n' . Le terme au numérateur de la fraction

étant un produit de deux nombres, il n'y a pas de problème de commutation. Ce deuxième terme a alors une forme similaire au premier et on obtient :

$$G^R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} \frac{\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle}{\omega + E_n - E_{n'} + i\eta} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}) . \quad (2.82)$$

Les opérateurs $\hat{c}_{\vec{k}}$ et $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger$ étant conjugués hermitiques l'un de l'autre, on a

$$\langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle = \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle^* . \quad (2.83)$$

D'où

$$G^R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_n} \frac{|\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle|^2}{\omega + E_n - E_{n'} + i\eta} (1 + e^{\beta(E_n - E_{n'})}) . \quad (2.84)$$

Considérons maintenant la partie imaginaire de cette fonction de Green en utilisant le *théorème de Sokhatsky-Weierstrass* :

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x + i\eta} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) - i\pi \delta(x) \quad (2.85)$$

où $\mathcal{P}$ est la valeur principale de Cauchy

$$\mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{dx}{x} + \int_{\varepsilon}^{+\infty} \frac{dx}{x} \right] . \quad (2.86)$$

On a d'après Eq.(2.84) et Eq.(2.85) :

$$\begin{aligned} \text{Im } G^R(\vec{k}, \omega) &= -\frac{\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_n} |\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle|^2 (1 + e^{\beta(E_n - E_{n'})}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) \\ &= -\frac{\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_n} |\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle|^2 (1 + e^{-\beta\omega}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) . \end{aligned} \quad (2.87)$$

On définit alors la *fonction spectrale* $\mathcal{A}$ via

$$\mathcal{A}(\vec{k}, \omega) = -2 \text{Im } G^R(\vec{k}, \omega) . \quad (2.88)$$

Ainsi, dans la représentation de Lehmann :

$$\mathcal{A}(\vec{k}, \omega) = \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_n} |\langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle|^2 (1 + e^{-\beta \omega}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) . \quad (2.89)$$

Par ailleurs, en insérant $\int d\omega' \delta(\omega' + E_n - E_{n'}) = 1$ dans la fonction de Green de l'équation Eq.(2.84) et en comparant avec la première ligne de l'équation Eq.(2.87), on obtient la relation très utile :

$$G^R(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\mathcal{A}(\vec{k}, \omega')}{2\pi \omega - \omega' + i\eta} . \quad (2.90)$$

On parle de *représentation spectrale* de la fonction de Green retardée.

Cette fonction spectrale est une quantité essentielle à calculer car elle permet de faire le lien direct entre la théorie et l'expérience. En effet, au cours des expériences de spectroscopie par photoémission résolue en angle (ARPES), on bombarde de photons la surface d'un matériau qui, par effet photoélectrique, va ensuite émettre un électron dont on va pouvoir analyser le vecteur d'onde et l'énergie. On a alors accès au spectre d'excitation du matériau en question, à sa densité d'états électronique. Cette densité d'états est justement égale à la fonction spectrale intégrée sur les vecteurs d'onde.

La fonction spectrale est aussi un parfait indicateur pour savoir à quel point les électrons sont libres ou pas dans un matériau. En considérant la fonction de Green libre $G_0^R(\vec{k}, \omega)$ de l'équation Eq.(2.76), on obtient la fonction spectrale libre $\mathcal{A}_0(\vec{k}, \omega)$ en utilisant sa définition Eq.(2.88) :

$$\mathcal{A}_0(\vec{k}, \omega) = 2\pi \delta(\omega - \xi_{\vec{k}}) . \quad (2.91)$$

La fonction spectrale en $\vec{k}$ pour des électrons parfaitement libres est donc un simple pic de Dirac situé à l'énergie propre $\xi_{\vec{k}}$. Tout écart à ce pic de Dirac (tel qu'un élargissement des pics par exemple) indique alors la présence d'interactions. Ceci se retrouve dans la représentation de Lehmann de la fonction spectrale Eq.(2.89) : on y voit clairement la fonction delta de Dirac et l'élargissement éventuel des pics de Dirac provient des projections de l'opérateur $\hat{c}_{\vec{k}}$. Effectivement, l'invariance sous

translation est brisée en présence d'interaction, ce qui fait que le vecteur d'onde n'est plus un bon nombre quantique. L'opérateur d'annihilation appliqué sur un vecteur propre du système $|n\rangle$ va donc donner des composantes sur beaucoup d'autres vecteurs propres $|n'\rangle$ et un continuum d'énergie va se former, élargissant les pics (on va en fait avoir un continuum de pics de Dirac).

Montrons maintenant que la fonction spectrale $\mathcal{A}(\vec{k}, \omega)$ peut aussi être vue comme une *distribution de probabilité* dans le sens où elle indique la densité de probabilité qu'une particule soit excitée dans l'état $|\vec{k}\rangle$ d'énergie ω (soit $\hbar\omega$ si on ne prend pas $\hbar \equiv 1$). Tout d'abord, la fonction spectrale est une quantité positive :

$$\boxed{\mathcal{A}(\vec{k}, \omega) \geq 0} . \quad (2.92)$$

Cela apparaît clairement à l'équation Eq.(2.89). Notons dès maintenant que cette positivité vient directement du fait que la fonction de Green de départ est construite à partir de deux opérateurs conjugués hermitiques l'un de l'autre, ce qui permet d'utiliser la relation Eq.(2.83). Cela se montrera crucial plus tard lorsque nous nous intéresserons à l'étude de la supraconductivité. Ensuite, la fonction spectrale obéit à une règle de somme. On a

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[-2 \operatorname{Im} G^R(\vec{k}, \omega) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) \right] \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_{n'}}) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle + \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle . \end{aligned} \quad (2.93)$$

En commutant les éléments de matrice du deuxième terme et en mettant des relations

de fermeture en évidence, on a alors

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} \left(\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| \right) \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle \\
&\quad + \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle + \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \\
&= \langle \hat{c}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \rangle_{\mathcal{H}} + \langle \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}}, \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \right\} \right\rangle_{\mathcal{H}}. \tag{2.94}
\end{aligned}$$

L'anticommutation Eq.(2.37) des opérateurs fermioniques donne finalement :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) = 1}. \tag{2.95}$$

Encore une fois, c'est la conjugaison hermitique liant les opérateurs de création et d'annihilation qui permet d'utiliser cette relation d'anticommutation. Finalement, montrons que l'occupation moyenne d'un état $|\vec{k}\rangle$ est donnée par une intégrale en énergie de la fonction spectrale projetée sur l'état $|\vec{k}\rangle$, pondérée par la distribution de Fermi-Dirac pour cette énergie. Réécrivons en avance la fonction spectrale :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}(\vec{k}, \omega) &= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle (1 + e^{-\beta\omega}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) \\
&= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle (1 + e^{-\beta\omega}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) \\
&= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta(E_{n'} - \omega)} \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle (1 + e^{-\beta\omega}) \delta(\omega + E_n - E_{n'}) \\
&= \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle (e^{\beta\omega} + 1) \delta(\omega + E_n - E_{n'}). \tag{2.96}
\end{aligned}$$

Ainsi :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) f(\omega) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n n'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n' | \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger | n \rangle \langle n | \hat{c}_{\vec{k}} | n' \rangle \tag{2.97}$$

où $f(\omega) = (e^{\beta\omega} + 1)^{-1}$ est la distribution de Fermi-Dirac. D'où

$$n_{\vec{k}} = \langle \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \rangle_{\hat{H}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) f(\omega) . \quad (2.98)$$

Une intégration sur $\vec{k}$ donnerait le nombre moyen de particules dans l'ensemble grand-canonique avec une densité d'états

$$\rho(\omega) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) . \quad (2.99)$$

On peut alors voir la fonction spectrale comme une sorte de densité d'états généralisée qui va décrire le nombre d'états accessibles caractérisés par un vecteur d'onde compris entre $\vec{k}$ et $\vec{k} + d^3\vec{k}$, et une énergie comprise entre ω et $\omega + d\omega$. Il est important de faire cette distinction entre le système de particules libres et le système de particules en interaction : en recevant une énergie ω , le système libre réagira uniquement avec le mode d'excitation d'énergie $\omega = \xi_{\vec{k}}$ tandis que le système en interaction verra cette énergie répartie à travers une population de particules de vecteurs d'onde différents.

2.6 Self-energy

2.6.1 Comment prendre en compte les interactions de façon simpliste ?

Nous allons voir que la self-energy permet de prendre en compte les interactions dans le système et de les inclure clairement dans le formalisme de fonction de Green. Cependant, sans entrer davantage dans les détails pour l'instant, on peut essayer d'avoir une idée de l'effet des interactions sur le poids spectral $\mathcal{A}(\vec{k}, \omega)$.

Dans un métal, un des mécanismes pouvant entraîner une interaction entre électrons est l'interaction électron-phonon qui redistribue le poids spectral en diffusant les électrons hors de leurs états initiaux. Considérons l'exemple simpliste où

l'on prend la fonction de Green libre en temps réel de l'équation Eq.(2.72) avec un facteur multiplicatif qui la fait décroître dans le temps à cause de processus diffusant l'électron hors de l'état $|\vec{k}\rangle$:

$$G^R(\vec{k}, t) \simeq -i\theta(t) e^{-i\xi_{\vec{k}}t} e^{-t/\tau} \quad (2.100)$$

où τ est un temps typique de libre parcours moyen de l'électron dans le métal. τ^{-1} représente ainsi le taux de diffusion dans le matériau. La fonction spectrale correspondante est alors

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) &= -2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(\vec{k}, t) e^{i\omega t} dt \\ &\simeq -2 \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} [-i\theta(t)] e^{[i(\omega - \xi_{\vec{k}}) - 1/\tau]t} dt \\ &\simeq \frac{2/\tau}{(\omega - \xi_{\vec{k}})^2 + (1/\tau)^2} . \end{aligned} \quad (2.101)$$

On obtient ainsi une lorentzienne centrée en $\xi_{\vec{k}}$ et de largeur en énergie τ^{-1} (avec $\hbar \equiv 1$). Quand des interactions sont présentes, la fonction spectrale passe de la distribution de Dirac de l'équation Eq.(2.91) à un profil plus élargi.

2.6.2 Comment prendre en compte les interactions en général ?

Laissons désormais de côté l'indice supérieur R indiquant la nature retardée de la fonction de Green pour alléger la notation. Notons G_0 la fonction de Green retardée non interagissante et G_{int} la fonction de Green retardée en interaction. L'équation de Dyson définit alors la *self-energy* Σ comme étant

$$\boxed{G_{int}^{-1}(\vec{k}, \omega) = G_0^{-1}(\vec{k}, \omega) - \Sigma(\vec{k}, \omega)} . \quad (2.102)$$

On trouve l'expression de G_{int} grâce à celle de G_0 à l'équation Eq.(2.76) :

$$\boxed{G_{int}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, \omega)}} . \quad (2.103)$$

Il est évident d'après l'équation de Dyson que la self-energy représente l'effet des interactions entre particules. La self-energy prend en compte le fait que le système puisse interagir avec son environnement et que cet environnement puisse interagir en retour avec le système. Par exemple, un électron va repousser les électrons autour de lui (son environnement) par répulsion coulombienne mais le potentiel électrique dans lequel il baigne va alors changer, ce qui va influencer sur le comportement de ce même électron.

En laissant de côté les variables entre parenthèses dans l'équation Eq.(2.102), on peut écrire :

$$G_{int} = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} = \left[\frac{1}{1 - G_0 \Sigma} \right] G_0 = [1 + G_0 \Sigma + (G_0 \Sigma)^2 + (G_0 \Sigma)^3 + \dots] G_0. \quad (2.104)$$

La self-energy peut servir à exprimer la fonction de Green en interaction G_{int} en fonction de la fonction de Green non interagissante G_0 sous la forme d'une série géométrique de raison $G_0 \Sigma$. On peut alors sélectionner les interactions que l'on veut considérer pour obtenir une certaine forme (plus simple) pour la self-energy. Des approximations successivement meilleures pour la self-energy peuvent être générées systématiquement à l'aide des *diagrammes de Feynman* qui, bien que hors sujet ici, justifieront l'utilité d'une fonction de Green en temps imaginaire à température finie d'ici peu.

À partir de la fonction de Green interagissante Eq.(2.103), on a accès à la fonction spectrale interagissante :

$$\mathcal{A}_{int}(\vec{k}, \omega) = \frac{-2 \operatorname{Im} \Sigma(\vec{k}, \omega)}{\left(\omega - \xi_{\vec{k}} - \operatorname{Re} \Sigma(\vec{k}, \omega) \right)^2 + \left(\operatorname{Im} \Sigma(\vec{k}, \omega) \right)^2}. \quad (2.105)$$

La condition de positivité de la fonction spectrale Eq.(2.92) impose alors :

$$\boxed{\operatorname{Im} \Sigma(\vec{k}, \omega) \leq 0}. \quad (2.106)$$

2.7 Fonction de Green de Matsubara à température finie

2.7.1 Temps imaginaire

Nous allons voir que la fonction de Green de Matsubara, nécessaire à température finie, est une fonction de Green en temps imaginaire. Le temps imaginaire est un concept dérivé de la mécanique quantique qui, comme nous allons le voir, est essentiel pour connecter cette dernière à la physique statistique.

Techniquement, le temps imaginaire τ est obtenu à partir du temps réel t *via* une rotation de Wick de $\pi/2$ dans le plan complexe :

$$\tau = e^{i\frac{\pi}{2}}t \quad \Longleftrightarrow \quad \boxed{\tau = it} \quad \Longleftrightarrow \quad t = -i\tau. \quad (2.107)$$

Dans la pratique, le temps imaginaire dont dépendront les fonctions de Green à température finie sera en fait une *variable réelle*, malgré son nom. Ces fonctions de Green à température T seront périodiques en temps imaginaire, de période $2\beta = 2/T$, ce qui imposera que leurs transformées de Fourier ne contiendront qu'un ensemble discret de fréquences appelées *fréquences de Matsubara*. C'est alors uniquement lors d'un prolongement analytique sur ces fréquences, destiné à relier ces fonctions de Green aux fonctions de Green en fréquences réelles, que la rotation de Wick réapparaîtra. Attention, l'usage veut que l'on considère $\hbar \equiv 1$ et $k_B \equiv 1$. Si on regarde la relation $\hbar\omega \equiv k_B T = 1/\beta$, on se rend alors compte que prendre les constantes fondamentales égales à 1 revient à prendre β comme étant homogène à un temps.

La meilleure façon de voir la connexion entre la mécanique quantique et la physique statistique est de considérer l'amplitude de transition $\langle F | e^{-i\hat{H}t} | I \rangle$ entre un état initial I et un état final F . On peut alors comparer cette amplitude avec la fonction de partition $\mathcal{Z} = \text{Tr } e^{-\beta\hat{H}}$. On voit que pour obtenir la fonction de partition à partir de l'amplitude de transition, il suffit de remplacer t par $-i\beta$, poser $F = I$, et sommer sur ces différents états. On a ainsi la possibilité de faire d'une pierre deux coups en évaluant à la fois les propriétés statistiques et les amplitudes de transition.

Aussi, dans le cadre de la représentation d'interaction, l'opérateur d'évolution Eq.(2.22) s'écrit en temps imaginaire comme

$$\hat{\mathcal{U}}_I(\tau) = \hat{\mathcal{T}}_\tau e^{-\int_0^\tau \hat{\mathcal{H}}_{int}(\tau') d\tau'} \quad (2.108)$$

où $\hat{\mathcal{T}}_\tau$ est l'opérateur d'ordonnancement chronologique Eq.(2.17) en temps imaginaire. Ainsi, l'équation Eq.(2.9) donne

$$e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}} = e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}_0} \hat{\mathcal{U}}_I(\tau) = \hat{\mathcal{T}}_\tau e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}_0} e^{-\int_0^\tau \hat{\mathcal{H}}_{int}(\tau') d\tau'}. \quad (2.109)$$

2.7.2 Fonction de Green de Matsubara fermionique

La fonction de Green de Matsubara est une fonction de Green en temps imaginaire que l'on définit comme

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau, \tau') = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}(\vec{r}, \tau) \hat{c}^\dagger(\vec{r}', \tau') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (2.110)$$

où on utilise toujours la moyenne thermodynamique Eq.(2.79) et où la dépendance en temps imaginaire des opérateurs est donnée par

$$\hat{c}^{(\dagger)}(\vec{r}, \tau) = e^{\hat{\mathcal{H}}\tau} \hat{c}^{(\dagger)}(\vec{r}) e^{-\hat{\mathcal{H}}\tau}. \quad (2.111)$$

Une petite remarque technique à noter est que l'opérateur $\hat{c}^\dagger(\vec{r}, \tau)$ n'est pas le conjugué hermitique de $\hat{c}(\vec{r}, \tau)$ car

$$\begin{aligned} [\hat{c}(\vec{r}, \tau)]^\dagger &= \left[e^{\hat{\mathcal{H}}\tau} \hat{c}(\vec{r}) e^{-\hat{\mathcal{H}}\tau} \right]^\dagger \\ &= \left[e^{-\hat{\mathcal{H}}\tau} \right]^\dagger \hat{c}^\dagger(\vec{r}) \left[e^{\hat{\mathcal{H}}\tau} \right]^\dagger \\ &= e^{-\hat{\mathcal{H}}\tau} \hat{c}^\dagger(\vec{r}) e^{\hat{\mathcal{H}}\tau} \\ &= \hat{c}^\dagger(\vec{r}, -\tau). \end{aligned} \quad (2.112)$$

Cette fonction de Green pourrait paraître anodine et semble apporter peu de choses par rapport à ce que nous avons étudié avant. Cependant, nous avons vu

dans la section précédente que l'utilisation du temps imaginaire permet de regarder sur un pied d'égalité les aspects quantiques et statistiques du problème. Par ailleurs, bien que ce soit hors sujet ici, la fonction de Green de Matsubara rend possible un traitement du problème à température finie en termes de diagrammes de Feynman. Autrement dit, elle permet de traiter le problème en ne considérant que certains types d'interactions et en les combinant de différentes façons, de la même façon qu'à l'équation Eq.(2.104).

2.7.3 β -antipériodicité et fréquences de Matsubara fermioniques

Considérons un système invariant par translation dans le temps, où tout ne va dépendre que de $\tau - \tau'$, et prenons le temps de référence $\tau' = 0$ et $\tau \in] -\beta, 0[$. On peut alors écrire

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}(\vec{r}, \tau) \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \left\langle \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \hat{c}(\vec{r}, \tau) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (2.113)$$

pour assurer le bon ordre chronologique. On a

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) &= \mathcal{Z}^{-1} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \hat{c}(\vec{r}, \tau) \right] \\ &= \mathcal{Z}^{-1} \text{Tr} \left[\hat{c}(\vec{r}, \tau) e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \right] \\ &= \mathcal{Z}^{-1} \text{Tr} \left[\left(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} e^{\beta \hat{\mathcal{H}}} \right) \left(e^{\tau \hat{\mathcal{H}}} \hat{c}(\vec{r}) e^{-\tau \hat{\mathcal{H}}} \right) e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \right] \\ &= \mathcal{Z}^{-1} \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \left(e^{(\tau+\beta) \hat{\mathcal{H}}} \hat{c}(\vec{r}) e^{-(\tau+\beta) \hat{\mathcal{H}}} \right) \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \right] \\ &= \left\langle \hat{c}(\vec{r}, \tau + \beta) \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} . \end{aligned} \quad (2.114)$$

Or, $-\beta < \tau$ donc $\tau + \beta > 0$ et

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = - \left[- \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}(\vec{r}, \tau + \beta) \hat{c}^\dagger(\vec{r}', 0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \right] \quad (2.115)$$

car les opérateurs sont déjà dans le bon ordre chronologique. On a alors

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = -\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau + \beta) . \quad (2.116)$$

On pourrait procéder de manière similaire avec $\tau > 0$ pour finalement trouver les *conditions aux frontières de Kubo-Martin-Schwinger* :

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = \begin{cases} -\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau - \beta) & \text{si } \tau \in]0, \beta[\\ -\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau + \beta) & \text{si } \tau \in]-\beta, 0[\end{cases}. \quad (2.117)$$

La fonction de Green de Matsubara est donc *antipériodique* de période β , et le temps τ n'aura besoin d'être considéré que sur l'intervalle $]0, \beta[$.

Comme toute fonction possédant des propriétés de périodicité (ou d'antipériodicité ici), il est possible d'écrire la fonction de Green de Matsubara sous la forme d'une série de Fourier contenant un ensemble discret de fréquences :

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', i\omega_n) \quad (2.118)$$

où

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (2.119)$$

sont les *fréquences de Matsubara fermioniques*. Les équations d'antipériodicité Eq.(2.117) sont satisfaites car

$$e^{\pm i\omega_n \beta} = -1 \quad (2.120)$$

et les coefficients de Fourier sont obtenus comme d'habitude :

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', i\omega_n) = \int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', \tau) d\tau. \quad (2.121)$$

2.7.4 Prolongement analytique

Il est possible de démontrer des relations pour la fonction de Green de Matsubara $\mathcal{G}$ très similaires aux équations précédemment vues pour la fonction de Green

retardée G^R . Nous avons entre autres la fonction de Green libre de Matsubara

$$\mathcal{G}_0(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}}} \quad (2.122)$$

similaire à l'équation Eq.(2.76), la fonction de Green de Matsubara en interaction

$$\mathcal{G}_{int}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)} \quad (2.123)$$

similaire à l'équation Eq.(2.123), et la représentation spectrale pour la fonction de Green de Matsubara

$$\mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\vec{k}, \omega')}{i\omega_n - \omega'} \quad (2.124)$$

similaire à l'équation Eq.(2.90). En comparant ces équations, il est alors possible de trouver un lien fort entre la fonction de Green retardée G^R et la fonction de Green de Matsubara par *prolongement analytique* :

$$G^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', i\omega_n) , \quad (2.125)$$

$$G^R(\vec{k}, \omega) = \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) . \quad (2.126)$$

Attention cependant, cette façon de faire le prolongement analytique n'est vraie que lorsque la fonction de Green de Matsubara est écrite comme une fraction rationnelle analytique dans le demi-plan complexe supérieur (on s'en rendrait compte en faisant le détail des calculs dans la représentation de Lehmann). Nous verrons dans la section Sec.3.7 comment le prolongement analytique peut être réalisé dans le cadre de simulations numériques, où nous n'avons pas d'expression analytique pour les fonctions de Green mais seulement des valeurs numériques le long de l'axe imaginaire des fréquences de Matsubara.

2.8 Modèle de Hubbard

2.8.1 Hamiltonien de Hubbard

Nous verrons dans le chapitre Chap.4 qu'il est de nos jours nécessaire de s'intéresser à un modèle permettant de décrire la compétition entre l'énergie cinétique et l'énergie potentielle due à l'interaction coulombienne dans les solides. C'est ainsi que le *modèle de Hubbard*, permettant de décrire une telle compétition, est développé en 1963 par J. Hubbard, M. C. Gutzwiller, et J. Kanamori [1–3]. Ce modèle marque le début de la *physique théorique des électrons fortement corrélés* : une physique nouvelle émerge de l'effet des interactions entre particules.

Nous allons ici définir l'opérateur de création $\hat{c}_{i\sigma\nu}^\dagger$ pour un électron de spin σ , sur le site i d'un réseau cristallin, appartenant à la bande ν grâce à un changement de base sur l'opérateur $\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})$ via l'équation Eq.(2.35) :

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = \sum_{i,\nu} \hat{c}_{i\sigma\nu}^\dagger \langle i, \nu | \vec{r} \rangle. \quad (2.127)$$

Restreignons-nous au cas à une seule bande, de sorte que la dépendance en ν disparaisse. Par ailleurs, nous verrons plus tard que les cuprates peuvent être considérés comme étant des matériaux ne possédant qu'une bande électronique de façon effective.

On peut alors écrire un hamiltonien grand-canonique composé d'un terme de saut (décrivant la capacité d'un électron à se mouvoir dans le réseau cristallin) et d'un terme d'interaction coulombienne :

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,j,\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger t_{ij} \hat{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{i,j,k,l} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \langle i | \langle j | \hat{V}_{Coulomb} | k \rangle | l \rangle \hat{c}_{l\sigma'} \hat{c}_{k\sigma} - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (2.128)$$

où $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i\sigma}$ avec $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$, l'opérateur nombre pour l'état $|i, \sigma\rangle$. Ainsi, $\sum_i \hat{n}_i = \hat{N}$, l'opérateur donnant le nombre total d'électrons. Le terme

$$t_{ij} = \langle i | \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \right) | j \rangle \quad (2.129)$$

est l'élément (i, j) de la matrice de saut (obtenu *via* des calculs de structure de bande électronique) et $\hat{V}_{Coulomb}$ est l'opérateur d'interaction coulombienne. Pour obtenir le modèle de Hubbard traditionnel, on se limite au terme de saut aux premiers voisins $t_{\langle i, j \rangle} = -t$ et à l'interaction coulombienne purement locale $\langle i | \langle i | \hat{V}_{Coulomb} | i \rangle | i \rangle = U$:

$$\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard} = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + c.h \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \left(\mu - \frac{U}{2} \right) \sum_i \hat{n}_i \quad (2.130)$$

où l'abréviation *c.h.* désigne le conjugué hermitique. Dans le cadre des programmes informatiques que nous verrons au chapitre Chap.3, le potentiel chimique considéré est $\mu - U/2$. En choisissant ce terme comme nouvelle définition du potentiel chimique μ , on obtient

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard} = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + c.h \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_i \hat{n}_i} \quad (2.131)$$

Ce modèle est illustré à la figure Fig.2.3.

Si on se place dans la limite $t = 0$, on est dans la limite atomique où les électrons sont complètement localisés et où l'état du système est alors $\hat{c}_{i_1, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{i_2, \sigma_2}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N, \sigma_N}^\dagger |0\rangle$. Par contre, si on se place dans la limite $U = 0$, on est dans le cas sans interaction où les électrons sont complètement délocalisés et où l'état du système est alors un ensemble d'ondes planes $\hat{c}_{k_1, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{k_2, \sigma_2}^\dagger \dots \hat{c}_{k_N, \sigma_N}^\dagger |0\rangle$. Dans tout autre cas, l'état du système est un *enchevêtrement* de ces deux états fondamentaux, ce qui rend les choses bien plus compliquées !

2.8.2 Demi-remplissage et symétrie particule-trou éventuelle

Nous verrons également dans le chapitre Chap.4 qu'un cas particulièrement intéressant réside dans les matériaux fortement corrélés à demi-remplissage (ou encore, à dopage nul), ce qui signifie qu'il y a en moyenne un électron (et donc un trou) par site du réseau cristallin. Rajouter plus d'électrons reviendrait autrement à doper le système en électrons tandis qu'en enlever reviendrait à doper le système en trous.

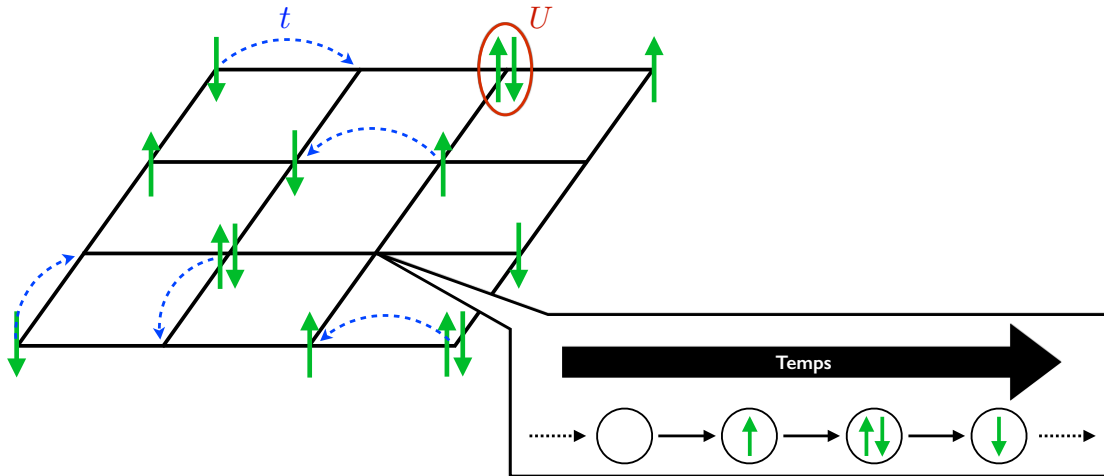


FIGURE 2.3 Illustration du modèle de Hubbard. Les électrons, qui ont une masse, une charge négative, et un spin ($\uparrow$ ou $\downarrow$), se meuvent d'un site du réseau à un site premier voisin avec l'amplitude de saut t . La dynamique quantique mène alors à des fluctuations dans l'occupation des sites du réseau, comme indiqué par la séquence en temps. Quand deux électrons se rencontrent sur un site du réseau (seulement possible s'ils ont des spins différents d'après le principe d'exclusion de Pauli), ils subissent la répulsion U . Un site peut alors être soit vide, simplement occupé ($\uparrow$ ou $\downarrow$), ou doublement occupé. La taille de l'espace de Hilbert croît donc comme 4^N .

Pour tout réseau bipartite (qui peut être considéré comme l'emboîtement de 2 sous-réseaux, comme le réseau carré ou le réseau en nid d'abeille) où on ne prend en compte que le saut au premier voisin t , le hamiltonien du système demi-rempli est invariant sous l'échange particule-trou $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \rightsquigarrow \hat{c}_{i-\sigma}$ et $\hat{c}_{i\sigma} \rightsquigarrow \hat{c}_{i-\sigma}^\dagger$, et c'est bien sûr la quantité conjuguée du nombre d'électrons, soit le potentiel chimique μ , qui détermine le remplissage en électrons du système. On peut ainsi montrer que l'invariance sous l'échange particule-trou du hamiltonien Eq.(2.131) donne tout simplement la condition de demi-remplissage $\mu = U/2$. Dans les autres cas, comme le réseau triangulaire ou le réseau triangulaire anisotrope (un réseau carré avec un terme de saut diagonal t'), c'est au programme informatique de chercher la bonne valeur du potentiel chimique μ donnant un système demi-rempli.

2.8.3 Modèle t - J

Lorsque l'interaction coulombienne locale entre électrons est très forte ($U \gg t$), il devient possible d'obtenir un autre type de modèle à partir du modèle de Hubbard : le modèle t - J . L'hamiltonien associé, spécialement conçu pour traiter le cas du modèle de Hubbard où U est tellement grand qu'il devient impossible d'occuper doublement un site du réseau cristallin, découle de la théorie des perturbations dégénérées au second ordre en $t/U \ll 1$ et s'écrit comme suit :

$$\hat{\mathcal{H}}_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \hat{P} \left(\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + c.h \right) \hat{P} + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right). \quad (2.132)$$

L'opérateur

$$\hat{P} = \prod_{i=1}^N (1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (2.133)$$

donne 0 s'il est appliqué à un état doublement occupé. Le terme

$$J = \frac{4t^2}{U} \quad (2.134)$$

est la constante de super-échange antiferromagnétique caractérisant les interactions entre spins dans le modèle t - J . L'opérateur de spin 1/2 au site i , $\hat{\vec{S}}_i$, possède trois composantes :

$$\hat{S}_i^{\gamma} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \hat{c}_{i\alpha}^{\dagger} \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma} \hat{c}_{i\beta} \quad (2.135)$$

où $\gamma \equiv x, y, z$, et $\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}$ est le terme de la matrice de Pauli γ correspondant aux indices de spin α et β .

Le super-échange $J = 4t^2/U$ sera d'une importance cruciale dans le chapitre Chap.8 étudiant les effets de l'interaction coulombienne aux premiers voisins sur la supraconductivité non conventionnelle!

2.9 Impureté quantique et fonction d'hybridation

Considérons le hamiltonien décrivant le couplage entre un état $|d\rangle$ et un ensemble d'états $|\vec{k}\rangle$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \varepsilon_d \hat{d}^\dagger \hat{d} + \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} - t \sum_{\vec{k}} \left(\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{d} + c.h. \right) \quad (2.136)$$

où l'opérateur $\hat{d}$ ($\hat{d}^\dagger$) détruit (crée) un électron sur le niveau unique appelé *impureté quantique* tandis que l'opérateur $\hat{c}$ ($\hat{c}^\dagger$) détruit (crée) un électron dans le continuum appelé *bain d'électrons libres*. Nous allons chercher à calculer la fonction de Green de Matsubara pour le niveau unique $\mathcal{G}_d(i\omega_n)$, définie à partir de

$$\mathcal{G}_d(\tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{d}(\tau) \hat{d}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (2.137)$$

en nous basant sur le fait que la fonction de Green de Matsubara est en général une matrice :

$$\mathcal{G}(i\omega_n) = (i\omega_n - H)^{-1} \quad (2.138)$$

où la matrice identité est omise pour alléger l'écriture et où H est la matrice associée au hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ (on peut comprendre cette forme par analogie avec l'équation Eq.(2.122)). Cette matrice H peut s'écrire comme

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_d & -t & \cdots & -t \\ -t & \varepsilon_{\vec{k}_1} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -t & 0 & & \varepsilon_{\vec{k}_N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (2.139)$$

où $A = \varepsilon_d$, $B = (-t \cdots -t)$, C est le même vecteur que B mais en colonne, et D est la matrice diagonale dont les énergies $\varepsilon_{\vec{k}_i}$ sont les termes diagonaux. Calculons l'inverse de cette matrice en s'intéressant particulièrement au terme qui va prendre la place de A car celui-ci correspond au terme diagonal couplant le niveau $|d\rangle$ avec lui-même (et donc à $\mathcal{G}_d$). On peut montrer assez facilement que ce terme va s'écrire

$(A - BD^{-1}C)^{-1}$ avec

$$\begin{aligned}
 (A - BD^{-1}C)^{-1} &= \left[\varepsilon_d - t^2(1 \cdots 1) \begin{pmatrix} 1/\varepsilon_{\vec{k}_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1/\varepsilon_{\vec{k}_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \right]^{-1} \\
 &= \left[\varepsilon_d - t^2 \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}}} \right]^{-1}. \tag{2.140}
 \end{aligned}$$

Par contre, c'est vraiment l'inverse de $i\omega_n - H$ et pas juste l'inverse de H qui nous intéresse, il faut donc remplacer $\varepsilon_{d/\vec{k}}$ par $i\omega_n - \varepsilon_{d/\vec{k}}$ dans l'expression que nous venons de trouver afin d'obtenir la fonction de Green de Matsubara sur le niveau $|d\rangle$:

$$\mathcal{G}_d(i\omega_n) = \left[i\omega_n - \varepsilon_d - t^2 \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}}} \right]^{-1} = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_d - t^2 \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}}}}. \tag{2.141}$$

Par prolongement analytique, on obtient alors la fonction de Green retardée :

$$\boxed{G_d^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - t^2 \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + i\eta}}}. \tag{2.142}$$

La self-energy qui apparaît ici porte le nom plus particulier de *fonction d'hybridation* :

$$\boxed{\Gamma(\omega) = t^2 \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\vec{k}} + i\eta}}. \tag{2.143}$$

Cette fonction d'hybridation jouera un rôle crucial dans le cadre de la théorie de champ moyen dynamique (DMFT) de la section Sec.3.3 car elle prendra en compte le couplage entre l'impureté quantique et le bain d'électrons libres après intégration sur les degrés de liberté du bain, ne laissant alors effectivement que les degrés de liberté locaux de l'impureté. Cet aspect d'intégration sur les degrés de liberté du

bain est plus clair lorsqu'on écrit la fonction d'hybridation sous la forme suivante :

$$\Gamma(i\omega_n) = t^2 \sum_{\vec{k}} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \left[- \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{\vec{k}}(\tau) \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{bain}} \right] \quad (2.144)$$

où

$$\hat{\mathcal{H}}_{bain} = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} . \quad (2.145)$$

Résumé

Le problème à N corps fait partie des problèmes les plus complexes qui soient car il s'intéresse à système de plusieurs milliards de particules en interaction baignant dans un potentiel non homogène induit par les ions du réseau cristallin. Cependant, les outils mathématiques du problème à N corps permettent de s'y attaquer. L'objet de départ est la fonction de Green retardée à une particule, décrivant la création d'un électron dans le système, sa propagation dans ce système, et sa destruction à un temps ultérieur. Il est alors possible de sonder l'effet des interactions présentes dans le système à travers la self-energy apparaissant dans la fonction de Green. Plus généralement, la fonction spectrale, obtenue à partir de la partie imaginaire de la fonction de Green retardée, s'avère être un outil redoutable car elle traduit la distribution en énergie des états accessibles pour une particule de vecteur d'onde donné. À température finie, la fonction de Green retardée doit souvent être laissée de côté au profit de la fonction de Green de Matsubara. En effet, bien qu'elle soit une fonction du temps imaginaire ou des fréquences discrètes et imaginaires de Matsubara $i\omega_n$, elle assure un lien clair entre les aspects quantiques et statistiques du problème. Une fois la fonction de Green de Matsubara en fréquences de Matsubara calculée, il suffit d'opérer le prolongement analytique $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ (où η est un réel infinitésimal positif) pour retomber sur la fonction de Green retardée en fréquences réelles. Nous verrons par la suite que le prolongement analytique n'est pas toujours facile à faire numériquement, notamment quand il s'adresse à l'étude de la supraconductivité.

Maintenant, tous ces outils ne servent à rien s'ils ne sont pas appliqués à un modèle pertinent pour décrire la physique qui nous intéresse. Dans le cas des matériaux fortement corrélés, le modèle le plus simple pouvant décrire la compétition entre l'énergie cinétique et l'énergie coulombienne est le modèle de Hubbard. La limite de très forte interaction du modèle de Hubbard est le modèle t - J où les états possédant des sites doublement occupés sont interdits et où les électrons interagissent *via* la constante d'échange antiferromagnétique $J = 4t^2/U$.

Chapitre 3

La physique derrière l'informatique

Toute personne ayant de bonnes connaissances en matière de :

- théories de champ moyen dynamique ;
- Monte Carlo quantique en temps continu ;
- méthode d'entropie maximale ;

peut parfaitement sauter ce chapitre. Un guide pour le lancement des simulations est par ailleurs consultable dans l'annexe [Ann.G](#).

3.1 Le besoin en informatique de la physique

L'émergence de la physique numérique a marqué un tournant dans l'histoire de la physique. On peut dater cette naissance avec l'article très célèbre de Nicholas Metropolis, Arianna et Marshall Rosenbluth, et Augusta et Edward Teller [4]. Cet article, publié en 1953, a été cité plus de 12 000 fois. L'idée principale de cet article est qu'il n'est pas nécessaire d'énumérer exhaustivement le nombre gigantesque de configurations accessibles par le système afin de le simuler. Il suffit d'explorer un nombre relativement faible de configurations typiques, choisies au hasard, de façon à ce que leur distribution statistique soit, pour un grand nombre de tirages, la distribution d'équilibre du système : on parle d'*algorithme de Monte Carlo* (voir [5] pour une bonne introduction à cet algorithme, aussi discuté dans la section [Sec.3.6](#)).

La généralisation de cette méthode aux systèmes quantiques est possible : elle repose sur l'idée formulée par Richard Feynman dans un article, aussi publié en 1953, qui traitait de l'hélium 4 superfluide [6]. Il a montré comment considérer la fonction de partition d'un gaz quantique comme un ensemble de "lignes d'univers", c'est-à-dire des fonctions en temps imaginaire. Il s'agit en fait de ce que l'on appelle plus communément les intégrales de chemin de Feynman où l'on fait évoluer le système par tous les chemins possibles dans l'espace des paramètres, en leur assignant leurs poids statistiques respectifs. Ces intégrales de chemin peuvent être calculées numériquement : c'est le principe des *simulations Monte Carlo quantiques* (Quantum Monte Carlo ou QMC en anglais). Richard P. Feynman portait par ailleurs beaucoup d'intérêt à la naissance de la physique numérique, comme en témoigne le premier séminaire "Physics and Computation" qu'il a donné au Massachusetts Institute of Technology (MIT) en 1981. Il y propose même une vision très futuriste de l'ordinateur quantique !

Il faut noter qu'un certain scepticisme a régné durant plusieurs décennies quant à la contribution des simulations numériques à la physique (notamment en France). Heureusement, cette situation a grandement changé aujourd'hui. Les simulations numériques sont maintenant considérées comme de merveilleux outils de pensée, suggérant de nouvelles interprétations, apportant de nouvelles interrogations, permettant de tester des hypothèses au cours d'*expériences numériques* et représentant des concepts théoriques et des phénomènes physiques très directement. Par ailleurs, une simulation n'a pas à suivre la dynamique naturelle d'un système : elle peut l'accélérer et améliorer ainsi considérablement le traitement du problème (en coupant et reconnectant des lignes d'univers par exemple). On peut finalement noter que l'optimisation des algorithmes contribue plus à la rapidité des simulations que la puissance de calcul globale (qui suit la loi de Moore suivant laquelle le nombre de transistors dans un ordinateur est censé doubler tous les 18 mois environ). Pour résumer, l'approche numérique donne accès à une toute nouvelle façon de faire de la science.

3.2 Quelques approches théoriques envisageables

De nombreuses approches peuvent en théorie être utilisées pour étudier la physique des systèmes d'électrons fortement corrélés. Nous allons néanmoins voir qu'elles présentent toutes de graves désavantages pour les problèmes qui nous intéresseront par la suite, et qu'il sera donc nécessaire d'avoir recours à une théorie d'un genre nouveau : la *théorie de champ moyen dynamique*.

La diagonalisation exacte

Cette approche consiste à diagonaliser directement le hamiltonien du système pour en extraire les énergies propres [7], mais elle se retrouve très vite confrontée à la taille gigantesque de l'espace de Hilbert qui croît comme 4^N (où N est le nombre de sites du réseau cristallin).

Les méthodes variationnelles

Ces méthodes cherchent à minimiser l'énergie de l'état fondamental [8,9]

$$E_{|\psi\rangle} = \frac{\langle\psi|\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (3.1)$$

Cependant, elles requièrent de deviner à l'avance la forme de l'état fondamental $|\psi\rangle$, les rendant *a priori* peu fiables car très sensibles à la moindre erreur sur le choix initial pour $|\psi\rangle$.

Les approches de bosons et de fermions esclaves

Les approches de *bosons esclaves* [10–12] et de *fermions esclaves* [13,14] donnent naissance à des théories de champ moyen différentes pour un même hamiltonien de départ. Au sein de ces théories de champ moyen, des champs de jauge sont utilisés pour imposer des versions relaxées des contraintes exactes que devraient satisfaire les théories en général. Mais ces approches donnent des résultats bien différents pour un même hamiltonien de départ et manquent d'un principe variationnel permettant de trancher [15].

Les séries à haute température

Cette méthode cherche à résoudre le problème en faisant le développement suivant [16] :

$$e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} = 1 - \beta\hat{\mathcal{H}} + \dots \quad (3.2)$$

On se retrouve alors avec des soucis dans le régime de basse température qui demande un très grand nombre de termes dans la série précédente pour obtenir un résultat pertinent.

Le groupe de renormalisation pour la matrice densité

Cette technique, comme tout groupe de renormalisation, revient à intégrer les degrés de liberté du système sur les courtes longueurs d'onde pour ensuite renormaliser sa taille et ses interactions en vue de le rendre similaire au système de départ. Le gain vient ici du fait que le système est simplifié lors de l'intégration des détails associés aux courtes longueurs d'onde. La réitération de ce processus finit par apporter des informations sur la physique aux grandes longueurs d'onde du système étudié. Cette approche, très performante pour les systèmes *quasi* unidimensionnels [17, 18], se montre néanmoins inefficace pour des systèmes de dimension supérieure à 1. On peut aussi noter l'existence du groupe de renormalisation de Wilson pour les fermions [19–23], qui partage néanmoins les mêmes défauts que le groupe de renormalisation pour la matrice densité.

Le groupe de renormalisation fonctionnel

On peut chercher à améliorer le groupe de renormalisation pour la matrice densité en permettant aux interactions renormalisées de dépendre de tous les vecteurs d'onde, ce qui donne naissance au groupe de renormalisation fonctionnel [24]. Cependant, cette méthode ne permet pas d'obtenir la moindre physique de Mott à forte interaction, comme toute théorie de champ moyen traditionnelle.

La théorie auto-cohérente à deux particules

La *théorie auto-cohérente à deux particules* (Two-Particle Self-Consistent theory ou TPSC) est une approche non perturbative qui semble être la plus efficace pour traiter

les systèmes à interactions faibles ou intermédiaires [25–28]. Elle satisfait le principe de Pauli (sous la forme $\hat{n}^2 = \hat{n}$), les lois de conservation, un certain nombre de règles de somme (notamment celles concernant la susceptibilité de spin du moment magnétique local et la susceptibilité de charge de la charge locale), et surtout le théorème de Mermin-Wagner ! Malheureusement, cette approche ne permet pas d'obtenir de physique de Mott à forte interaction.

Méthode Monte Carlo quantique par déterminants

La *méthode Monte Carlo quantique par déterminants* (Determinant quantum Monte Carlo ou DQMC) est une méthode Monte Carlo quantique (voir section Sec.3.6) basée sur la transformation de Hubbard-Stratanovich et la décomposition de Trotter [29]. Cette décomposition induit malheureusement une erreur systématique de l'ordre de $\Delta\tau^2$ où $\Delta\tau$ est l'intervalle de temps imaginaire utilisé.

3.3 La théorie de champ moyen dynamique (DMFT)

Principe général

La structure théorique permettant de comprendre un grand nombre de matériaux est basée sur deux solides piliers : la théorie des bandes décrivant les états électroniques en termes de bandes d'énergie et la théorie de Landau des liquides de Fermi avec la notion de quasi-particules. Ces deux paradigmes définissent une sorte de "modèle standard" de la théorie quantique des solides. En décrivant des électrons soit localisés ou délocalisés sur un réseau, ces deux piliers ne peuvent pas traiter le passage d'un état électronique localisé à un état électronique itinérant. C'est là que la *théorie de champ moyen dynamique* (Dynamical Mean-Field Theory ou DMFT) entre en jeu.

La DMFT, développée en 1992 par Antoine Georges et Gabriel Kotliar [30] (et indépendamment par Mark Jarrell [31]), donne une importance centrale au fait que les solides sont avant tout faits d'atomes et qu'un atome isolé est déjà un petit problème à N -corps en soit qui doit être décrit correctement dès le départ. Au cœur de cette approche se trouve l'idée physique sous-jacente que la dynamique à un

site donné peut être pensée comme l'interaction des degrés de liberté locaux à ce site avec un bain externe créé par tous les autres degrés de liberté sur les autres sites, comme l'illustre la figure Fig.3.1. On représente alors la fonction spectrale locale du solide comme étant celle d'un atome baignant de façon auto-cohérente dans un bain effectif. Comme dans le cadre du modèle d'Ising, l'approximation de champ moyen devient exacte dans la limite où la coordinence du réseau devient très grande. Il est en effet assez intuitif que les voisins d'un site donné du réseau puissent être globalement traités comme un bain externe si leur nombre devient très grand. Il faut aussi que les fluctuations spatiales du champ moyen local deviennent négligeables pour valider cette approximation, ce qui est le cas à haute température ou en dimension infinie par exemple.

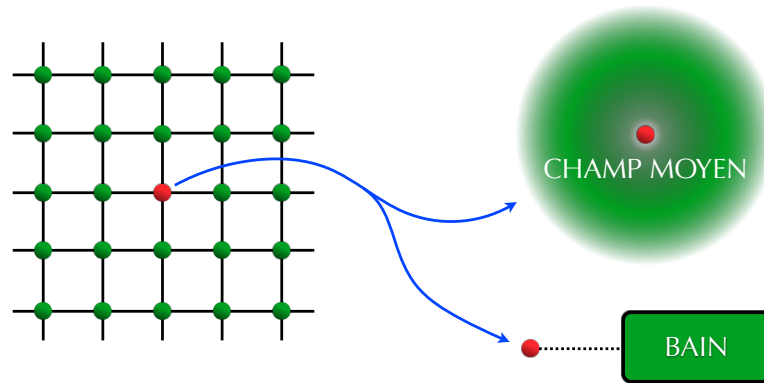


FIGURE 3.1 Illustration du concept de champ moyen. Les théories de champ moyen transforment un problème sur réseau en un problème effectif où un site est couplé à un bain de façon auto-cohérente.

Cette construction peut être étendue aux systèmes quantiques à N -corps. Les étapes clés ayant mené à cette généralisation quantique ont été l'introduction de la limite des grandes coordinences de réseau pour les modèles de fermions en interaction par Metzner et Vollhardt [32] et la cartographie de ce problème en un problème auto-cohérent d'impureté quantique par Georges et Kotliar [30], qui ont établi le cadre de travail de la DMFT (voir aussi [33] pour une liste de références).

La DMFT peut être utilisée pour étudier le problème à N -corps de particules quantiques en interaction en utilisant le modèle de Hubbard à une bande suivant

[30,34–36] :

$$\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard} = - \sum_{i,j,\sigma} \left(t_{ij} \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{j\sigma} + c.h \right) + U \sum_{i=1}^N \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + (\varepsilon_0 - \mu) \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \quad (3.3)$$

où $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{i\sigma}$. L'énergie ε_0 du niveau atomique à un électron a été introduite afin que le problème soit plus général. Naturellement, pour le cas à une bande, tout dépend uniquement de l'énergie $\varepsilon_0 - \mu$ par rapport au potentiel chimique global et on pourrait ainsi poser $\varepsilon_0 = 0$.

La quantité physique sur laquelle la DMFT se focalise est la *fonction de Green locale* à un site i donné du réseau :

$$\mathcal{G}_{loc}^\sigma(\tau - \tau') = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{d}_{i\sigma}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}}. \quad (3.4)$$

Dans la théorie de champ moyen du modèle classique d'Ising, l'aimantation locale est représentée comme celle d'un spin au site i couplé à un champ de Weiss effectif. De manière complètement analogue, nous allons introduire une représentation de la fonction de Green locale comme étant celle d'un atome unique couplé à un champ de Weiss quantique. En reprenant les notations des opérateurs de la sous-section Sous-Sec.2.9, on introduit le *modèle d'impureté d'Anderson* (Anderson Impurity Model ou AIM)

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_{AIM} = \hat{\mathcal{H}}_{imp} + \hat{\mathcal{H}}_{bain} + \hat{\mathcal{H}}_{couplage}} \quad (3.5)$$

au sein duquel

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{imp} &= (\varepsilon_0 - \mu)(n_\uparrow + n_\downarrow) + U n_\uparrow n_\downarrow \\ \hat{\mathcal{H}}_{bain} &= \sum_{\nu, \vec{k}, \sigma} \varepsilon_{\nu \vec{k}}^{bain} \hat{c}_{\nu \vec{k} \sigma}^\dagger \hat{c}_{\nu \vec{k} \sigma} \\ \hat{\mathcal{H}}_{couplage} &= \sum_{\nu, \vec{k}, \sigma} \left(V_{\nu \vec{k} \sigma} \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{\nu \vec{k} \sigma} + c.h \right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

où ν est l'indice de bande. $\hat{c}_{\nu \vec{k} \sigma}^{(\dagger)} / \hat{d}_{i\sigma}^{(\dagger)}$ est l'opérateur d'annihilation (création) des électrons libres dans le bain / sur le site isolé. En commençant à partir d'un hamiltonien général, on sépare les degrés de liberté atomiques d'un site du réseau appelé *impureté*, décrits par $\hat{\mathcal{H}}_{imp}$, des degrés de liberté restants, traités comme un

bain d'électrons libres de niveaux d'énergie $\varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{bain}$. Les électrons peuvent sauter dans le site ou s'en retirer *via* l'hybridation $V_{\vec{k}\sigma}$ entre l'atome ($\hat{d}_\sigma$) et le bain d'électrons ($\hat{c}_{\vec{k}\sigma}$).

Ce modèle sert de système de référence pour le modèle de Hubbard car il donne la fonction de Green locale exacte en DMFT lorsque les paramètres $\varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{bain}$ et $V_{\vec{k}\sigma}$ remplissent une condition d'auto-cohérence : ils doivent être choisis de façon à ce que la fonction de Green de l'impureté du modèle d'Anderson

$$\mathcal{G}_{imp}^\sigma(\tau - \tau') = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}} \quad (3.7)$$

coïncide avec la fonction de Green locale du modèle de Hubbard

$$\mathcal{G}_{loc}^\sigma(\tau - \tau') = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{d}_{i\sigma}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}} \quad (3.8)$$

pour tout site i . Par ailleurs, il fournit la description mathématique de la physique présentée à la figure Fig.3.2.

Les paramètres $\varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{bain}$ et $V_{\vec{k}\sigma}$ entrent en compte seulement à travers la *fonction d'hybridation* en fréquences de Matsubara fermioniques (également appelée *champ de Weiss quantique*)

$$\Gamma(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{|V_{\vec{k}\sigma}|^2}{i\omega_n - \varepsilon_{\vec{k}\sigma}^{bain}} \quad (3.9)$$

rencontrée à la sous-section Sous-Sec.2.9 où nous avons traité le problème présent, sans interaction. Pour l'instant, nous avons introduit la généralisation quantique du champ de Weiss effectif et avons représenté la fonction de Green locale $\mathcal{G}_{loc}^\sigma$ comme étant celle d'un atome couplé à un bain effectif. Nous devons maintenant généraliser l'approximation de champ moyen au cas quantique en reliant le champ de Weiss qu'est la fonction d'hybridation Γ à la fonction de Green locale $\mathcal{G}_{loc}^\sigma$.

Notons

$$\mathcal{G}_0^\sigma(\tau - \tau') = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{bain} + \hat{\mathcal{H}}_{couplage}} \quad (3.10)$$

la fonction de Green libre intégrée sur les degrés de liberté du bain effectif (analogue en temps imaginaire de la fonction de Green de l'équation Eq.(2.142)) et laissons

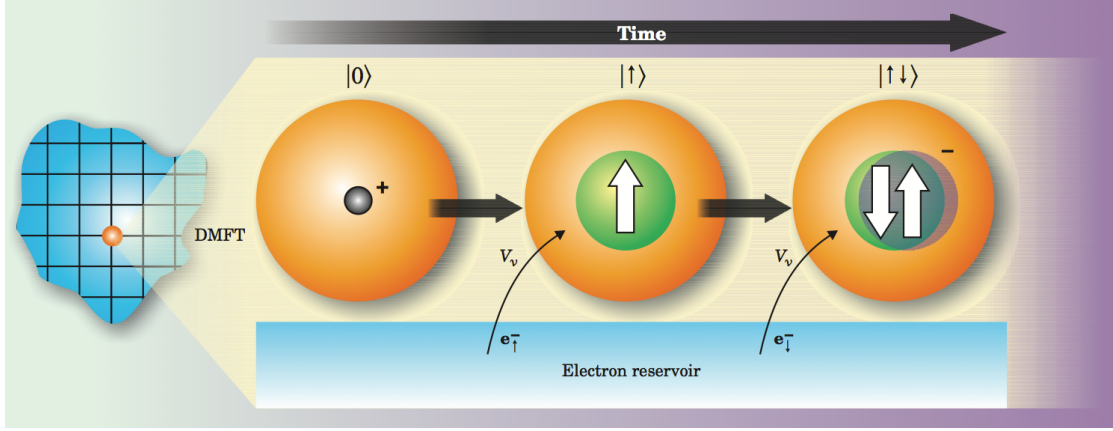


FIGURE 3.2 Illustration de la DMFT. La DMFT remplace le réseau cristallin d'atomes par un seul atome appelé "impureté" couplé à un bain d'électrons libres. L'approximation de champ moyen capture la dynamique des électrons sur un atome central (en orange) alors qu'il fluctue entre différentes configurations atomiques, montrées ici comme des instantanés en temps. Dans le cas le plus simple d'une orbitale s , les fluctuations font passer l'atome par les états $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle$, qui réfèrent à un état inoccupé, un état avec un seul spin up ou un seul spin down, et un état doublement occupé avec des spins opposés, respectivement. Dans cette illustration d'une séquence possible impliquant deux transitions, un atome dans l'état vide absorbe un électron du réservoir environnant à chaque transition. L'hybridation V_v est l'amplitude quantique de saut d'un électron du bain à l'atome. Figure tirée de [37].

de côté le spin pour alléger la notation. On peut alors définir une self-energy locale (ou self-energy de l'impureté) en fonction des fréquences de Matsubara à partir de l'équation de Dyson suivante :

$$\begin{aligned}\Sigma_{imp}(i\omega_n) &= \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{imp}^{-1}(i\omega_n) \\ &= i\omega_n - (\varepsilon_0 - \mu) - \Gamma(i\omega_n) - \mathcal{G}_{imp}^{-1}(i\omega_n).\end{aligned}\quad (3.11)$$

Considérons maintenant la self-energy du réseau originel, définie à partir de la transformée de Fourier de la fonction de Green du réseau complet $\mathcal{G}_{ij}(\tau - \tau') = -\langle \hat{T}_\tau \hat{d}_i(\tau) \hat{d}_j^\dagger(\tau') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}}$ par :

$$\mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_0 - \mu) - t_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)} \quad (3.12)$$

où $t_{\vec{k}}$ est la transformée de Fourier des éléments de la matrice de saut, soit la relation de dispersion de la bande sans interaction dans l'approximation des liaisons fortes

$$t_{\vec{k}} = \sum_{i,j} t_{ij} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}. \quad (3.13)$$

On fait alors l'approximation (exacte en dimension infinie) que la self-energy du réseau coïncide avec la self-energy de l'impureté :

$$\boxed{\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) \simeq \Sigma_{imp}(i\omega_n)}. \quad (3.14)$$

La self-energy est alors vue comme étant locale dans l'espace réel, donc indépendante de $\vec{k}$. Cette approximation pose les limites de la DMFT, pleinement détaillées dans [38]. *Grosso modo*, l'approximation Eq.(3.14) est un bon point de départ lorsque les corrélations spatiales sont de courte portée, ce qui est favorisé par les conditions suivantes : haute température, haute énergie, fort dopage, grand nombre de degrés de liberté fluctuant en compétition les uns avec les autres, grande dégénérescence orbitale ou grand degré de frustration magnétique.

Avec l'approximation locale Eq.(3.14), la somme sur les vecteurs $\vec{k}$ de la fonction de Green Eq.(3.12) donne :

$$\mathcal{G}_{loc}(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) \simeq \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_0 - \mu) - t_{\vec{k}} - \Sigma_{imp}(i\omega_n)}. \quad (3.15)$$

On compare alors cette fonction de Green du réseau projetée sur un site avec la fonction de Green de l'impureté. Nous sommes censés avoir $\mathcal{G}_{loc}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{imp}(i\omega_n)$ pour qu'une relation d'auto-cohérence soit satisfaite. En effet, si cette condition est vérifiée, les équations Eq.(3.11) et Eq.(3.15) permettent alors d'obtenir la relation d'auto-cohérence :

$$\boxed{\mathcal{G}_{loc}(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\Gamma(i\omega_n) + \mathcal{G}_{loc}^{-1}(i\omega_n) - t_{\vec{k}}}}. \quad (3.16)$$

Une relation d'auto-cohérence analogue à celle qu'on aurait trouvée pour l'aimantation locale du modèle d'Ising apparaît dans le cadre de la DMFT, renforçant la forte analogie entre la construction d'un champ moyen classique et sa contre partie

quantique et dynamique.

Implémentation itérative

Considérons le passage de l'itération p à l'itération $p + 1$ dans le programme informatique :

- 1) On part de la fonction d'hybridation de l'étape p , $\Gamma_{[p]}(i\omega_n)$, pour avoir la fonction de Green libre du bain effectif *via*

$$\mathcal{G}_{0[p]}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n - (\varepsilon_0 - \mu) - \Gamma_{[p]}(i\omega_n).$$

- 2) La fonction de Green de l'impureté $\mathcal{G}_{imp[p]}(i\omega_n)$ est alors calculée en utilisant un *solutionneur d'impureté* approprié pour le modèle d'impureté (voir section Sec.3.6).

- 3) On obtient ainsi la self-energy de l'impureté :

$$\Sigma_{imp[p]}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{0[p]}^{-1}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{imp[p]}^{-1}(i\omega_n).$$

- 4) On utilise cette self-energy pour obtenir la fonction de Green locale du modèle de réseau *via*

$$\mathcal{G}_{loc[p]}(i\omega_n) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n - (\varepsilon_0 - \mu) - t_{\vec{k}} - \Sigma_{imp[p]}(i\omega_n)}.$$

- 5) Arrive alors la relation d'auto-cohérence :

$$\text{si } \mathcal{G}_{loc[p]}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{imp[p]}(i\omega_n) > \varepsilon,$$

où ε est une certaine tolérance à l'erreur, on définit une nouvelle fonction de Green libre du bain effectif $\mathcal{G}_{0[p+1]}(i\omega_n)$ ainsi qu'une nouvelle fonction d'hybridation $\Gamma_{[p+1]}(i\omega_n)$ *via*

$$\mathcal{G}_{0[p+1]}^{-1}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{loc[p]}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{imp[p]}(i\omega_n)$$

et

$$\Gamma_{[p+1]}(i\omega_n) = i\omega_n - (\varepsilon_0 - \mu) - \mathcal{G}_{0[p+1]}^{-1}(i\omega_n).$$

- 6) Ces nouvelles fonctions mises à jour (retour à l'étape 1) sont injectées dans le solveur d'impureté (étape 2). La procédure complète est itérée jusqu'à ce que le nombre d'itérations maximal ou le temps de calcul maximal imposé par l'utilisateur soit dépassé, ou jusqu'à ce qu'un certain critère de convergence sur la différence entre les fonctions d'hybridation à l'étape p et à l'étape $p + 1$ soit atteint.

Dans de nombreux cas, la procédure itérative converge vers une unique solution quel que soit le choix initial pour $\Gamma(i\omega_n)$. Dans quelques cas cependant, plus d'une solution stable peut être trouvée (dans la région de coexistence d'une transition du premier ordre comme la transition de Mott que nous verrons dans le chapitre suivant par exemple [39]).

3.4 La théorie de champ moyen dynamique cellulaire (CDMFT)

Les théories d'amas quantiques approximent le problème sur réseau avec de nombreux degrés de liberté par un problème où un *amas* (clusters en anglais), possédant moins de degrés de liberté, est couplé à un bain effectif créé à partir des degrés de liberté restants [40, 41]. L'approximation faite est alors similaire à celle de la DMFT, bien que moins restrictive, car on ne néglige que les corrélations dont la portée excède la taille de l'amas. Contrairement à la DMFT, on prend donc tout de même en compte les corrélations dont la portée est de l'ordre de la taille de l'amas. Ainsi, plus l'amas est grand, plus les simulations deviennent réalistes !

Avant de nous aventurer plus loin, il faut impérativement mettre en place un système de notation pour nous repérer dans ce problème d'amas. Prenons la distance entre deux sites premiers voisins comme notre unité de longueur et divisons le réseau de dimension d de N sites en un ensemble d'amas de taille finie. Chacun de ces amas contient N_c sites et a une taille linéaire L_c de manière à ce que $N_c = L_c^d$. Les groupes de N_c sites dans l'espace réel sont appelés des *amas* tandis que leurs équivalents dans l'espace réciproque sont appelés des *cellules*. La notation choisie est illustrée à la figure Fig.3.3 pour $d = 2$ et $N_c = 4$ sites par amas. On utilise la coordonnée $\vec{x}$

pour repérer l'origine des amas et $\vec{X}$ pour repérer les N_c sites au sein d'un amas. Les points $\vec{x}$ forment un super-réseau avec un espace réciproque $\vec{k}$. L'espace réciproque correspondant aux sites $\vec{X}$ au sein d'un amas sera construit par les vecteurs $\vec{K}$. Les vecteurs position dans l'espace réel sont donc donnés par $\vec{X} + \vec{x}$ tandis que les vecteurs d'onde dans la première zone de Brillouin sont donnés par $\vec{K} + \vec{k}$.

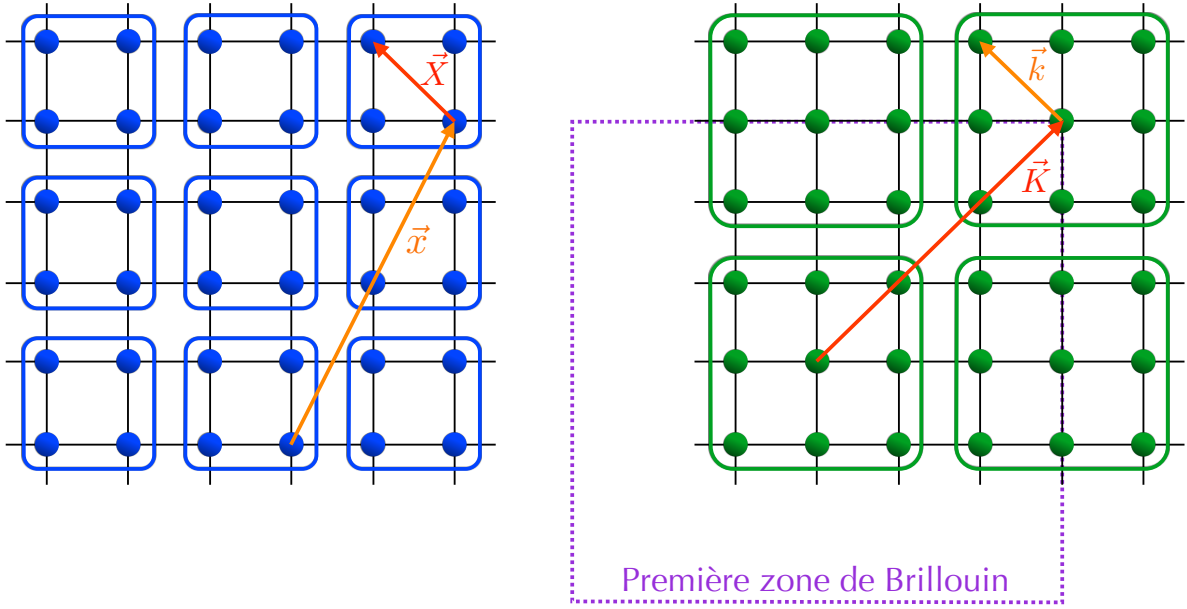


FIGURE 3.3 Définition des coordonnées dans l'espace réel (en bleu) et dans l'espace réciproque (en vert) illustrée pour des amas de $N_c = 4$ sites. L'origine de l'amas est repérée par $\vec{x}$, les sites au sein d'un amas sont repérés par $\vec{X}$. Le réseau réciproque de $\vec{X}$ est repéré par $\vec{K}$. Les vecteurs d'onde du super-réseau, au sein d'une cellule, sont repérés par $\vec{k}$. Figure inspirée de [41].

Afin de séparer les degrés de liberté de l'amas des autres, l'amplitude de saut $t(\vec{x})$ et la self-energy $\Sigma(\vec{x}, i\omega_n)$ sont divisées en parties *intra-amas* et *inter-amas* :

$$t(\vec{x}_i - \vec{x}_j) = t_c \delta_{\vec{x}_i \vec{x}_j} + \delta t(\vec{x}_i - \vec{x}_j), \quad (3.17)$$

$$\Sigma(\vec{x}_i - \vec{x}_j, i\omega_n) = \Sigma_c(i\omega_n) \delta_{\vec{x}_i \vec{x}_j} + \delta \Sigma(\vec{x}_i - \vec{x}_j, i\omega_n). \quad (3.18)$$

En négligeant le spin, toutes ces quantités sont des matrices $N_c \times N_c$ dans la base

des sites de l'amas. Ici,

$$t_c = t(\vec{x} = \vec{0}) = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} t_{\vec{k}}, \quad (3.19)$$

où $t_{\vec{k}}$ est la transformée de Fourier des sauts $t(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$ (les vecteurs $\vec{k}$ sont représentés dans la figure Fig.3.3) et N/N_c est le nombre de sites formant une cellule, et

$$\Sigma_c(i\omega_n) = \Sigma(\vec{x} = 0, i\omega_n) \quad (3.20)$$

sont l'amplitude de saut et la self-energy intra-amas tandis que $\delta t(\vec{x})$ et $\delta \Sigma(\vec{x}, i\omega_n)$ sont les quantités inter-amas correspondantes (non nulles seulement pour $\vec{x} \neq \vec{0}$).

Écrivons la fonction de Green totale $\mathcal{G}(\vec{x}, i\omega_n)$ en faisant une expansion en δt et $\delta \Sigma$ autour de la limite d'amas. Cela donne

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\vec{x}_i - \vec{x}_j, i\omega_n) &= \mathcal{G}_c(i\omega_n) \delta_{\vec{x}_i \vec{x}_j} + \mathcal{G}_c(i\omega_n) \sum_l [\delta t(\vec{x}_i - \vec{x}_j) \\ &\quad + \delta \Sigma(\vec{x}_i - \vec{x}_j, i\omega_n)] \mathcal{G}(\vec{x}_i - \vec{x}_j, i\omega_n) \end{aligned} \quad (3.21)$$

où on a introduit la fonction de Green de l'amas découplé du reste du système, $\mathcal{G}_c$, définie par une équation de Dyson similaire à l'équation Eq.(3.11) de la DMFT :

$$\mathcal{G}_c(i\omega_n) = [i\omega_n - t_c + \mu - \Gamma_c(i\omega_n) - \Sigma_c(i\omega_n)]^{-1}. \quad (3.22)$$

Notons que les matrices identités ont été omises ici et que cette fonction de Green est calculée en utilisant un *solutionneur d'impureté* approprié (voir section Sec.3.6). La fonction d'hybridation Γ_c est définie à partir du hamiltonien d'impureté d'Anderson pour ce problème d'amas quantique :

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{\gamma} \varepsilon_{\gamma}^{bain} \hat{c}_{\gamma}^\dagger \hat{c}_{\gamma} + \sum_{i,\gamma,\sigma} \left(V_{i\gamma} \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{\gamma} + c.h \right)} \quad (3.23)$$

où l'indice $\gamma \equiv \nu \vec{k} \sigma$ décrit les degrés de liberté du bain. On peut généralement

écrire les éléments de matrice de la fonction d'hybridation Γ_c sous la forme

$$\boxed{[\Gamma_c]_{ij}(i\omega_n) = \sum_{\gamma} V_{i\gamma} V_{j\gamma}^* \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \left[- \left\langle \hat{T}_{\tau} \hat{c}_{\gamma}(\tau) \hat{c}_{\gamma}^{\dagger}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{bain}} \right] = \sum_{\gamma} \frac{V_{i\gamma} V_{j\gamma}^*}{i\omega_n - \varepsilon_{\gamma}^{bain}}}. \quad (3.24)$$

On projette alors la fonction de Green totale du réseau

$$\mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - t_c - t_{\vec{k}} + \mu - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n)} \quad (3.25)$$

sur l'amas étudié en considérant l'approximation

$$\boxed{\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) \simeq \Sigma_c(i\omega_n)} \quad (3.26)$$

pour avoir

$$\mathcal{G}_{amas}(i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) \simeq \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n - t_c - t_{\vec{k}} + \mu - \Sigma_c(i\omega_n)}. \quad (3.27)$$

La relation d'autocohérence est finalement obtenue en imposant $\mathcal{G}_{amas}(i\omega_n) = \mathcal{G}_c(i\omega_n)$ pour écrire

$$\boxed{\mathcal{G}_{amas}(i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\Gamma_c(i\omega_n) + \mathcal{G}_{amas}^{-1}(i\omega_n) - t_{\vec{k}}}}. \quad (3.28)$$

L'implémentation itérative est très semblable à celle de la DMFT, mais avec des matrices $N_c \times N_c$. On peut justement utiliser cette nature matricielle de la fonction de Green dans la base des sites de l'amas pour définir une fonction de Green de l'amas dépendant des vecteurs $\vec{K}$:

$$\boxed{\mathcal{G}_{amas}(\vec{K}, i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{X}_i - \vec{X}_j} e^{-i\vec{K} \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)} [\mathcal{G}_{amas}(i\omega_n)]_{\vec{X}_i, \vec{X}_j}}. \quad (3.29)$$

3.5 L'approximation d'amas dynamique (DCA)

Le formalisme de l'approximation d'amas dynamique (DCA) est motivé par un besoin de restaurer l'invariance sous translation au sein de l'amas [41, 42]. En effet, seuls les sites à la surface de l'amas sont hybridés avec le bain d'électrons non interagissants car le terme de saut inter-amas $\delta t(\vec{k})$ n'est fini que pour ces sites. Ainsi, l'invariance sous translation par rapport aux sites d'amas $\vec{X}$ (voir figure Fig.3.3) est violée.

La cause de cette violation peut être vue en représentant l'amplitude de saut comme la transformée de Fourier intra-amas de la relation de dispersion sans interaction $t_{\vec{K}+\vec{k}}$:

$$[t(\vec{k})]_{\vec{X}_i, \vec{X}_j} = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} e^{i(\vec{K}+\vec{k}) \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)} t_{\vec{K}+\vec{k}}. \quad (3.30)$$

La violation de la symétrie sous translation dans l'amas est alors due au facteur de phase $e^{i\vec{k} \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)}$ associé aux vecteurs d'onde $\vec{k}$ intra-cellule. Cette symétrie peut donc être restaurée en utilisant la transformation de Fourier suivante :

$$\boxed{[t_{DCA}(\vec{k})]_{\vec{X}_i, \vec{X}_j} = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)} [t(\vec{k})]_{\vec{X}_i, \vec{X}_j} = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)} t_{\vec{K}+\vec{k}}}. \quad (3.31)$$

L'amplitude de saut t_{DCA} étant parfaitement cyclique dans la base des sites de l'amas, on peut écrire les amplitudes de saut intra-amas et inter-amas sous la forme

$$[t_{DCA}]_{\vec{X}_i, \vec{X}_j} = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)} t_{\vec{K}}^{amas} \quad (3.32)$$

$$[\delta t_{DCA}(\vec{k})]_{\vec{X}_i, \vec{X}_j} = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} e^{i\vec{K} \cdot (\vec{X}_i - \vec{X}_j)} \delta t(\vec{K} + \vec{k}) \quad (3.33)$$

où

$$t_{\vec{K}}^{amas} = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} t_{\vec{K}+\vec{k}} \quad \text{et} \quad \delta t(\vec{K} + \vec{k}) = t_{\vec{K}+\vec{k}} - t_{\vec{K}}^{amas}. \quad (3.34)$$

On peut alors faire l'approximation que la self-energy du réseau, $\Sigma(\vec{K} + \vec{k}, i\omega_n)$, est égale à la self-energy du réseau moyennée à gros grains (*coarse-grained* en anglais),

soit moyennée sur la cellule désignée par le vecteur $\vec{K}$, $\Sigma_{amas}(\vec{K}, i\omega_n)$:

$$\boxed{\Sigma(\vec{K} + \vec{k}, i\omega_n) \simeq \Sigma_{amas}(\vec{K}, i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \Sigma(\vec{K} + \vec{k}, i\omega_n)} . \quad (3.35)}$$

La fonction de Green de l'amas, $\mathcal{G}_c(\vec{K}, i\omega_n)$, est également considérée comme étant égale à la fonction de Green du réseau $\mathcal{G}(\vec{K} + \vec{k}, i\omega_n)$ moyennée à gros grains sur la cellule désignée par le vecteur $\vec{K}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{amas}(\vec{K}, i\omega_n) &= \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}(\vec{K} + \vec{k}, i\omega_n) \\ &= \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{i\omega_n - t_{\vec{K}}^{amas} - t_{\vec{K}+\vec{k}} + \mu - \Sigma_{amas}(\vec{K}, i\omega_n)} . \end{aligned} \quad (3.36)$$

En introduisant la fonction d'hybridation de l'amas, $\Gamma_{amas}(\vec{K}, i\omega_n)$, et en utilisant l'autre expression de $\mathcal{G}_{amas}(\vec{K}, i\omega_n)$,

$$\mathcal{G}_{amas}(\vec{K}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - t_{\vec{K}}^{amas} + \mu - \Gamma_{amas}(\vec{K}, i\omega_n)} , \quad (3.37)$$

on obtient finalement la relation d'autocohérence

$$\boxed{\mathcal{G}_{amas}(\vec{K}, i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\Gamma_{amas}(\vec{K}, i\omega_n) + \mathcal{G}_{amas}^{-1}(\vec{K}, i\omega_n) - t_{\vec{K}+\vec{k}}} . \quad (3.38)}$$

3.6 Solutionneurs d'impureté Monte-Carlo quantique en temps continu

3.6.1 Introduction

Nous avons vu précédemment que les théories de champ moyen dynamique transformaient le modèle de réseau infini en interaction en un problème d'impureté plus simple avec un système en interaction de taille fini. Cependant, la résolution

de ce problème n'est pas triviale car la fonction d'hybridation couple le système interagissant à un bain infini, bien que non interagissant. Même si l'ansatz de Bethe peut donner des solutions exactes pour certains modèles d'impureté, une solution analytique générale n'existe pas et les solutionneurs approchés comme la *théorie de perturbation itérée* (iterated perturbation theory ou IPT) [43] ne sont pas toujours fiables [44]. Il faut trouver un moyen de traiter la très grande taille de l'espace de Hilbert de façon efficace.

Une possibilité est d'approximer le bain par des niveaux discrets et de résoudre le problème par diagonalisation exacte. Cette méthode est surtout utilisée à température nulle car le traitement d'un système à température finie requiert de connaître ses premières énergies propres. Le stockage en mémoire d'un état devient également un problème (un état d'amas à 16 sites prend à lui seul environ 4 Go de mémoire pour le modèle de Hubbard à une bande). Une autre solution est de n'explorer que les configurations statistiquement pertinentes de l'espace de Hilbert. Le solutionneur d'impureté de Hirsch-Fye [45] fait cela en opérant une transformation de Hubbard-Stratanovitch après discrétisation du temps imaginaire. Bien que ce solutionneur permette d'utiliser un nombre infini de niveaux de bain, la discrétisation du temps imaginaire de pas $\Delta\tau$ introduit des erreurs systématiques d'ordre dominant $(\Delta\tau)^2$. Jusqu'à maintenant, les seuls solutionneurs d'impureté à autoriser un nombre infini de niveaux de bain tout en donnant des solutions statistiquement exactes sont les *solutionneurs d'impureté Monte Carlo quantique en temps continu* (Continuous-Time Quantum Monte Carlo ou CTQMC) [46].

3.6.2 Principe général

On commence par scinder en deux parties le hamiltonien total $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1$ et on utilise l'équation Eq.(2.109) de la représentation d'interaction formulée en temps imaginaire, écrite par rapport à $\hat{\mathcal{H}}_0$ et développée en puissances de $\hat{\mathcal{H}}_1$, pour avoir accès à la fonction de partition $\mathcal{Z} = \text{Tr } e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}}$ du système :

$$\mathcal{Z} = \text{Tr } \hat{\mathcal{T}}_\tau e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} e^{-\int_0^\beta \hat{\mathcal{H}}_1(\tau) d\tau} \quad (3.39)$$

où $\hat{\mathcal{H}}_1(\tau) = e^{\tau\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{\mathcal{H}}_1 e^{-\tau\hat{\mathcal{H}}_0}$. En explicitant la série exponentielle et en faisant attention à l'ordre chronologique, on obtient

$$\mathcal{Z} = \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k \text{Tr} \hat{\mathcal{T}}_\tau e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1). \quad (3.40)$$

L'astuce de l'équation Eq.(2.20) permet de "simplifier" cette relation pour avoir :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \text{Tr} \hat{\mathcal{T}}_\tau e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1) \\ &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \text{Tr} \hat{\mathcal{T}}_\tau e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k). \end{aligned} \quad (3.41)$$

En introduisant la fonction de partition $\mathcal{Z}_0 = \text{Tr} e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}$, on peut finalement écrire

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}. \quad (3.42)$$

Il en va de même pour toute valeur moyenne $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \text{Tr} (e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{O}}) / \mathcal{Z}$ d'une observable $\hat{\mathcal{O}}$ du système :

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \frac{\mathcal{Z}_0}{\mathcal{Z}} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \quad (3.43)$$

ou encore

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \frac{\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}}{\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_1(\tau_k) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}}. \quad (3.44)$$

Différentes scissions de $\hat{\mathcal{H}}$ sont possibles mais toutes incluent le hamiltonien de bain dans $\hat{\mathcal{H}}_0$, ce qui rend le nombre infini de niveaux de bain numériquement accessibles. Quant à $\hat{\mathcal{H}}_1$, un choix de départ est d'y mettre tous les termes d'interaction du hamiltonien d'impureté. Cette scission particulière est à la base du solution-

neur d'impureté par expansion en interaction (CT-INT) ou *solutionneur d'impureté de Rubtsov* [47], et du solutionneur d'impureté par champ auxiliaire (CT-AUX), efficaces à faible interaction. Une autre scission de $\hat{\mathcal{H}}$ permet l'expansion de la fonction de partition en puissances de l'hybridation : on parle de *solutionneur d'impureté par expansion en hybridation* (CT-HYB) [48–50], efficace à forte interaction [51].

3.6.3 Algorithme de Metropolis-Hastings

Les formules Eq.(3.42) et Eq.(3.43) nécessitent le calcul de distributions de haute dimension qui sont efficacement obtenues grâce à une *chaîne de Markov*, soit une marche aléatoire dans l'espace des configurations

$$\vec{x}_0 \longrightarrow \vec{x}_1 \longrightarrow \cdots \longrightarrow \vec{x}_n \longrightarrow \vec{x}_{n+1} \quad (3.45)$$

où la distribution de probabilité à l'étape $n+1$, notée $p_{n+1}(\vec{x}_{n+1})$, dépend uniquement des données à l'étape n . En définissant la probabilité de transition $\mathcal{P}(\vec{x}_{n+1}|\vec{x}_n) \equiv \mathcal{P}(\vec{x}_n \longrightarrow \vec{x}_{n+1})$, on a en effet

$$p_{n+1}(\vec{x}_{n+1}) = \sum_{\vec{x}_n} \mathcal{P}(\vec{x}_{n+1}|\vec{x}_n) p_n(\vec{x}_n). \quad (3.46)$$

Si la chaîne de Markov converge, la distribution p satisfait le *bilan global*

$$\boxed{p(\vec{y}) = \sum_{\vec{x}} \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x})} \quad (3.47)$$

qui signifie simplement que la probabilité d'être dans la configuration $\vec{y}$ est la somme des probabilités d'être dans une configuration $\vec{x}$ et de transiter de $\vec{x}$ vers $\vec{y}$. On doit maintenant trouver une expression de la probabilité de transition $\mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x})$ en fonction des distributions de probabilité $p(\vec{y})$ et $p(\vec{x})$. Il suffira alors de prendre la distribution cible de Maxwell-Boltzmann $p_{cible}(\vec{y}) = e^{-\beta E_{\vec{y}}}$ pour la configuration $\vec{y}$ d'énergie $E_{\vec{y}}$ afin de traiter physiquement la chaîne de Markov.

Pour ce faire, on peut écrire la condition de normalisation

$$\sum_{\vec{x}} \mathcal{P}(\vec{x}|\vec{y}) = 1 \quad (3.48)$$

assurant la certitude de pouvoir aller de $\vec{y}$ vers une autre configuration ou de rester dans la configuration $\vec{y}$. Ces deux dernières relations donnent

$$p(\vec{y}) = \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{y}) p(\vec{y}) + \sum_{\vec{x} \neq \vec{y}} \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x}) \quad (3.49)$$

et

$$p(\vec{y}) \underbrace{[1 - \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{y})]}_{\sum_{\vec{x} \neq \vec{y}} \mathcal{P}(\vec{x}|\vec{y})} = \sum_{\vec{x} \neq \vec{y}} \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x}) . \quad (3.50)$$

D'où

$$\sum_{\vec{x} \neq \vec{y}} \mathcal{P}(\vec{x}|\vec{y}) p(\vec{y}) = \sum_{\vec{x} \neq \vec{y}} \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x}) . \quad (3.51)$$

Une condition suffisante mais non nécessaire pour résoudre cette équation est de satisfaire le *bilan détaillé*

$$\boxed{\forall \vec{x}, \quad \mathcal{P}(\vec{x}|\vec{y}) p(\vec{y}) = \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x})} . \quad (3.52)$$

Une solution générale de ce bilan détaillé est apportée par l'*algorithme de Metropolis-Hastings*. Une nouvelle configuration $\vec{y}$ est proposée avec une probabilité $\mathcal{P}_{prop}(\vec{y}|\vec{x})$ et acceptée avec une probabilité $\mathcal{P}_{acc}(\vec{y}|\vec{x})$. Si la configuration proposée $\vec{y}$ est rejetée, l'ancienne configuration $\vec{x}$ est réutilisée. On a donc

$$\boxed{\mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x}) = \mathcal{P}_{acc}(\vec{y}|\vec{x}) \mathcal{P}_{prop}(\vec{y}|\vec{x})} . \quad (3.53)$$

Le bilan détaillé Eq.(3.52) permet d'écrire

$$\frac{p(\vec{y})}{p(\vec{x})} = \frac{\mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x})}{\mathcal{P}(\vec{x}|\vec{y})} = \frac{\mathcal{P}_{acc}(\vec{y}|\vec{x}) \mathcal{P}_{prop}(\vec{y}|\vec{x})}{\mathcal{P}_{acc}(\vec{x}|\vec{y}) \mathcal{P}_{prop}(\vec{x}|\vec{y})} \quad (3.54)$$

et

$$\frac{\mathcal{P}_{acc}(\vec{y}|\vec{x})}{\mathcal{P}_{acc}(\vec{x}|\vec{y})} = \frac{\mathcal{P}_{prop}(\vec{x}|\vec{y}) p(\vec{y})}{\mathcal{P}_{prop}(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x})} . \quad (3.55)$$

Un premier algorithme, appelé *algorithme de Metropolis* [4], suppose

$$\mathcal{P}_{prop}^M(\vec{y}|\vec{x}) = \mathcal{P}_{prop}^M(\vec{x}|\vec{y}) . \quad (3.56)$$

La probabilité d'accepter une transition de $\vec{x}$ vers $\vec{y}$ est alors donnée par

$$\mathcal{P}_{acc}^M(\vec{y}|\vec{x}) = \min \left[1, \frac{p(\vec{y})}{p(\vec{x})} \right] . \quad (3.57)$$

Si la configuration $\vec{y}$ est plus probable que la configuration $\vec{x}$ ou équiprobable à $\vec{x}$, on a $p(\vec{y}) \geq p(\vec{x})$, $\mathcal{P}_{acc}^M(\vec{y}|\vec{x}) = 1$ et la transition est forcément acceptée. Si $p(\vec{y}) < p(\vec{x})$, $\mathcal{P}_{acc}^M(\vec{y}|\vec{x}) = p(\vec{y})/p(\vec{x})$ et la transition est potentiellement rejetée. Cette probabilité vérifie le bilan détaillé Eq.(3.52). Hastings généralise cet algorithme dans son *algorithme de Metropolis-Hastings* en ne faisant pas la supposition Eq.(3.56) [52]. On obtient alors

$$\boxed{\mathcal{P}_{acc}^{MH}(\vec{y}|\vec{x}) = \min \left[1, \frac{\mathcal{P}_{prop}^M(\vec{x}|\vec{y}) p(\vec{y})}{\mathcal{P}_{prop}^M(\vec{y}|\vec{x}) p(\vec{x})} \right]} . \quad (3.58)$$

3.6.4 Ergodicité

La probabilité de transition de Metropolis-Hastings satisfait le bilan détaillé pour une distribution cible donnée. Cependant, rien ne garantit que la chaîne de Markov converge vers la distribution cible. C'est ici que l'*ergodicité* entre en jeu. Une chaîne de Markov est ergodique si toutes ses configurations sont assurément visitées lorsque le programme tourne pour un temps infini.

Une probabilité de transition est *ergodique* si elle est *irréductible et apériodique*. Notons $\mathcal{P}^m(\vec{y}|\vec{x})$ la probabilité que le système, dans la configuration $\vec{x}$ à l'étape n de la chaîne de Markov, transite vers la configuration $\vec{y}$ à l'étape $n + m$ de la chaîne de Markov. La probabilité de transition $\mathcal{P}$ est *irréductible* si

$$\boxed{\forall \vec{x}, \vec{y} \quad \exists m > 0 : \mathcal{P}^m(\vec{y}|\vec{x}) > 0} . \quad (3.59)$$

L'irréductibilité signifie que le système, partant de la configuration $\vec{x}$, pourra forcément transiter vers la configuration $\vec{y}$ à une étape donnée de la chaîne de Markov

et ce, quelles que soient les configurations $\vec{x}$ et $\vec{y}$ de départ et d'arrivée. On dit que les configurations $\vec{x}$ et $\vec{y}$ *communiquent*. La probabilité de transition $\mathcal{P}$ est également *apériodique* si

$$\boxed{\forall \vec{x}, \quad \text{pgcd} \{m : \mathcal{P}^m(\vec{x}|\vec{x}) > 0\} = 1} . \quad (3.60)$$

Cette condition d'apériodicité signifie que toute configuration $\vec{x}$ ne sera jamais revisitée de façon périodique. Cela arriverait par exemple si on avait, pour une configuration $\vec{x}$ donnée, $\mathcal{P}^m(\vec{x}|\vec{x}) > 0$ pour $m = 2, 4, 6$ (plus grand commun diviseur de 2) ou encore $m = 36, 48, 60$ (plus grand commun diviseur de 12). L'apériodicité permet de simuler le hasard dans les transitions du système. Les conditions Eq.(3.59) et Eq.(3.60) assurent l'ergodicité de la chaîne de Markov.

Pour bien comprendre la convergence de la chaîne de Markov, imaginons une chaîne qui, contrairement aux chaînes CTQMC, ne peut visiter qu'un espace fini de N configurations et écrivons P la *matrice de transfert* $N \times N$ contenant toutes les probabilités de transition $P_{\vec{y}\vec{x}} = \mathcal{P}(\vec{y}|\vec{x})$ (avec $\mathcal{P}$ ergodique). L'équation Eq.(3.48) impose que $\forall \vec{y}, \sum_{\vec{x}} P_{\vec{x}\vec{y}} = 1$: on dit que P est *stochastique*. Notons alors $\vec{\pi}_k$ le vecteur propre à gauche de P associé à la valeur propre λ_k (où $k = 1, \dots, N$), on a bien évidemment

$$\vec{\pi}_k P = \lambda_k \vec{\pi}_k . \quad (3.61)$$

Par ailleurs, le *théorème fondamental des chaînes de Markov* énonce que la probabilité ergodique $\mathcal{P}$ possède une unique distribution de probabilité stationnaire π_s telle que

$$\forall \vec{x}, \quad \pi_s(\vec{x}) > 0 , \quad (3.62)$$

$$\vec{\Pi}_s P = \vec{\Pi}_s \quad \text{où} \quad \vec{\Pi}_s = (\pi_s(\vec{x}_1) \cdots \pi_s(\vec{x}_N)) , \quad (3.63)$$

$$\forall \vec{x}, \vec{y} \quad \lim_{m \rightarrow \infty} \mathcal{P}^m(\vec{y}|\vec{x}) = \pi_s(\vec{y}) , \quad (3.64)$$

et le *théorème de Perron-Frobenius* assure que le vecteur

$$\vec{\Pi}_s \equiv \vec{\pi}_1 \quad (3.65)$$

est un vecteur propre de P , de valeur propre simple et dominante $\lambda_1 = 1$. On a dès lors $\lambda_{k>1} < 1$ et on choisit de classer les valeurs propres comme suit :

$$\lambda_1 = 1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \cdots \geq \lambda_N . \quad (3.66)$$

Exprimons un vecteur de probabilité quelconque $\vec{\pi}$ dans la base des vecteurs propres :

$$\vec{\pi} = \sum_{k=1}^N \alpha_k \vec{\pi}_k \quad (3.67)$$

Après une itération, on a

$$\vec{\pi}P = \sum_{k=1}^N \alpha_k \lambda_k \vec{\pi}_k . \quad (3.68)$$

Après m itérations, on a

$$\vec{\pi}P^m = \sum_{k=1}^N \alpha_k \lambda_k^m \vec{\pi}_k . \quad (3.69)$$

En remarquant que les équations Eq.(3.64) et Eq.(3.66) donnent $\alpha_1 = 1$, on obtient finalement

$$\vec{\pi}P^m = \vec{\Pi}_s + \alpha_2 \lambda_2^m \vec{\pi}_2 + \dots \quad (3.70)$$

La différence entre $\vec{\pi}P^m$ et la solution asymptotique $\vec{\Pi}_s$ est déterminée par la seconde plus grande valeur propre de la matrice de transfert, λ_2 . Cette différence est proportionnelle à

$$\lambda_2^m = e^{m \ln \lambda_2} = e^{-m / \left[\ln \left(\frac{1}{\lambda_2} \right) \right]} . \quad (3.71)$$

On pourra donc considérer que la chaîne de Markov commence à converger vers l'itération

$$m_{conv} = \left[\ln \left(\frac{1}{\lambda_2} \right) \right]^{-1} \xrightarrow{\lambda_2 \rightarrow 1^-} +\infty . \quad (3.72)$$

Si λ_2 est trop proche de 1, la chaîne de Markov ne converge donc pas en pratique. Dans le cas des chaînes de Markov possédant un espace de configurations infini, même si le vecteur propre de valeur propre 1 est unique, il se peut que d'autres valeurs propres soient arbitrairement proches de 1, et la convergence de la chaîne de Markov devient alors arbitrairement lente...

Deux types de problèmes d'ergodicité peuvent alors émerger d'une simulation. Le premier vient de la lenteur de convergence dont nous venons de parler. Le second se produit si la probabilité de transition ne permet pas strictement de visiter tout l'espace des configurations. Pour éviter ceci, il est important d'assurer que la probabilité proposant des transitions permette la communication de n'importe quel

couple de configurations, mais aussi que les poids statistiques proposés soient non nuls. C'est justement ce genre de problème qui apparaissait auparavant dans le solveur d'impureté CT-HYB lors de l'étude de la supraconductivité (et plus généralement des phases brisant des symétries) avant qu'il ne soit résolu par de récents travaux [53] imposant de nouvelles mises à jour pour les configurations du système dans la simulation Monte Carlo. Ces mises à jour sont succinctement présentées dans la sous-section Sous-Sec. [G.1.4](#).

3.6.5 Le problème de signe

Les simulations Monte Carlo quantique en temps continu pour des fermions doivent faire face à un terrible problème : le *problème de signe*. Nous avons vu qu'au sein de ces simulations, la fonction de partition du système pouvait être exprimée comme une somme de termes, comme à l'équation Eq.(3.42). On écrit de manière courte

$$\mathcal{Z} = \sum_{\vec{x}} w(\vec{x}) \quad (3.73)$$

où on note encore $\vec{x}$ les configurations du système.

Dans les systèmes classiques, $\vec{x}$ est un point dans l'espace des phases de poids statistique $w(\vec{x}) = e^{-\beta E_{\vec{x}}}$. Dans les problèmes quantiques décrits ici, $w(\vec{x})$ est associé à un terme particulier dans l'expansion Eq.(3.42). Aucun problème ne survient dans le cas classique et dans la plupart des cas concernant des particules bosoniques car les poids $w(\vec{x})$ demeurent positifs. Cependant, si certains poids $w(\vec{x})$ deviennent négatifs, comme c'est souvent le cas pour les fermions à cause des relations d'anti-commutation entre opérateurs fermioniques, ils ne peuvent plus être vus comme des probabilités.

On peut toujours résoudre naïvement ce problème en introduisant la fonction de partition

$$\mathcal{Z}' = \sum_{\vec{x}} |w(\vec{x})| \quad (3.74)$$

et en transférant le signe de $w(\vec{x})$, donné par $\hat{\mathcal{S}}(\vec{x})$, dans l'observable $\hat{\mathcal{O}}$ dont on veut

faire la moyenne :

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O} \rangle &= \frac{\sum_{\vec{x}} \hat{O}(\vec{x}) w(\vec{x})}{\sum_{\vec{x}} w(\vec{x})} \\
&= \frac{\sum_{\vec{x}} \hat{S}(\vec{x}) \hat{O}(\vec{x}) |w(\vec{x})|}{\sum_{\vec{x}} \hat{S}(\vec{x}) |w(\vec{x})|} \\
&= \frac{\sum_{\vec{x}} \hat{S}(\vec{x}) \hat{O}(\vec{x}) |w(\vec{x})| / \mathcal{Z}'}{\sum_{\vec{x}} \hat{S}(\vec{x}) |w(\vec{x})| / \mathcal{Z}'} \\
&= \frac{\langle \hat{S} \hat{O} \rangle'}{\langle \hat{S} \rangle'} \tag{3.75}
\end{aligned}$$

où les dernières moyennes thermodynamiques sont prises par rapport à la fonction de partition $\mathcal{Z}'$. Il reste néanmoins encore un problème ici car beaucoup de termes vont se simplifier dans l'évaluation de $\langle \hat{S} \hat{O} \rangle'$ et de $\langle \hat{S} \rangle'$. Pour clarifier ce dernier point, prenons l'exemple du calcul de $\langle \hat{S} \hat{O} \rangle'$. Des termes identiques intervenant normalement dans l'évaluation de la moyenne $\langle \hat{O} \rangle$ peuvent désormais se voir séparément attribuer un signe + ou un signe – par l'opérateur $\hat{S}$ dans le calcul de la moyenne $\langle \hat{S} \hat{O} \rangle'$. De nombreux termes pertinents dans $\langle \hat{O} \rangle$ peuvent donc désormais s'annuler entre eux dans $\langle \hat{S} \hat{O} \rangle'$. De plus, on peut prouver que le rapport de l'écart-type associé à $\langle \hat{S} \rangle'$ et de la moyenne $\langle \hat{S} \rangle'$ augmente exponentiellement avec la taille du système et l'inverse de la température [54], ce qui se répercute directement sur $\langle \hat{O} \rangle$. Ceci rallonge souvent les simulations qui cherchent à faire converger ces moyennes : le problème ne peut donc pas être complètement contourné !

Il a été prouvé que le problème de signe est en fait *NP-difficile*, ce qui signifie qu'il n'existe pas de solutions polynomiales en temps à ce problème dans la plupart des cas [54]. Cependant, la sévérité du problème de signe dépend du modèle considéré : par exemple, le fait de travailler à demi-remplissage dans le cadre du modèle de Hubbard à une bande avec saut aux premiers voisins sur un réseau bipartite ne mène pas à un problème de signe grâce à la symétrie particule-trou. Par ailleurs, de récents travaux ont même réussi à minimiser généralement ce problème de signe pour le solveur d'impureté CT-HYB [55].

3.7 Méthode d'entropie maximale pour le prolongement analytique

3.7.1 Un problème très mal conditionné

La méthode d'entropie maximale revient à résoudre un *problème d'inversion* permettant d'obtenir une fonction spectrale $\mathcal{A}(\omega)$ en partant de la fonction de Green de Matsubara $\mathcal{G}(i\omega_n)$ qui lui est associée [56,57]. Elle s'intéresse ainsi à la représentation spectrale de la fonction de Green de Matsubara Eq.(2.124) réécrite comme

$$\boxed{\mathcal{G}(i\omega_n) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\omega)}{i\omega_n - \omega} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \mathcal{K}(i\omega_n, \omega)} \quad (3.76)$$

où $\mathcal{K}(i\omega_n, \omega)$ désigne le *kernel* du problème. Notons qu'on aurait pu partir de la fonction de Green de Matsubara en temps imaginaire

$$\mathcal{G}(\tau) = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\beta\omega}} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \mathcal{K}(\tau, \omega) \quad (3.77)$$

qui est obtenue *via* le théorème des résidus appliqué à la transformée de Fourier de la représentation spectrale précédente. Cependant, le kernel $\mathcal{K}(\tau, \omega)$, exponentiel en ω , rendrait la résolution du problème bien trop susceptible à la moindre erreur numérique. Dans tous les cas, l'inversion se fait toujours *via* la relation Eq.(3.76), comme dans le programme *OmegaMaxEnt* utilisé dans cette thèse [58].

Revenons au problème d'inversion Eq.(3.76): c'est un problème *très mal conditionné* car nous n'avons que quelques fréquences de Matsubara venant de $\mathcal{G}(i\omega_n)$ pour essayer de déterminer la fonction spectrale $\mathcal{A}(\omega)$ sur toute la plage de fréquences réelles! Même avec autant d'équations que d'inconnues, le problème d'inversion demeure mal conditionné dans le sens où la matrice du kernel peut contenir des éléments d'ordres de grandeur très différents. Bien que d'autres méthodes existent [59,60], la méthode d'entropie maximale est la méthode de prolongement analytique la plus fiable pour des données Monte Carlo car elle *guide* la recherche de la fonction spectrale en y incorporant des informations venant des erreurs statistiques sur $\mathcal{G}(i\omega_n)$ et des propriétés attendues pour $\mathcal{A}(\omega)$ telles que sa normalisation

et ses premiers moments à haute fréquence, décrits dans l'annexe Ann.A.

Pour ce faire, l'équation Eq.(3.76) est discrétisée sous la forme matricielle

$$\boxed{G = KA} \quad (3.78)$$

et on applique la *statistique bayésienne* [61], en particulier le *théorème de Bayes* donnant la probabilité jointe de deux événements a et b , $\mathcal{P}(a, b)$, en fonction de probabilités conditionnelles sur ces événements :

$$\mathcal{P}(a, b) = \mathcal{P}(a|b) \mathcal{P}(b) = \mathcal{P}(b|a) \mathcal{P}(a) \quad (3.79)$$

où $\mathcal{P}(a|b)$ est la probabilité que a ait lieu conditionnellement à b . On cherche ici à *maximiser* la probabilité d'avoir une fonction spectrale (de représentation matricielle A) en connaissant la fonction de Green de Matsubara de départ (de représentation matricielle G), soit $\mathcal{P}(A|G)$. En utilisant le théorème de Bayes, on obtient

$$\boxed{\mathcal{P}(A|G) = \frac{\mathcal{P}(G|A) \mathcal{P}(A)}{\mathcal{P}(G)} \propto \mathcal{P}(G|A) \mathcal{P}(A)} \quad (3.80)$$

où $\mathcal{P}(G)$ est une certaine constante de normalisation car on connaît G dès le début de la procédure. Quant aux autres probabilités, on appelle $\mathcal{P}(G|A)$ la *vraisemblance* et $\mathcal{P}(A)$ la *probabilité a priori*.

3.7.2 La vraisemblance

Notons $\{G_j\}$ l'ensemble des valeurs de $\mathcal{G}(i\omega_j)$ sur l'ensemble des mesures Monte Carlo. Si chaque mesure est statistiquement indépendante des autres, le *théorème de la limite centrale* donne

$$\mathcal{P}(G_j|\bar{G}_j) \propto \exp\left(-\frac{(G_j - \bar{G}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \quad (3.81)$$

où $\bar{G}_j$ est la moyenne de $\{G_j\}$ et σ_j est la variance de $\{G_j\}$. Or, on doit avoir

$$\bar{G} = KA \quad (3.82)$$

pour satisfaire la relation Eq.(3.78). Donc

$$\boxed{\mathcal{P}(G|A) \propto e^{-\frac{\chi^2}{2}}} \quad (3.83)$$

où

$$\boxed{\chi^2 = \sum_j \frac{(G_j - \bar{G}_j)^2}{\sigma_j^2}} \quad (3.84)$$

si les mesures sont parfaitement indépendantes, ou encore

$$\boxed{\chi^2 = (G - \bar{G})^T C^{-1} (G - \bar{G})} \quad (3.85)$$

s'il existe des corrélations nécessitant l'emploi d'une matrice de covariance C . La vraisemblance est ainsi une probabilité prenant en compte l'information venant des erreurs statistiques sur $\mathcal{G}(i\omega_n)$. Cependant, minimiser uniquement le χ^2 donne un problème où il y a généralement plus d'inconnues que d'équations.

3.7.3 La probabilité *a priori*

Le problème introductif des kangourous

La probabilité *a priori* que nous allons voir a pour rôle d'incorporer de l'information sur la fonction spectrale recherchée tout en ne rajoutant aucune corrélation non justifiée par les données de départ. Une bonne introduction sur ce sujet nous vient du *problème des kangourous* [56] qui s'énonce comme suit :

Dans une population de kangourous, un tiers d'entre eux ont les yeux bleus et un tiers d'entre eux sont gauchers.

Combien d'entre eux ont les yeux bleus en plus d'être gauchers?

Le problème se comprend plus formellement avec le tableau Tab.3.1 résumant les différentes probabilités en jeu ici.

Ces probabilités sont bien sûr soumises aux *contraintes* suivantes :

	Gaucher	Droitier
Bleus	p_1	p_2
Non bleus	p_3	p_4

TABLE 3.1 Tableau introduisant les probabilités du problème des kangourous.

- $p_1 + p_2 = 1/3$ car un tiers des kangourous ont les yeux bleus ;
- $p_1 + p_3 = 1/3$ car un tiers des kangourous sont gauchers ;
- $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1$ car la somme des probabilités est normalisée à 1.

Le problème est ainsi mal conditionné car il nous manque de l'information pour le résoudre (nous avons trois équations pour quatre inconnues).

Le tableau Tab.3.2 nous décrit cependant trois cas de figure particulièrement intéressants qui serviront de cas limites ici :

- A) le cas de corrélations positives maximales où tous les kangourous gauchers ont les yeux bleus ;
- B) le cas de corrélations négatives maximales où aucun kangourou gaucher n'a les yeux bleus ;
- C) le cas sans corrélation entre le fait d'être gaucher et d'avoir les yeux bleus.

Ce dernier cas correspond à la supposition naturelle que la fraction de kangourous aux yeux bleus qui sont gauchers est la même que la fraction de la population totale de kangourous à avoir les yeux bleus. Autrement dit, il n'existe pas de corrélation entre le fait d'être gaucher et le fait d'avoir les yeux bleus.

Une façon d'obtenir une solution au problème est de maximiser une fonction de régularisation dépendant des probabilités par rapport aux contraintes énoncées précédemment. Plusieurs fonctions de régularisation sont possibles mais seule la maximisation de la fonction

$$\{p_i\} \longmapsto - \sum_i p_i \ln(p_i) \quad (3.86)$$

en tenant compte des différentes contraintes donne $p_1 = 1/9$, soit le cas sans corrélation. Ainsi, seule cette *fonction de régularisation entropique* (d'après l'expression standard de l'entropie en physique statistique) permet éventuellement de rajouter

A	Gaucher	Droitier	B	Gaucher	Droitier
Bleus	1/3	0	Bleus	0	1/3
Non bleus	0	2/3	Non bleus	1/3	1/3

C	Gaucher	Droitier
Bleus	1/9	2/9
Non bleus	2/9	4/9

TABLE 3.2 Tableau détaillant trois cas spéciaux du problème des kangourous. **A** : Le cas de corrélations positives maximales. **B** : Le cas de corrélations négatives maximales. **C** : Le cas sans corrélation.

de l'information sans ajouter de fausses corrélations qui ne sont pas justifiées par les données [56, 62, 63]. Nous allons donc utiliser cette fonction pour construire la probabilité *a priori* de la méthode d'entropie maximale.

Probabilité entropique et modèle par défaut

La probabilité *a priori* s'écrit

$$\mathcal{P}(A) \propto e^{\alpha S} \quad (3.87)$$

où α est un paramètre ajustable et S un terme d'entropie sur lequel nous reviendrons juste et qui contient de l'information sur ce qui est attendu de la fonction spectrale recherchée. La forme exponentielle est ici choisie afin de pouvoir facilement comparer cette probabilité avec la vraisemblance Eq.(3.83) lorsqu'on les multiplie ensemble dans l'équation Eq.(3.80). Le paramètre α va alors pouvoir être ajusté pour modifier l'importance de la probabilité *a priori* par rapport à la vraisemblance. De plus, cette forme a le mérite d'assurer la positivité de la probabilité *a priori*.

Le terme d'entropie S de la probabilité *a priori*, appelé *entropie différentielle* [63], peut être mis sous la forme

$$S = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \ln \left(\frac{\mathcal{A}(\omega)}{\mathcal{D}(\omega)} \right) \quad (3.88)$$

où $\mathcal{D}(\omega)$ est le *modèle par défaut* utilisé dans la méthode d'entropie maximale. Ce modèle par défaut est choisi au départ en ayant des propriétés attendues pour la fonction spectrale, que ce soit une certaine normalisation ou encore des moments à haute fréquence appropriés, décrits dans l'annexe Ann.A. Il est clair d'après la définition Eq.(3.88) que le rapport $\mathcal{A}(\omega)/\mathcal{D}(\omega)$ doit être positif pour toute fréquence ω . $\mathcal{A}(\omega)$ étant une distribution de probabilité comme montré dans la section Sec.2.5, $\mathcal{D}(\omega)$ doit aussi être positif pour toute fréquence ω . On peut alors voir ce modèle par défaut comme étant une distribution préalable du poids spectral qui va ensuite être déplacé au cours du prolongement analytique pour donner naissance à la fonction spectrale recherchée. À noter que l'entropie est négative, maximisée à la valeur 0 par $\mathcal{A}(\omega) = \mathcal{D}(\omega)$. Souvent, ce sont des modèles par défaut gaussiens ou plats (constants sur un intervalle donné) qui sont utilisés.

Maintenant, comment peut-on vraiment comprendre l'entropie différentielle Eq.(3.88) au sens traditionnel de l'entropie ? On peut très bien réécrire ce terme sous la forme

$$S = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{D}(\omega) \frac{\mathcal{A}(\omega)}{\mathcal{D}(\omega)} \ln \left(\frac{\mathcal{A}(\omega)}{\mathcal{D}(\omega)} \right) \quad (3.89)$$

qui est très similaire à la forme traditionnelle en $-\sum_i p_i \ln(p_i)$ de l'entropie à deux détails près. En effet, ici $\mathcal{D}(\omega)$ sert de mesure d'intégration (renforçant son interprétation en terme de distribution préalable du poids spectral) et le rapport $\mathcal{A}(\omega)/\mathcal{D}(\omega)$ n'est généralement pas une distribution de probabilité. Ceci n'est pas un problème car l'entropie différentielle est une *entropie relative*. On peut aisément le voir en l'écrivant comme

$$\begin{aligned} S &= - \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \ln(\mathcal{A}(\omega)) - \left[- \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \ln(\mathcal{D}(\omega)) \right] \\ &= S[\mathcal{A}] - S[\mathcal{A}, \mathcal{D}] \end{aligned} \quad (3.90)$$

où $S[\mathcal{A}]$ est l'entropie liée à $\mathcal{A}(\omega)$ tandis que $S[\mathcal{A}, \mathcal{D}]$ est l'entropie croisée entre $\mathcal{A}(\omega)$ et $\mathcal{D}(\omega)$. Mais où se trouve la notion d'incertitude dans cette entropie différentielle ? La meilleure façon de comprendre cela est de la relier à la *divergence de Kullback-Leibler*

$$D_{KL}(\mathcal{A}||\mathcal{D}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\omega) \ln \left(\frac{\mathcal{A}(\omega)}{\mathcal{D}(\omega)} \right) \quad (3.91)$$

via

$$S = -D_{KL}(\mathcal{A}||\mathcal{D}). \quad (3.92)$$

Cette divergence vaut 0 lorsque $\mathcal{A}(\omega) = \mathcal{D}(\omega)$ et augmente (en valeur absolue car le signe de la divergence change suivant que $\mathcal{A}(\omega) < \mathcal{D}(\omega)$ ou $\mathcal{A}(\omega) > \mathcal{D}(\omega)$) lorsque les deux fonctions diffèrent. Ceci est illustré à la figure Fig.3.4 comparant un modèle par défaut gaussien avec des fonctions spectrales de même norme mais de largeur à demi-hauteur ou de centre différent.

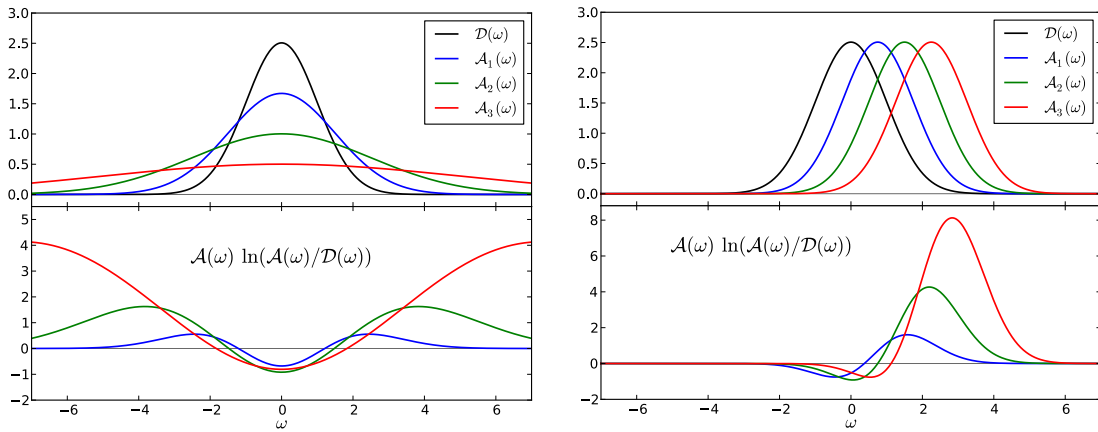


FIGURE 3.4 Illustration de l'intégrande de la divergence de Kullback-Leibler pour un modèle par défaut gaussien comparé à des fonctions spectrales de même norme mais de largeur à demi-hauteur (gauche) ou de centre (droite) différent.

Plus $\mathcal{A}(\omega)$ et $\mathcal{D}(\omega)$ diffèrent, plus la divergence est grande et plus l'entropie diminue. L'entropie différentielle représente alors l'incertitude sur le fait que la fonction spectrale $\mathcal{A}(\omega)$ soit clairement différente du modèle par défaut $\mathcal{D}(\omega)$.

3.7.4 Récapitulatif et recherche du α optimal

En combinant les équations Eq.(3.80), Eq.(3.83), et Eq.(3.87), on obtient la probabilité à maximiser :

$$\mathcal{P}(A|G) \propto e^{\alpha S - \frac{\chi^2}{2}}. \quad (3.93)$$

Cela revient en gros à maximiser l'entropie différentielle S (d'où le nom "méthode d'entropie maximale"), sujette aux contraintes contenues dans le χ^2 . Il faut finalement

maximiser $\alpha S - \chi^2/2$ (ce qui régularise le problème posé par la seule maximisation de χ^2) et choisir le α optimal de façon à avoir pris en compte toute l'information pertinente pour trouver la bonne fonction spectrale. La figure Fig.3.5 illustre le processus du programme *OmegaMaxEnt* [58] quant à la recherche de ce α optimal.

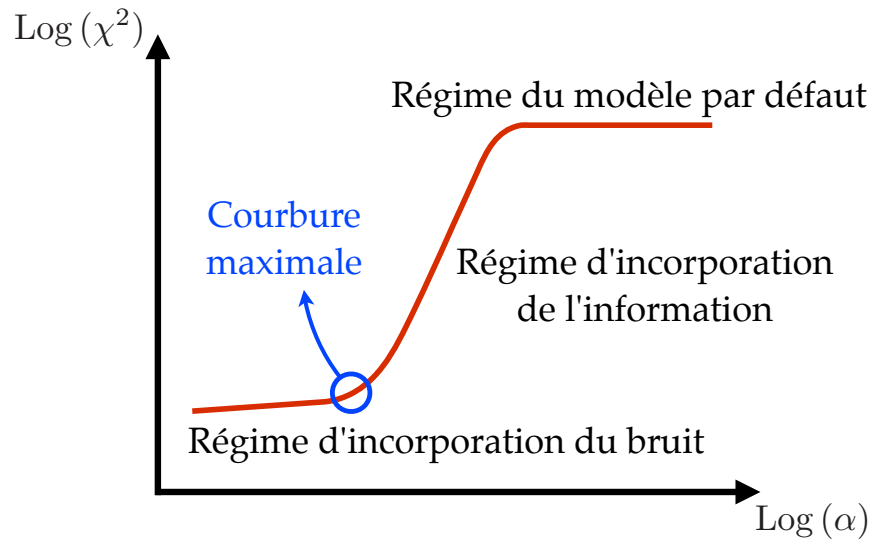


FIGURE 3.5 Recherche du α optimal au sein de la méthode d'entropie maximale dans le tracé de $\text{Log}(\chi^2)$ en fonction de $\text{Log}(\alpha)$ qui admet trois régimes en fonction de la valeur de α . La valeur optimale de α est celle se trouvant au maximum de courbure entre le régime d'incorporation de l'information et le régime d'incorporation du bruit.

On peut discerner trois régimes dans la progression du programme d'entropie maximale :

- Le programme commence à très grand α , là où la probabilité *a priori* Eq.(3.87) domine la détermination de la fonction spectrale. Comme il faut globalement juste maximiser αS et donc S , on obtient $\mathcal{A}(\omega) \simeq \mathcal{D}(\omega)$. On parle alors de *régime du modèle par défaut* où la valeur de χ^2 ne change pas vraiment lorsque l'on diminue la valeur de α .
- Lorsque la valeur de α diminue suffisamment, αS devient de l'ordre de $-\chi^2/2$ et on entre alors le *régime d'incorporation de l'information* : l'information contenue dans χ^2 commence à intervenir dans la maximisation de $\alpha S - \chi^2/2$ et dans la fonction spectrale associée.
- Si la valeur de α diminue trop, on finit de prendre en compte toute l'informa-

tion contenue dans χ^2 et on commence à n'incorporer que du bruit. On entre finalement dans le *régime d'incorporation du bruit* où χ^2 varie une nouvelle fois très peu en fonction de α .

La valeur optimale de α est celle qui se trouve à la transition entre le régime d'incorporation de l'information et le régime d'incorporation du bruit, là où toute l'information pertinente a été prise en compte pour la détermination de la fonction spectrale. Il suffit donc de trouver le α donnant le maximum de courbure du $\text{Log}(\chi^2)$ en fonction de $\text{Log}(\alpha)$, comme le montre la figure Fig.3.5, très fortement inspirée de [58].

3.7.5 Problème avec l'étude de la supraconductivité

On sait que la méthode d'entropie maximale repose sur la définition de l'entropie différentielle Eq.(3.88), elle-même reposant sur le fait que $\mathcal{A}(\omega)/\mathcal{D}(\omega) > 0$. Or, toutes les fonctions spectrales ne sont pas forcément positives ! La positivité des fonctions spectrales que nous avons rencontrées jusqu'à maintenant vient du fait que ce sont des fonctions spectrales fermioniques construites à partir de fonctions de Green associant un opérateur à son conjugué hermitique, comme le montre la section Sec.2.5. En partant du même type de fonction de Green pour des bosons, on aurait obtenu une fonction spectrale impaire en fréquences réelles et de signe constant sur $[-\infty, 0]$ et $[0, +\infty]$. Il aurait alors suffi de prendre un modèle par défaut impair en fréquences réelles et de même signe sur $[-\infty, 0]$ et $[0, +\infty]$ pour ne pas avoir de problème.

Le cas de la supraconductivité est bien plus complexe car nous verrons dans le chapitre Chap.7 que les fonctions de Green permettant de traiter la supraconductivité associent entre autres les opérateurs $\hat{c}_{\vec{k}\uparrow}$ et $\hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}$ qui ne sont pas conjugués hermitiques l'un de l'autre. Nous verrons alors que la fonction spectrale associée à la supraconductivité peut très bien changer de signe sur $[0, +\infty]$ par exemple, à une fréquence donnée nous renseignant sur la dynamique de cette phase, sans pour autant qu'on soit capable de prédire sa valeur. Il devient alors impossible de définir un modèle par défaut satisfaisant à coup sûr $\mathcal{A}(\omega)/\mathcal{D}(\omega) > 0$ et la méthode d'entropie maximale devient complètement inutilisable. Le chapitre Chap.7 présentera une façon de contourner ce problème majeur de la physique numérique.

Résumé

En plus des outils du problème à N -corps permettant un traitement analytique de certains cas simples, la physique numérique offre également des outils permettant le traitement approximatif de problèmes bien plus complexes.

Il y a tout d'abord le formalisme complet des théories de champ moyen dynamique qui couple de façon auto-cohérente un site ou un amas de sites à un bain effectif d'électrons sans interaction. Du point de vue de la théorie des perturbations, il y a évolution en temps imaginaire où les électrons entrent et sortent de l'amas. Cette dépendance en temps imaginaire peut se traduire par une dépendance en fréquence essentielle à l'étude des systèmes d'électrons corrélés où la compréhension de la physique loin du niveau de Fermi est primordiale. Les théories de champ moyen dynamique vont de pair avec des solveurs d'impureté. Les solveurs qui n'introduisent pas d'approximation additionnelle, autre que des erreurs statistiques, sont basés sur le Monte Carlo quantique en temps continu. Ces solveurs échantillonnent le développement perturbatif de la fonction de partition autour d'une partie du hamiltonien (bain ou interaction) en puissances d'une autre partie du hamiltonien (interaction ou bain). Le problème de signe, provenant des propriétés d'anticommutation des opérateurs fermioniques, peut empêcher les simulations de converger dans un temps raisonnable et représente dès lors la limitation majeure de ces méthodes.

D'un autre côté, le prolongement analytique permettant d'obtenir une fonction spectrale en fréquences réelles $\mathcal{A}(\omega)$ à partir de la fonction de Green de Matsubara associée $\mathcal{G}(i\omega_n)$ est une étape numériquement ardue. La méthode d'entropie maximale se montre cependant particulièrement efficace. Elle cherche à résoudre un problème d'inversion très mal conditionné (la représentation spectrale liant $\mathcal{G}$ à $\mathcal{A}$) en cherchant à maximiser la probabilité bayésienne d'avoir $\mathcal{A}$ en connaissant $\mathcal{G}$. Le programme est guidé à travers les erreurs statistiques sur $\mathcal{G}(i\omega_n)$ sortant du Monte Carlo quantique en temps continu et un modèle par défaut comportant des informations attendues pour la fonction spectrale recherchée.

Chapitre 4

Physique de Mott

4.1 Brève revue historique

4.1.1 La théorie des bandes

Considérer un électron au sein d'un atome et considérer ce même électron au sein du même atome lui-même plongé dans un solide sont deux situations bien différentes. C'est ce dont Felix Bloch se rend compte au cours de son doctorat, durant la première moitié du 20^{ème} siècle. En effet, l'électron a des énergies discrètes au sein d'un atome car il est soumis aux lois imposées par les nombres quantiques. Ces niveaux commencent à se séparer lorsque plusieurs atomes sont mis "en contact" les uns avec les autres ! La présence de nombreux atomes adjacents vient lever la dégénérescence des niveaux atomiques de chacun de ces atomes. C'est cette levée de dégénérescence qui, pour un solide composé d'un nombre macroscopique d'atomes, mène à de véritables *bandes d'énergie* séparées par des bandes d'énergies interdites communément appelées *gaps*.

C'est ainsi que naît en 1928 la *théorie des bandes* qui permet de comprendre dans la plupart des cas pourquoi un matériau est conducteur ou isolant électrique. Si l'énergie de Fermi d'un matériau se trouve dans une bande interdite, on aura un matériau isolant car il sera difficile de promouvoir un électron situé dans la bande de valence (sous le niveau de Fermi) dans la bande de conduction (au-dessus du

niveau de Fermi). Il faudrait en effet apporter une énergie supérieure au gap à cet électron, ce qui revient souvent à faire fondre le matériau. Si le niveau de Fermi se situe dans une bande d'énergies accessibles, on se retrouve avec un conducteur car il est très facile d'exciter un électron. Tout cela est très simplement visualisé dans la vidéo de vulgarisation suivante <http://www.toutestquantique.fr/#metaux>. Le cas intermédiaire où le niveau de Fermi se trouve dans un gap relativement petit est des plus intéressants. On parle de *semiconducteur*. Ici, le matériau, au départ isolant, peut devenir conducteur si on le dope et qu'on lui apporte assez d'énergie, que ce soit sous forme d'énergie thermique ou lumineuse par exemple. Cette physique des semiconducteurs a notamment donné naissance aux diodes électroluminescentes (DEL) et aux transistors qui sont les constituants élémentaires de toute électronique moderne (ordinateurs et téléphones portables entre autres).

4.1.2 Isolant de Mott et transition de Mott

Le domaine de la matière condensée prend alors son envol au cours du 20^{ème} siècle, non seulement grâce à l'établissement de la mécanique quantique en 1926 par Schrödinger, Heisenberg, et Bohr, mais également grâce à la découverte de l'importance de l'*effet des interactions* dans la matière. Cette physique des fortes interactions voit le jour en 1937 avec l'étude de certains oxydes de métaux de transition comme l'oxyde de nickel NiO ou l'oxyde de vanadium V₂O₃, expérimentalement par De Boer et Verwey [64], et théoriquement par Mott et Peierls [65].

Ils se rendent compte que ces matériaux sont isolants alors qu'ils devraient être conducteurs d'après la théorie des bandes. En effet, ils ont un nombre impair d'électrons de valence (ils sont demi-remplis), ce qui implique normalement une bande de valence à moitié remplie. Mieux encore, ces matériaux peuvent passer d'un état isolant à un état conducteur lorsqu'ils sont mis sous pression. On parle alors de *transition de Mott*. Ils réalisent finalement que ce sont les fortes interactions entre électrons qui causent l'émergence d'un tel phénomène : si ces interactions sont suffisamment fortes, les électrons se gênent tellement dans leurs mouvements au sein du réseau cristallin qu'ils ne peuvent plus transporter de courant électrique ! Un tel isolant, formé à partir d'un "embouteillage électronique", s'appelle un *isolant de Mott*.

Dans un isolant de Mott, un gap s'ouvre dans la densité d'états locale au niveau de Fermi ($\omega = 0$). La figure Fig.4.1 montre l'ouverture de ce gap à température nulle dans le cadre du modèle de Hubbard à une bande lorsque l'interaction coulombienne locale U augmente. Les deux bandes alors obtenues à forte interaction sont appelées *bandes de Hubbard inférieure et supérieure*.

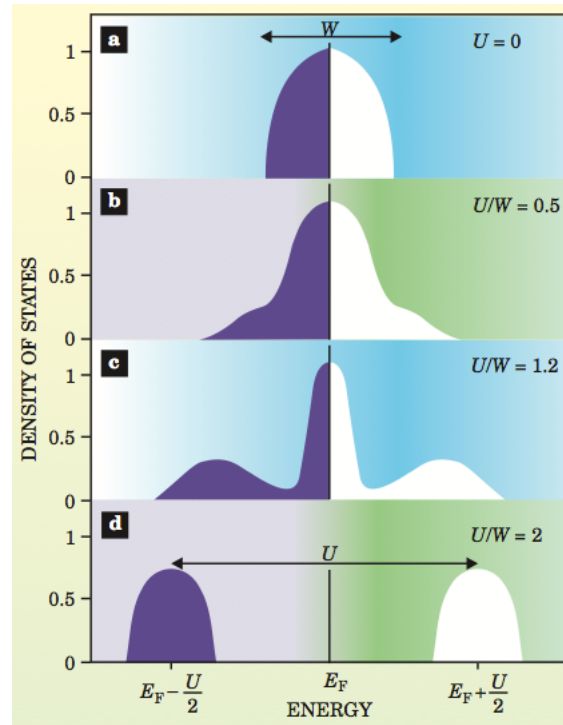


FIGURE 4.1 Évolution de la densité d'états locale dans le cadre du modèle de Hubbard dans la phase paramagnétique à $T = 0$ et à demi-remplissage en fonction du rapport entre la largeur de bande du cas sans interaction W (reliée à l'énergie cinétique) et l'interaction coulombienne locale U . **a)** Cas non interagissant. **b)** Pour de faibles interactions, il y a un léger transfert de poids spectral à l'écart de l'énergie de Fermi. **c)** Pour de fortes interactions, une structure typique à trois pics apparaît clairement. Elle est constituée d'un pic de quasi-particules cohérentes proche du niveau de Fermi et de bandes de Hubbard incohérentes. **d)** Au-dessus d'une certaine interaction critique, le pic de quasi-particule disparaît et le système devient isolant, avec deux bandes de Hubbard bien séparées. Figure tirée de [37].

4.2 Fortes corrélations électroniques

4.2.1 Considérations qualitatives

On peut montrer de façon très simpliste que la force des corrélations électroniques est liée à l'étroitesse de la largeur de bande W d'un matériau, soit la taille de la bande d'énergies permises qui contient le niveau de Fermi. Notons que dans le cadre de la théorie des bandes, cette largeur de bande est fixée par l'amplitude de saut t : $W = 8t$ dans le cas d'un réseau carré avec saut aux premiers voisins par exemple.

Considérons deux électrons de spins différents occupant la même orbitale dans un matériau. En supposant que ces électrons aient une relation de dispersion $\varepsilon_{\vec{k}}$ bien définie, leur vitesse est donnée par $v_{\vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}\|$. La vitesse typique est alors donnée par $v_{\vec{k}} \sim a/\tau$ où a est le pas du réseau et τ est le temps moyen passé par un électron autour d'un atome. La dérivée peut être estimée par $\frac{1}{\hbar} \|\vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}\| \sim \frac{1}{\hbar} aW$ car $\|\vec{\nabla}_{\vec{k}}\| \sim 1/\|\vec{k}\| \sim a$ et $|\varepsilon_{\vec{k}}|$ correspond au recouvrement de bandes t , donc à la largeur de bande W . Tout cela signifie que

$$\tau \sim \frac{\hbar}{W}. \quad (4.1)$$

Ainsi, plus une bande est étroite, plus un électron réside longtemps autour d'un atome et ressent ainsi la présence des autres électrons. Une bande étroite accroît donc l'effet de l'interaction coulombienne entre les électrons l'occupant, les rendant *fortement corrélés*.

Une telle étroitesse de bande concerne de nombreux matériaux du tableau périodique des éléments. Par exemple, des matériaux avec des couches électroniques d ou f partiellement remplies, comme les métaux de transition (vanadium V, fer Fe, ou nickel Ni par exemple) et leur oxydes, ou les terres rares métalliques comme le cérium Ce. En effet, ces orbitales ont une extension spatiale très faible, ce qui leur confère très peu de recouvrement avec les autres orbitales des matériaux concernés.

4.2.2 Considérations expérimentales

Les corrélations électroniques peuvent donner naissance à de profonds changements, tant qualitatifs que quantitatifs, dans les propriétés physiques des systèmes électroniques (en comparaison à des systèmes de particules sans interaction). La flèche rouge de la figure Fig.4.2 présente par exemple la transition de Mott observée en fonction de la pression chimique, dont une diminution est induite par un dopage en chrome, dans l'oxyde de vanadium V_2O_3 .

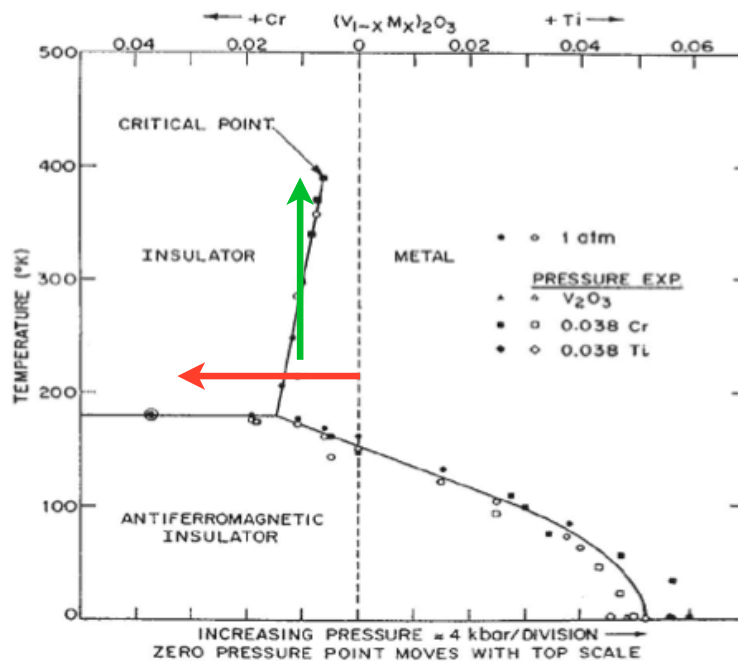


FIGURE 4.2 Diagramme de phase de $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ en fonction de la pression et de la concentration en chrome x (la partie d'intérêt ici) qui induit une diminution en pression chimique. Pour ce matériau, augmenter x de 1% produit des effets similaires à une diminution de pression d'environ 4 kbar. **Flèche rouge** : Transition de Mott induite par un dopage chimique en chrome. **Flèche verte** : Effet Pomeranchuk. La phase métallique de V_2O_3 peut être transformée en un isolant de Mott sous chauffage. Figure sans les flèches tirée de [66].

Pensons à ce système en termes du modèle de Hubbard à une bande. Diminuer la pression en dopant le matériau tend à diminuer l'amplitude de saut t entre les atomes à mesure que ces derniers s'éloignent les uns des autres. La largeur de bande tend donc également à diminuer. À partir d'un certain dopage, la largeur de bande devient égale voire inférieure à l'interaction locale U et le matériau, partant de sa phase métallique à faible dopage, finit alors par devenir isolant.

Les matériaux corrélés répondent souvent très fortement aux changements dans les paramètres externes. Cela se traduit par de grandes renormalisations dans les fonctions de réponse du système (dans la susceptibilité de spin ou la compressibilité de charge par exemple), et par un fort transfert de poids spectral lorsque le matériau voit un gap s'ouvrir dans la densité d'états locale autour du niveau de Fermi. Les corrélations électroniques semblent également jouer un rôle essentiel dans la supraconductivité à haute température critique. En particulier, le croisement entre les degrés de liberté de spin, de charge, et les degrés de liberté orbitaux dans les électrons corrélés d typiques de ces supraconducteurs mène à une grande richesse de phénomènes inhabituels à basse température [36]. Ces propriétés ne peuvent pas être expliquées au sein de théories de champ moyen conventionnelles, comme la théorie d'Hartree-Fock, parce qu'elles décrivent les interactions uniquement en moyenne.

4.3 Description de la transition de Mott

4.3.1 Quantités thermodynamiques pertinentes

Occupation

L'occupation

$$n = \langle \hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (4.2)$$

est une quantité physique qui représente le nombre moyen d'électrons sur un site donné. Dans le cadre des isolants de Mott, il est vraiment intéressant de regarder le comportement de n en fonction du potentiel chimique μ . En effet, dans de tels

matériaux, le fait d'ajouter ou de retirer un électron requiert de payer une certaine énergie : le système est alors dit *incompressible* car la compressibilité κ est nulle.

$$\boxed{\kappa = \left. \frac{\partial^2 E}{\partial n^2} \right|_T^{-1} = \frac{1}{n^2} \left. \frac{\partial n}{\partial \mu} \right|_T = 0 \quad \text{dans un isolant de Mott}} \quad (4.3)$$

Il est important de noter que ce zéro vient physiquement du fait que la densité électronique ne varie pas lorsqu'on déplace le potentiel chimique dans un gap d'énergie. En écrivant U_c la valeur de U où la transition de Mott se produit à température nulle, la courbe représentant n en fonction de μ a alors la forme d'un escalier fait de plateaux de longueur typique $U - U_c$ [33].

Double occupation - Effet Pomranchuck

La double occupation

$$\boxed{D = \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle_{\hat{H}}} \quad (4.4)$$

représente la probabilité pour qu'un site soit doublement occupé. Par exemple, dans le cas non interagissant ($U=0$) à demi-remplissage, les 4 états d'occupation $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle$ sont équiprobables, d'où $D = 1/4$. La double occupation est intéressante car c'est la quantité thermodynamique la plus directement affectée par la phase isolante.

La double occupation diminue évidemment lorsque U augmente mais sa dépendance en température peut réserver quelques surprises. En effet, on s'attendrait naturellement à ce qu'elle augmente avec la température mais elle diminue parfois avant d'augmenter. On parle d'*effet Pomranchuck* : si la phase isolante est un isolant paramagnétique avec des corrélations spatiales de courte portée et une grande entropie par site, il devient possible de gagner beaucoup d'énergie libre $F = E - TS$ en tirant avantage de cette entropie *via* le terme TS [33, 38, 67]. On localise alors les particules en chauffant, ce qui fait diminuer la double occupation. Cela permet aussi d'expliquer pourquoi l'hélium 3 liquide (un fermion de spin 1/2) peut être solidifié en étant chauffé à haute pression alors que ce phénomène n'est pas observé pour l'hélium 4 liquide (un boson de spin nul), ou encore pourquoi l'oxyde de vanadium V_2O_3 peut passer d'un état métallique à un état isolant en étant chauffé, comme le montre la flèche verte sur la figure Fig.4.2.

4.3.2 Diagramme de phase général à basse température

La transition entre un métal paramagnétique et un isolant paramagnétique, appelée *transition de Mott*, est un des phénomènes les plus intrigant de la physique de la matière condensée [68]. Cette transition est une conséquence de la compétition entre l'énergie cinétique des électrons et leur interaction locale U . L'énergie cinétique tend à délocaliser les électrons, ce qui mène à des sites doublement occupés et donc à des interactions locales entre électrons. Pour de grandes valeurs de U , les sites doublement occupés deviennent très coûteux d'un point de vue énergétique. Le système peut alors réduire son énergie totale en localisant les électrons. La transition de Mott est une ainsi une *transition localisation-délocalisation*, réfléchissant la dualité onde-corpuscule des électrons. Ce phénomène est observé dans les composés organiques en couches lorsque l'on augmente la pression, ce qui augmente la largeur de bande [69,70]. Dans les supraconducteurs à haute température critique, la pression ne suffit pas à induire cette transition, mais tout indique que ces matériaux sont des isolants de Mott à demi-remplissage [71]. La transition de Mott et les isolants de Mott sont en général incompris pour l'instant.

La figure Fig.4.3 présente une illustration du diagramme de phase T - U d'un système d'électrons corrélés demi-rempli à basse température. La transition de Mott est une transition du premier ordre où les quantités thermodynamiques, comme la double occupation, marquent un *saut* et exhibent de l'*hystérèse*. Cette transition du premier ordre s'accompagne de deux zones de coexistence l'englobant et finit en un point critique où il y a une transition du second ordre : les quantités thermodynamiques y sont continues et y varient doucement. Au-dessus de ce point critique, il y a une région de *crossovers* qui va être étudiée de façon plus approfondie dans le chapitre suivant.

Le magnétisme peut également jouer un rôle très important ici. Dans un réseau bipartite demi-rempli et traité dans le cadre du modèle de Hubbard, la phase paramagnétique est instable devant l'ordre antiferromagnétique à longue portée en dimension $d = 3$ à basse température (seulement à $T = 0$ pour $d = 1$ et $d = 2$ à cause du théorème de Mermin-Wagner). La transition de Mott peut alors être complètement cachée par la phase isolante antiferromagnétique. En effet, on peut voir ça aisément en calculant la moyenne du carré du moment magnétique local

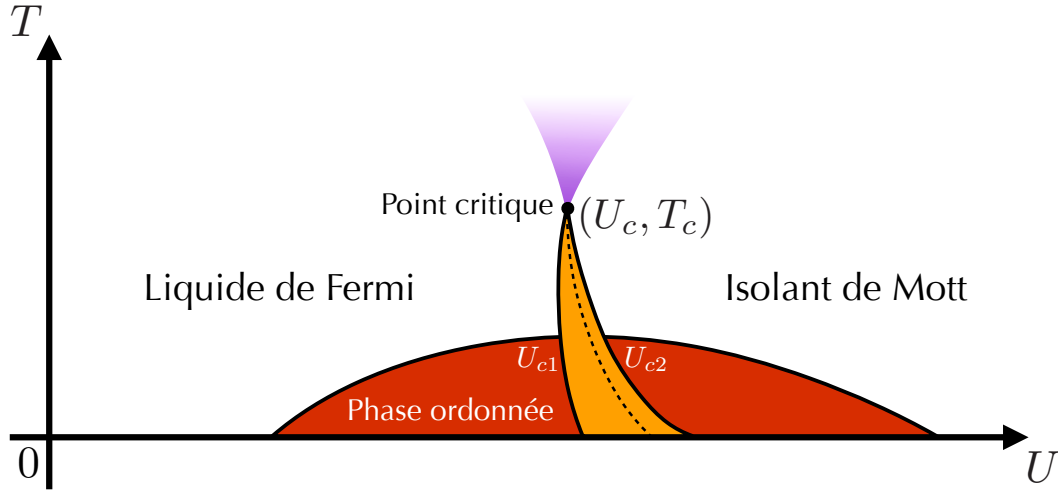


FIGURE 4.3 Illustration du diagramme de phase T - U d'un système d'électrons corrélés demi-rempli présentant une transition de Mott à basse température. On y voit la phase métallique et la phase isolante à des températures inférieures au point critique, ainsi que la région de coexistence (en orange). Cette transition du premier ordre (ligne tiretée), potentiellement cachée par une phase ordonnée (en rouge), se termine en un point critique (U_c, T_c) où une transition du second ordre a lieu et au-dessus duquel existe une région de crossovers (en violet).

$\langle \hat{S}_z^2 \rangle_{\hat{H}}$ dans le cas demi-rempli où $n = \sum_{\sigma} \langle \hat{n}_{\sigma} \rangle_{\hat{H}} = 1$ avec $\langle \hat{n}_{\sigma} \rangle_{\hat{H}} = 1/2$:

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{S}_z^2 \rangle_{\hat{H}} &= \langle (\hat{n}_{\uparrow} - \hat{n}_{\downarrow})^2 \rangle_{\hat{H}} \\
 &= \langle \hat{n}_{\uparrow}^2 \rangle_{\hat{H}} + \langle \hat{n}_{\downarrow}^2 \rangle_{\hat{H}} - 2\langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle_{\hat{H}} \\
 &= 1 - 2D
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

en utilisant le principe d'exclusion de Pauli $\hat{n}_{\sigma}^2 = \hat{n}_{\sigma}$, la définition de D , et la condition de demi-remplissage. On a ainsi

$$\boxed{D = \frac{1 - \langle \hat{S}_z^2 \rangle_{\hat{H}}}{2}}. \tag{4.6}$$

La double occupation D dépend donc fortement du magnétisme. Cependant, certains matériaux, comme les composés organiques en couches, exhibent une grande *frustration magnétique* qui affaiblit la phase antiferromagnétique et révèle la transition de Mott à basse température et les crossovers à haute température [69,70].

Résumé

L'avènement de la physique de Mott a été une des plus grandes surprises de la physique de la matière condensée du 20^{ème} siècle. Depuis 1928, la théorie des bandes de Felix Bloch faisait loi en matière de prédiction du comportement conducteur ou isolant des matériaux solides. L'étude expérimentale de l'oxyde de nickel en 1937 vient changer la donne car ce matériau, possédant un nombre impair d'électrons de valence et devant donc être conducteur d'après la théorie des bandes, est en fait un isolant électrique ! La physique de Mott a mis en avant un aspect important de la physique du gaz d'électrons qui était toujours mis de côté à l'époque par souci de simplicité : les interactions électroniques. En effet, lorsque ces interactions électroniques sont suffisamment fortes, les électrons finissent tout simplement par se localiser et forment alors un véritable "embouteillage électronique". On assiste ainsi à la naissance d'un isolant de Mott !

Par ailleurs, les théories de champ moyen dynamique donnent toutes le même genre de prédiction : à basse température, une transition du premier ordre s'opère entre un liquide de Fermi et un isolant de Mott si aucune phase ordonnée (orbitalement ou magnétiquement) ne vient déstabiliser l'état normal. Cette transition, semblable à la transition liquide/gaz se termine à une certaine température critique en un point critique où la transition est du second ordre. Les quantités thermodynamiques reines pour décrire cette transition sont l'occupation, soit le nombre moyen d'électrons par site, et la double occupation, soit la probabilité d'occuper doublement un site. En effet, l'occupation ne varie pas en fonction du potentiel chimique lorsque ce dernier est dans un gap d'énergie et la double occupation marque un saut en passant la transition de Mott et présente de l'hystérèse caractéristique d'une transition du premier ordre.

Chapitre 5

Crossovers "au-dessus" de la transition de Mott ★

Les travaux présentés dans ce chapitre font l'objet d'un article en préparation [72].

5.1 Un diagramme de phase universel à haute température

Le chapitre précédent nous a montré à quel point la transition de Mott est une caractéristique fascinante de la plupart des matériaux fortement corrélés. Cependant, le domaine de température au-dessus de cette célèbre transition est loin d'être moins intéressant. En effet, à des températures supérieures à la température critique T_c où se trouve le point critique terminant cette transition, le diagramme de phase est *plus universel*. Des systèmes aussi variés que l'oxyde de vanadium, le sulfure de sélénium nickel et les matériaux organiques exhibent le même comportement qualitatif [64,66,73].

La figure Fig.5.1 montre le diagramme de phase T - U d'un système d'électrons corrélés demi-rempli autour du point critique où apparaît un régime de crossovers. Insistons sur le sens du mot "crossover". On peut voir un crossover comme une sorte

de transition progressive sur une certaine plage de paramètres. Un crossover n'a donc rien à voir avec une transition où le changement de phase est abrupt. Ici, les crossovers indiquent un changement des propriétés du matériau lorsque l'interaction électronique locale U augmente. Un premier crossover illustre le passage d'un liquide de Fermi vers un mauvais métal dans lequel la résistivité est anormalement grande. Ce crossover ne sera pas étudié par la suite. Le crossover à forte interaction, appelé *crossover de Mott* et étudié pour la première fois en 1993 [74], marque le passage d'un mauvais isolant où la résistivité diminue lorsque la température augmente vers un isolant de Mott. La ligne tiretée à interaction intermédiaire correspond au crossover entre un mauvais métal et un mauvais isolant, donc entre un comportement globalement métallique (le liquide de Fermi et le mauvais métal) et un comportement globalement isolant (le mauvais isolant et l'isolant de Mott). Ce crossover est caractérisé par le fait que les autres crossovers s'y rejoignent à l'approche du point critique terminant la transition de Mott. En pratique, on approxime la position de ce crossover par un point d'inflexion dans une quantité thermodynamique. Il est étudié pour la première fois aux alentours de 2005 dans le cadre des propriétés thermodynamiques de l'eau par H. E. Stanley [75] qui lui donne son nom : la *ligne de Widom*. Ce nom est choisi en l'honneur de Benjamin Widom, le célèbre physicien et chimiste qui fut un des pionniers de l'étude des phénomènes critiques. Cette ligne semble prolonger la ligne de coexistence de toute transition du premier ordre finissant en un point critique du second ordre, comme la transition liquide-gaz [75,76] ou la transition de Mott [77,78].

Pour approfondir l'analogie entre la physique du point critique de Mott et celle du point critique d'un fluide, attardons-nous sur la figure Fig.5.2. Ici, la pression joue le rôle inverse de U (U/t avec $t \equiv 1$ pris comme unité d'énergie) car l'amplitude de saut t augmente avec la pression sans que cette pression n'affecte vraiment l'interaction coulombienne locale U . On peut également observer une zone de crossover similaire à celle de la figure Fig.5.1. Dans le cas d'un fluide, la densité marque un point d'inflexion et diminue en passant du liquide peu dense au gaz dense lorsque la pression diminue. Par analogie, cela correspond à la double occupation qui marque un point d'inflexion et qui diminue en passant du mauvais métal au mauvais isolant lorsque l'interaction augmente.

Notons qu'une physique similaire existe à dopage fini, loin du demi-remplissage. La *transition de Sordi* y remplace la traditionnelle transition de Mott [79,80] et une ligne de Widom associée à des quantités aussi variées que la double occupation, la susceptibilité de spin ou encore la densité d'états locale à fréquence nulle y est observée [81,82]. Cette *physique de Sordi* de l'état normal à dopage fini, habituellement cachée par la présence de supraconductivité, semble même être fortement liée à cette dernière [82,83]. Nous rendons ici hommage pour la première fois à Giovanni Sordi pour ses travaux pionniers dans la compréhension de la physique de l'état normal des isolants de Mott dopés aux trous et des liens que partage cet état normal avec la supraconductivité.

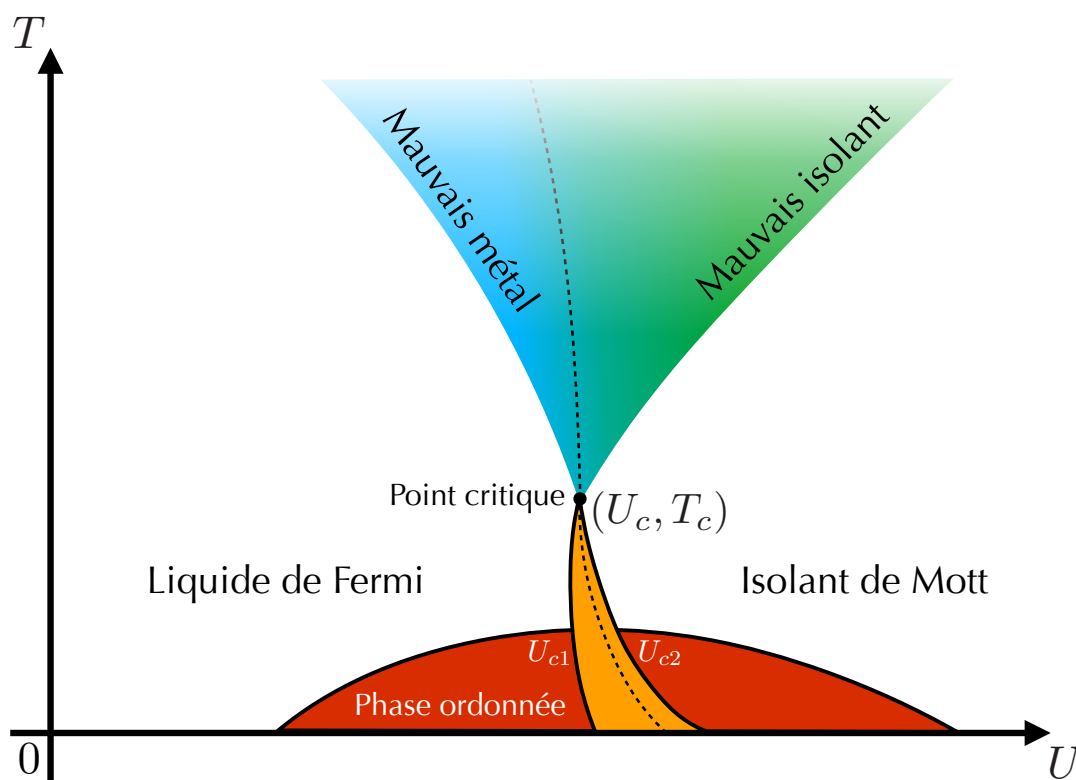


FIGURE 5.1 Transition de Mott et régime de crossovers autour du point critique dans le diagramme de phase T - U d'un système d'électrons corrélés demi-rempli. À des températures inférieures à la température critique T_c , tout est identique à la figure Fig.4.3. À des températures supérieures à T_c , il y a un ensemble de trois crossovers séparant quatre phases : un liquide de Fermi, un mauvais métal, un mauvais isolant et un isolant de Mott paramagnétique. Figure fortement inspirée de [37].

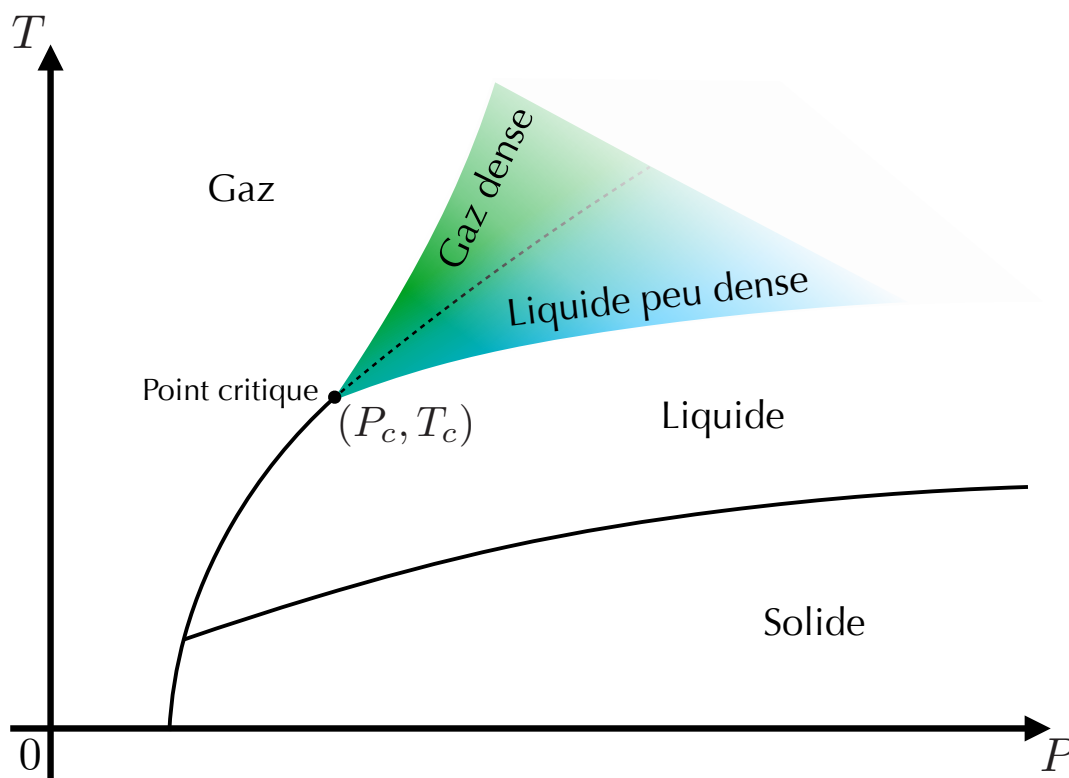


FIGURE 5.2 Diverses transitions et régime de crossovers dans le diagramme de phase T - P d'un fluide autre que l'eau (à cause de la pente positive de la ligne de fusion). La ligne de coexistence liquide-gaz se termine en un point critique (P_c, T_c) au-delà duquel le système devient un fluide supercritique. Cependant, la ligne de Widom (ligne tiretée), caractérisée par un maximum de la longueur de corrélation du fluide supercritique (ou encore, par un point d'inflexion dans sa densité), permet de départager un gaz dense d'un liquide peu dense.

5.2 Méthodes numériques employées

Afin d'étudier ce diagramme de phase, on considère le modèle de Hubbard à une bande en deux dimensions :

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (5.1)$$

où le potentiel chimique μ est fixé pour assurer le demi-remplissage du système. L'amplitude de saut $t = 1$ sert d'unité d'énergie. Pour la température, nous prenons $k_B \equiv 1$ de sorte que $T = 1$ corresponde à une énergie thermique $k_B T = t$.

Bien que les théories de champ moyen soient efficaces à faible interaction, l'étude d'interactions plus fortes requiert l'utilisation de versions améliorées de ces théories, à savoir la DMFT, la CDMFT et l'approximation d'amas dynamique (Dynamical Cluster Approximation ou DCA) [41]. Le tableau Tab.5.1 résume les techniques numériques et les solveurs d'impureté qui seront utilisés par la suite. Un guide pour le lancement des simulations est consultable dans l'annexe Ann.G.

5.3 Caractérisation des crossovers

5.3.1 Lignes de Widom

Comme dit précédemment, la ligne de Widom est habituellement définie comme un point d'inflexion dans des quantités thermodynamiques. Dans les systèmes d'électrons corrélés, il s'agit de la double occupation $D = \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}$. Ainsi, trouver la ligne de Widom revient à chercher un point d'inflexion dans la double occupation. Pour une température fixée, la position U_W de la ligne de Widom est donnée par

$$\left| \frac{\partial D}{\partial U} \right|_{U=U_W} = \text{Max}_U \left| \frac{\partial D}{\partial U} \right|. \quad (5.2)$$

Ici, nous allons aussi chercher un point d'inflexion dans la partie imaginaire de la fonction de Green locale prise à la première fréquence de Matsubara $i\omega_0$. On peut

Abréviation	Technique numérique et solutionneur d'impureté
DMFT Square	DMFT avec relation de dispersion carrée → Rubtsov (à faible interaction) → CT-HYB (à forte interaction)
DMFT Triangle	DMFT avec relation de dispersion triangulaire → CT-HYB
CDMFT 2×2	CDMFT sur un amas carré à 4 sites → CT-HYB
CDMFT Triangle	CDMFT sur un amas triangulaire isotrope à 3 sites → CT-HYB
DCA 2×2	DCA sur un amas carré à 4 sites → Rubtsov

TABLE 5.1 Tableau résumant les techniques numériques et les solutionneurs d'impureté utilisés dans l'étude des crossovers.

bien imaginer que cette quantité est fortement liée à la densité d'états locale en $\omega = 0$. Ceci définit une sorte de *ligne de Widom dynamique* dont la position U_W^d pour une température fixée est donnée par

$$\left| \frac{\partial \text{Im} G^{loc}(i\omega_0)}{\partial U} \right|_{U=U_W^d} = \text{Max}_U \left| \frac{\partial \text{Im} G^{loc}(i\omega_0)}{\partial U} \right|. \quad (5.3)$$

Le processus complet est illustré dans la figure Fig.5.3.

5.3.2 Crossover de Mott

Trouver le crossover de Mott est plus compliqué car il est nécessaire de trouver un critère pour l'ouverture du gap de Mott sans avoir recours, *a priori*, au moindre prolongement analytique. Les détails de calcul sont présentés dans l'annexe Ann.B et cherchent *grosso modo* à trouver la température où le gap de Mott s'ouvre de façon prononcée. On se place donc à une température très basse devant l'énergie de gap

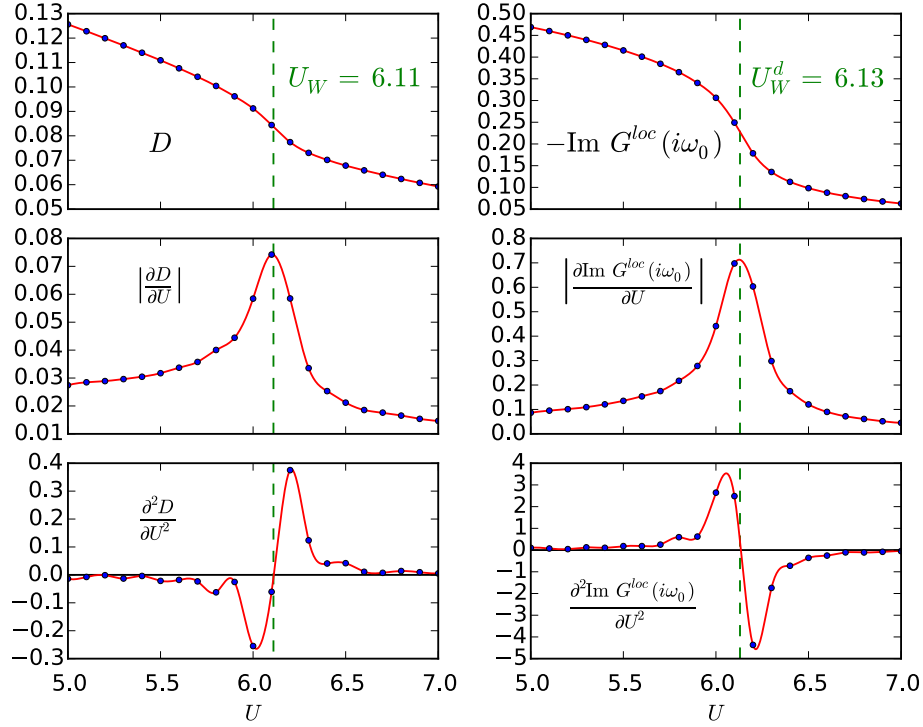


FIGURE 5.3 Gauche : Détermination de la ligne de Widom thermodynamique de la CDMFT 2×2 à $\beta = 11$. **Droite :** Détermination de la ligne de Widom dynamique de la CDMFT 2×2 à $\beta = 11$.

E_g et on sépare l'analyse en deux cas de figure.

Tout d'abord, dans un système symétrique particule-trou, on obtient la relation

$$n \simeq 1 + C(T) \sinh\left(\beta \left[\mu - \frac{U}{2}\right]\right) \quad (5.4)$$

où

$$C(T) = 2T N\left(\frac{E_g}{2}\right) e^{-\beta \frac{E_g}{2}}. \quad (5.5)$$

n est l'occupation électronique du système, μ est le potentiel chimique, et $N(\omega)$ est la densité d'états locale divisée par 2π . L'ajustement de la relation Eq.(5.4) permet d'extraire $C(T)$. On peut ensuite ajuster

$$\ln\left(\frac{\beta C(T)}{2}\right) = -\frac{E_g}{2} \beta + \ln\left(N\left(\frac{E_g}{2}\right)\right) \quad (5.6)$$

pour trouver l'énergie de gap E_g . Plus important encore, ce dernier ajustement est bon seulement tant que le gap est suffisamment ouvert pour une température donnée telle que $E_g \gg T$, ce qui tiendra uniquement à basse température, particulièrement à une température légèrement plus basse que la température d'ouverture du gap. Pour trouver le crossover de Mott, il suffit de trouver la température au-dessus de laquelle l'ajustement n'est plus bon : cela signifiera que le gap est sur le point de se fermer, ce qui peut être vu comme une caractéristique du crossover de Mott. Ce dernier point est illustré à la figure Fig.5.4.

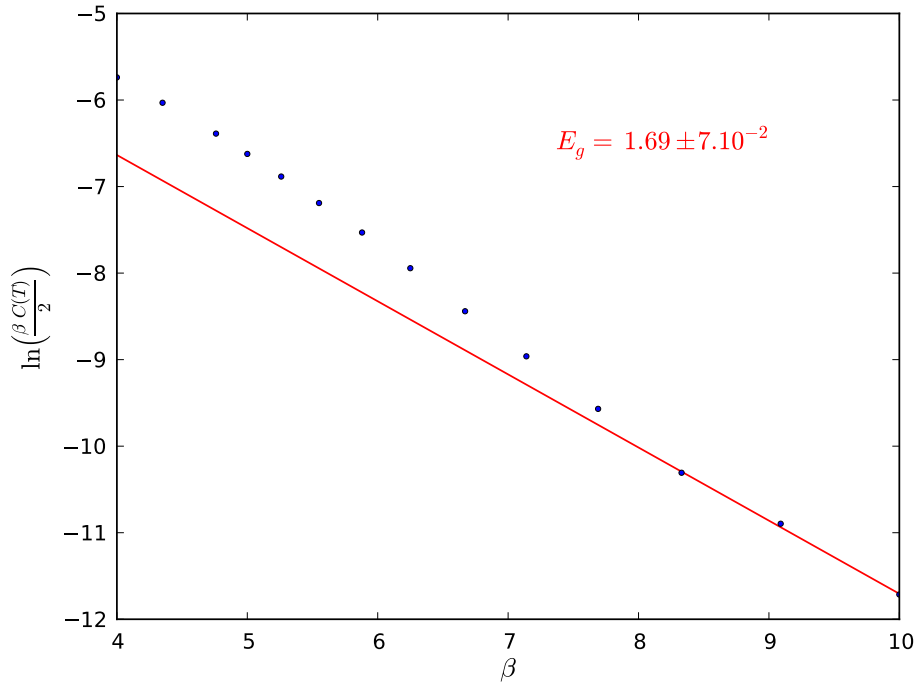


FIGURE 5.4 Détermination du crossover de Mott de la CDMFT 2×2 à $U = 8$. L'ajustement de l'équation Eq.(5.6) semble tenir de $\beta = 8.33$ à $\beta = 10$, ce qui indique que le crossover de Mott est situé à $T \simeq 1/8.33$ et que le gap de Mott doit se fermer à une température légèrement plus haute. La valeur de l'énergie de gap peut être estimée à partir de l'ajustement à $E_g \simeq 1.69$.

Ensuite, dans un système non symétrique particule-trou, trouver le crossover de Mott n'est pas si simple. En effet, la perte de cette précieuse symétrie nous oblige à distinguer le cas dopé aux électrons du cas dopé aux trous, ce qui donne les relations

$$\pm (n - 1) \simeq C_{\pm}(T) e^{\pm\beta\mu} \quad (5.7)$$

où

$$C_{\pm}(T) = T N(\mu_{\pm}) e^{\mp\beta\mu_{\pm}}. \quad (5.8)$$

μ_+ et μ_- représentent les bords du gap (avec $\mu_- < \mu < \mu_+$). On peut alors faire les mêmes ajustements utilisés dans les systèmes symétriques particule-trou pour trouver μ_+ et μ_- , et ensuite extraire $E_g = \mu_+ - \mu_-$. Encore une fois, il suffit de trouver la température au-dessus de laquelle les ajustements

$$\boxed{\ln(\beta C_{\pm}(T)) = \mp\mu_{\pm}\beta + \ln N(\mu_{\pm})} \quad (5.9)$$

ne tiennent plus pour trouver le crossover de Mott. Cependant, il se pourrait que deux crossovers distincts existent cette fois-ci, un pour chaque type de dopage.

5.4 Une nouvelle perspective pour comprendre et appréhender la transition de Mott

5.4.1 Réseaux triangulaires

Commençons avec les réseaux frustrés. La figure Fig.5.5 présente le diagramme de phase $T - U$ pour la DMFT Triangle et la CDMFT Triangle (voir le tableau Tab.5.1). Même si les transitions de Mott ne sont pas représentées ici, on peut remarquer qu'il y a une certaine dépendance en taille d'amas de la position des points critiques de Mott. En fait, on a $(U_c, T_c) \simeq (11.5, 1/20)$ pour la DMFT Triangle et $(U_c, T_c) \simeq (9.4, 1/11)$ pour la CDMFT Triangle. Ceci est très probablement dû au fait que les deux techniques numériques ne prennent pas en compte de la même façon les corrélations antiferromagnétiques. Bien que les lignes de Widom des deux systèmes pourraient converger les unes vers les autres à haute température, il devient difficile de trouver un point d'inflexion dans D ou $\text{Im}G^{loc}(i\omega_0)$ en fonction de U . Les courbes typiques montrées dans les panneaux du haut de la figure Fig.5.3 deviennent en effet de plus en plus droites. Alors que le destin des lignes de Widom semble scellé à haute température, le crossover de Mott de la CDMFT Triangle survit. Notons que le crossover de Mott de la DMFT Triangle n'a pas été représenté sur la figure Fig.5.5 car l'analyse de donnée s'est montrée difficile.

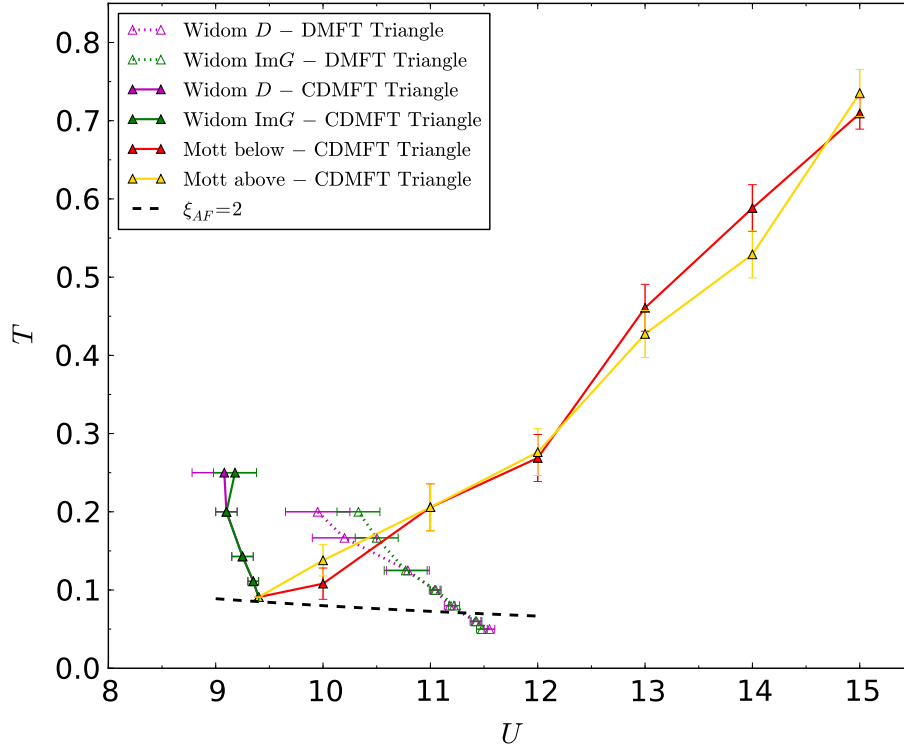


FIGURE 5.5 Crossovers dans le diagramme de phase $T - U$ de la DMFT Triangle et de la CDMFT Triangle. "Widom D " et "Widom $\text{Im}G$ ", et "Mott" correspondent aux lignes de Widom pour la double occupation et la partie imaginaire de la fonction de Green locale prise à la première fréquence de Matsubara, et au crossover de Mott, respectivement. Il y a deux crossovers pour la CDMFT Triangle : un trouvé pour des valeurs de μ supérieures à $\mu_{\text{half-filling}}(T)$ et un autre trouvé pour des valeurs de μ inférieures à $\mu_{\text{half-filling}}(T)$, en accord avec l'équation Eq.(5.9). La ligne suivant laquelle la longueur de corrélation antiferromagnétique ξ_{AF} est égale à deux pas du réseau est obtenue à partir de [84–86].

Maintenant, est-ce que ces crossovers seraient visibles expérimentalement ? Un bon indice pour répondre à cette question nous vient des résultats de développements en séries à haute température pour le modèle d'Heisenberg sur réseau triangulaire qui établissent que la longueur de corrélation antiferromagnétique ξ_{AF} est égale à deux pas du réseau à $T = 0.2 J$ où J est le couplage antiferromagnétique d'Heisenberg [84–86]. Ici, on utilise le traditionnel $J = 4t^2/U$ du modèle t - J pour avoir une grossière idée de la valeur de la longueur de corrélation antiferromagnétique. Pour $U = U_c = 9.4$, on obtient $\xi_{AF} = 2$ à $T \simeq 1/11.76 < T_c$, ce qui signifie que

l'antiferromagnétisme est faible même à des températures juste sous les différents points critiques. Les lignes de Widom pourraient ainsi être vues expérimentalement. Finalement, le crossover de Mott de la CDMFT Triangle serait aussi expérimentalement observable à haute température car il sort du "dôme antiferromagnétique". Ces crossovers sont en fait vus dans les matériaux organiques par exemple [73].

5.4.2 Réseaux carrés

Continuons avec les réseaux non frustrés. La figure Fig.5.6 présente le diagramme de phase $T - U$ pour la DMFT Square, la CDMFT 2×2 et la DCA 2×2 (voir le tableau Tab.5.1). Encore une fois, même si les transitions Mott ne sont pas représentées ici, on peut voir qu'il y a une importante dépendance de la position des points critiques de Mott en fonction de la méthode employée. En fait, on a $(U_c, T_c) \simeq (9.28, 1/10)$ pour la DMFT Square, $(U_c, T_c) \simeq (5.95, 1/12.5)$ pour la CDMFT 2×2 et $(U_c, T_c) \simeq (4.2, 1/20)$ pour la DCA 2×2 . La différence reflète le fait que la longueur de corrélation antiferromagnétique est grande dans le voisinage des points critiques. Par exemple, on peut encore utiliser les résultats des développements en séries à haute température qui donnent cette fois-ci une longueur de corrélation antiferromagnétique ξ_{AF} égale à deux cents pas du réseau à $T = 0.2 J$ pour le modèle d'Heisenberg sur réseau carré. On peut cependant noter que le point critique de la DMFT Square est proche de celui de la DMFT Triangle parce que seules les corrélations locales sont prises en compte, comme remarqué précédemment dans [87]. Quant aux crossovers, les lignes de Widom ne survivent pas à haute température et les crossovers de Mott ont un comportement similaire à celui de la figure Fig.5.5.

De plus, les températures de Néel de la CDMFT 2×2 , T_N , et de la *théorie auto-cohérente à deux particules* (Two Particle Self-Consistent theory ou TPSC, très efficace à faible interaction [25, 26]), T_X , sont montrées. Elles sont définies comme les températures auxquelles la longueur de corrélation antiferromagnétique $\xi_{AF}(T)$ diverge dans le cas de la CDMFT, ou commence à croître exponentiellement dans le cas de la TPSC, pour une valeur donnée de l'interaction locale U . On peut voir que les lignes de Widom sont cachées par les dômes antiferromagnétiques. Seuls les crossovers de Mott de la DMFT Square et de la CDMFT 2×2 sortent de ces dômes. Le crossover de Mott de la DCA 2×2 ferait sûrement la même chose mais la lenteur du solution-

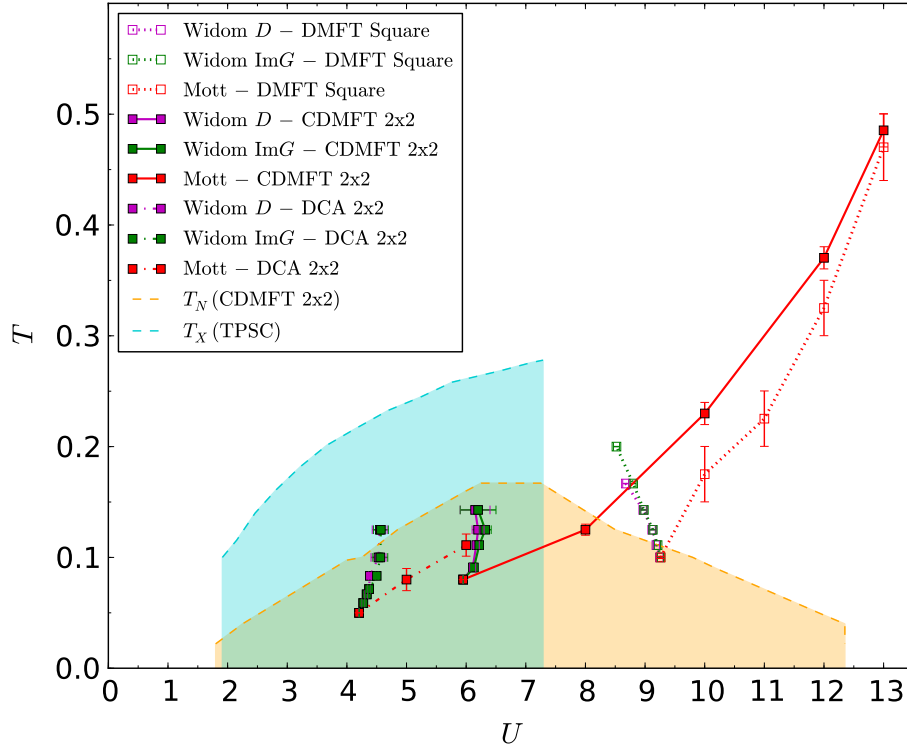


FIGURE 5.6 Crossovers dans le diagramme de phase $T - U$ de la DMFT Square, de la CDMFT 2×2 et de la DCA 2×2 . "Widom D " et "Widom ImG", et "Mott" correspondent aux lignes de Widom pour la double occupation et la partie imaginaire de la fonction de Green locale prise à la première fréquence de Matsubara, et au crossover de Mott, respectivement. Notons que le crossover de Mott de la DCA 2×2 ne s'étend pas à plus grande interaction à cause de la lenteur du solveur d'impureté de Rubtsov à forte interaction qui rend les simulations bien trop lentes pour converger. La température de Néel pour la TPSC est tirée de [88].

neur d'impureté de Rubtsov à forte interaction et la difficulté de la résolution des problèmes d'amas 2×2 rendent les simulations bien trop lentes pour converger.

5.4.3 Comparaison des crossovers de Mott

Il serait certainement intéressant de comparer la physique des réseaux frustrés avec celle des réseaux non frustrés. Il est déjà plutôt intuitif que ces dernières doivent être similaires quelle que soit la taille ou la nature des réseaux lorsque $T \geq t$ car

l'énergie thermique est suffisamment grande pour masquer les détails du réseau [38]. Ceci est illustré à $U = 4$ dans la figure Fig.5.7 où la moyenne du carré de l'aimantation locale en fonction de β est globalement la même parmi les différentes tailles d'amas et techniques numériques quand $T \geq 1 \equiv t$ (ou $\beta \leq 1$). L'extrapolation à la limite thermodynamique tirée de [89] exhibe le comportement attendu avec une augmentation des corrélations antiferromagnétiques à basse température et un effet Pomeranchuk subtil à des températures intermédiaires (voir la sous-section Sous-Sec.4.3.1 pour des détails sur l'effet Pomeranchuk).

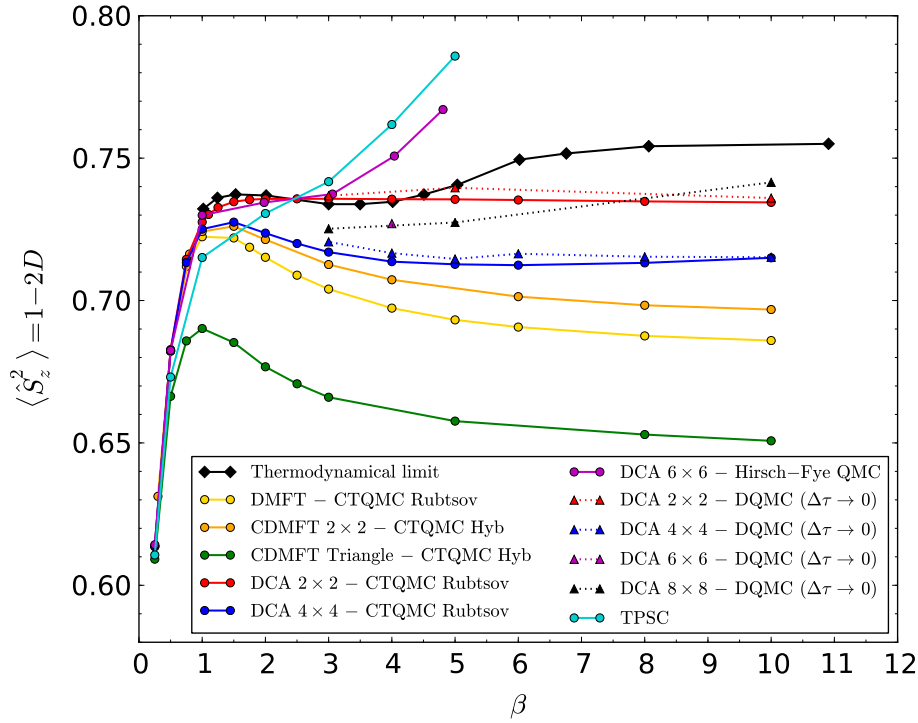


FIGURE 5.7 Étalonnage de plusieurs techniques numériques utilisant l'aimantation locale moyenne $\langle S_z^2 \rangle$ en fonction de β à $U = 4$. Toutes ces techniques numériques sont en accord les unes avec les autres lorsque $T \geq t$ (ou $\beta \leq 1$) car l'énergie thermique est suffisamment grande pour masquer les détails structuraux du réseau. L'extrapolation à la limite thermodynamique est tirée de [89], les données DCA 6×6 sont tirées de [90], et les données TPSC sont tirées de [91]. Les données issues du solveur d'impureté Monte Carlo quantique par déterminants (Determinantal Quantum Monte Carlo ou DQMC, où le temps imaginaire est discrétisé) sont extrapolées dans la limite de temps imaginaire continu.

Comme tous les crossovers de Mott rencontrés précédemment survivent à haute température, on peut se poser la question suivante : est-ce que de telles hautes températures sont nécessaires pour que la physique de l'ouverture du gap de Mott soit la même quelle que soit la nature du réseau ou la technique numérique ? La figure Fig.5.8 propose une comparaison rapide de tous les crossovers de Mott. Ils fusionnent tous vers $T \geq 0.45 t$, ce qui signifie que la physique décrivant l'ouverture du gap de Mott est très semblable pour les différentes natures de réseau et techniques numériques à la moitié de la température précédemment mentionnée !

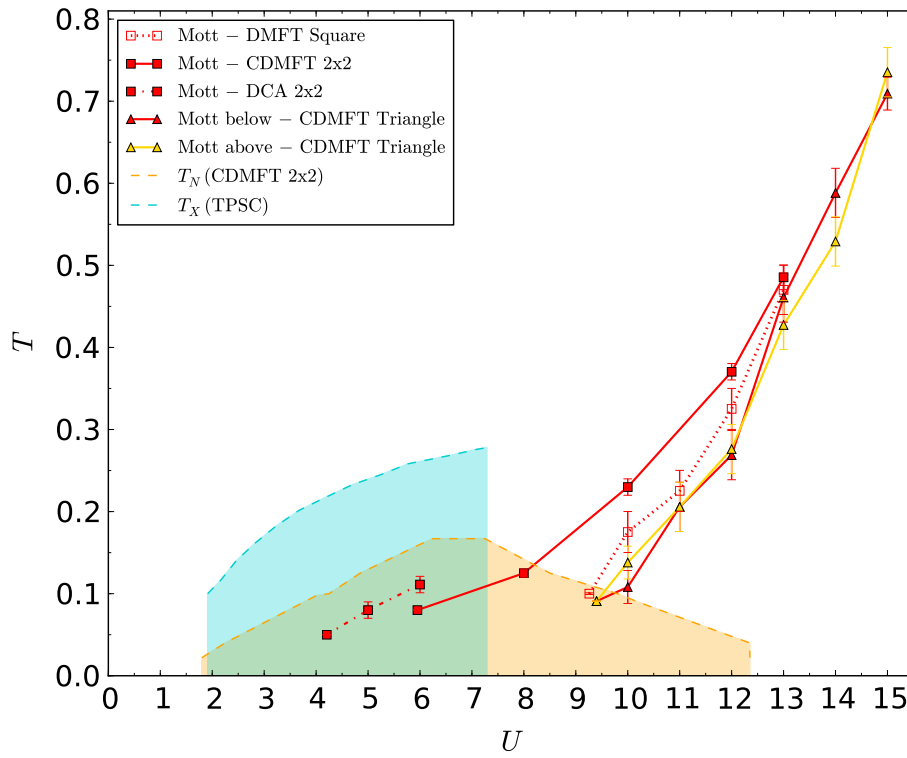


FIGURE 5.8 Diagramme de phase $T - U$ pour les différents crossovers de Mott.

Résumons les résultats précédemment montrés. Lorsque les longueurs de corrélation sont grandes par rapport à la taille des amas, la position de la transition de Mott dépend beaucoup de la méthode (une plaquette à 8 sites traitée par la DCA donne par ailleurs une interaction critique U_c de l'ordre de $6t$ [92]). Néanmoins, les différents types de crossovers observés sont qualitativement les mêmes pour tous les amas ayant des nombres de sites de même parité. En effet, la pente dans le plan $U-T$ n'est pas la même pour $N_c = 4$ et $N_c = 3$ ou 1 parce que cette pente dépend

de l'entropie de l'état isolant par rapport à celle de l'état conducteur (d'après la célèbre relation de Clausius-Clapeyron), or pour un nombre de sites impair il y a un spin net $1/2$ qui donne beaucoup d'entropie à l'état isolant [39, 93]. Donc, même les crossovers inobservables en pratique sur le réseau carré à cause des fluctuations antiferromagnétiques nous disent qu'il suffit de frustrer l'antiferromagnétisme pour les faire ressortir, comme avec le réseau triangulaire. Ce dernier point a été confirmé récemment par l'observation expérimentale de la ligne de Widom associée à un point d'inflexion dans la résistivité de matériaux organiques [94]. Cette ligne de Widom avait déjà été étudiée d'un point de vue théorique précédemment [77, 78], mais ces derniers auteurs ont trouvé une loi d'échelle critique quantique qui nous apparaît surprenante par rapport au point critique à température finie qui est à la base de nos observations. Il serait désirable de pousser cette analyse plus en profondeur.

La transition de Mott, lorsque l'état fondamental est un état ordonné, nous renseigne plutôt sur le comportement de crossovers non triviaux à haute température. Même si la transition elle-même est inobservable, elle laisse des traces dans l'état normal à haute température. Enfin, un crossover est toujours observable, peu importe l'état fondamental : le crossover de Mott.

5.4.4 Comment le prolongement analytique permet d'approfondir notre compréhension des crossovers

Le prolongement analytique, ici fait en utilisant le nouveau et performant programme *OmegaMaxEnt* [58], permet d'approfondir notre compréhension des crossovers. La figure Fig.5.9 présente la densité d'états locale de la CDMFT 2×2 prolongée analytiquement à $\beta = 9$ pour différentes valeurs de l'interaction à travers la ligne de Widom thermodynamique ($U_W \simeq 6.17$) et la ligne de Widom dynamique ($U_W^d \simeq 6.22$). On peut voir que la convexité de la densité d'états à basse énergie $A_{even}^{loc}(\omega)$, dont la parité a été imposée) change à travers les lignes de Widom, comme précédemment observé même à dopage fini [81]. Ceci montre que le système subit une transition progressive vers un état isolant à mesure que l'interaction U augmente. Par ailleurs, l'encart de la figure Fig.5.9 présente une autre ligne de Widom défini par un point d'inflexion dans $A_{even}^{loc}(\omega = 0)$ à $U \simeq 6.24$, qui est du même ordre de grandeur que U_W et U_W^d . Dans sa globalité, la structure de cette densité d'états

n'est pas facile à comprendre parce qu'elle caractérise un régime intermédiaire de température et d'interaction.

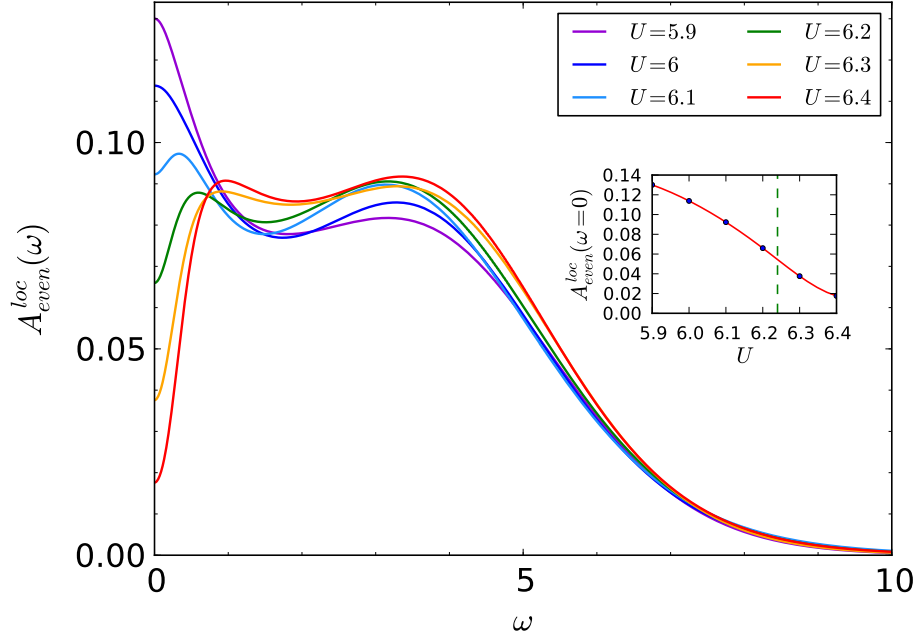


FIGURE 5.9 Densité d'états locale de la CDMFT 2×2 prolongée analytiquement à $\beta = 9$ pour différentes valeurs de l'interaction à travers la ligne de Widom thermodynamique ($U_W \simeq 6.17$) et la ligne de Widom dynamique ($U_W^d \simeq 6.22$). La parité de la densité d'états locale symétrique particule-trou a été imposée, corrigeant légèrement le prolongement analytique. **Encart :** Valeur de la densité d'états locale à $\omega = 0$ en fonction de U . Un point d'inflexion (trait tireté vert) est observé à $U \simeq 6.24$, correspondant à une autre ligne de crossover.

La figure Fig.5.10 présente la densité d'états locale de la CDMFT 2×2 prolongée analytiquement à $U = 8$ pour différentes températures à travers le crossover de Mott. Ici, la structure de la densité d'états est plus aisément compréhensible parce qu'elle ressemble à celle trouvée dans le modèle de Hubbard à forte interaction (ou modèle t - J) [95–97] : le premier pic, dont la largeur est d'ordre $2J = 1$, vient des excitations de spin tandis que le second pic vient des excitations de Hubbard. L'encart de la figure Fig.5.10 montre que le gap de Mott s'ouvre à $T \simeq 0.16$ alors que le crossover de Mott de la CDMFT 2×2 à $U = 8$ avait été trouvé à $T \simeq 0.125$. Ceci est parfaitement normal car les caractérisations du crossover de Mott Eq.(5.6) et Eq.(5.9) requièrent que le gap de Mott soit suffisamment ouvert pour avoir $T \ll E_g$.

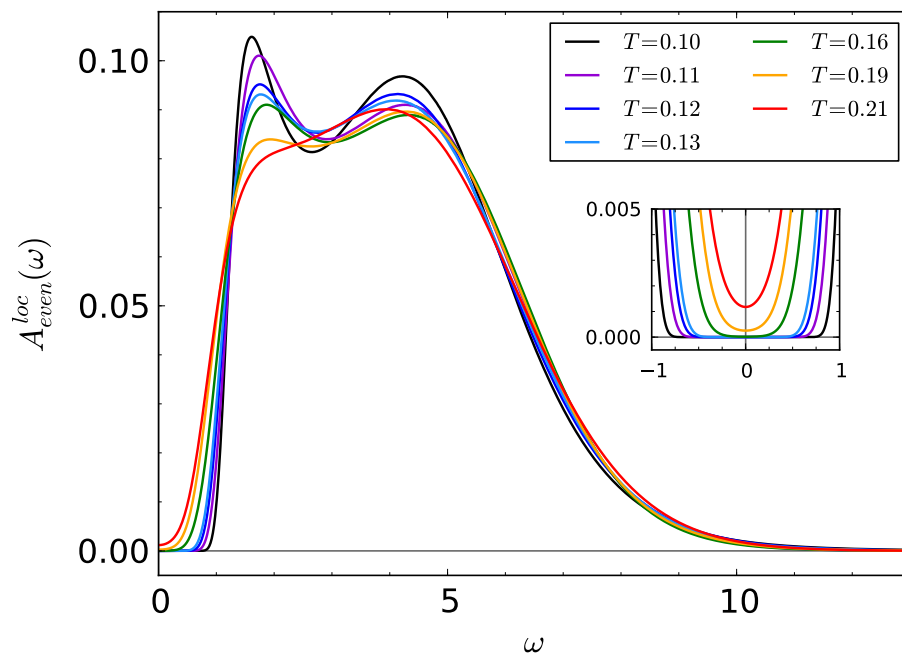


FIGURE 5.10 Densité d'états locale de la CDMFT 2×2 prolongée analytiquement à $U = 8$ pour différentes températures à travers le crossover de Mott. La parité de la densité d'états locale symétrique particule-trou a été imposée, corrigeant légèrement le prolongement analytique. **Encart :** Vue approchée de l'ouverture du gap de Mott autour du niveau de Fermi $\omega = 0$.

Résumé

Alors que le diagramme de phase à basse température des systèmes d'électrons corrélés peut présenter une large variété d'ordres orbitaux ou magnétiques en tout genre, leur diagramme de phase à haute température est plus universel. De façon analogue à la phase supercritique des fluides à hautes température et pression, ces systèmes y exhibent un régime de crossovers où ils passent progressivement du liquide de Fermi à l'isolant de Mott lorsque la force de l'interaction coulombienne purement locale U augmente. Cette thèse se concentre sur deux crossovers en particulier. Il y a tout d'abord la ligne de Widom, caractérisée par un point d'inflexion dans les quantités thermodynamiques du système, qui sépare le régime globalement métallique du régime globalement isolant à haute température en prolongeant la transition de Mott reposant à basse température. Et le crossover de Mott, caractérisé par l'ouverture prononcée du gap de Mott, qui sépare le mauvais isolant de l'isolant de Mott à forte interaction et haute température.

Alors que la ligne de Widom ne survit jamais à très haute température, quelle que soit la technique numérique employée, la situation est toute autre pour le crossover de Mott. En effet, ce crossover survit à toute température étudiée, quelle que soit la technique numérique utilisée ! Mieux, les différents crossovers de Mott se rejoignent tous à partir d'une température de l'ordre de $0.45 t$, soit moins de la moitié de l'amplitude de saut t qui était avant la limite au-delà de laquelle toutes les techniques numériques donnaient des résultats identiques. La survie de ce crossover à haute température lui assure le fait de pouvoir être observé expérimentalement (il en va de même pour la ligne de Widom sur des réseaux magnétiquement frustrés). Ce constat est des plus importants car l'existence même de la transition de Mott à basse température est parfois remise en question au profit d'une phase antiferromagnétique. Nous proposons une nouvelle perspective : même si la transition de Mott n'est pas observable, elle n'est pas "fausse" dans le sens où elle apparaît dans un état normal qui n'est pas stable à basse température mais qui évolue continuellement vers le bon état normal à haute température, où les crossovers se trouvent.

Chapitre 6

Supraconductivité

6.1 Brève revue historique

C'est en 1908 que prend fin une *course au froid* qui durait depuis quelques décennies déjà. En effet, c'est cette année que le chercheur hollandais Heike Kamerlingh Onnes réussit à liquéfier l'hélium à 4 K, ce qui lui vaudra le Prix Nobel de physique 1913. Ce nouvel outil cryogénique lui permet alors de faire des mesures uniques au monde, entre autres, des mesures de résistivité électrique à très basse température dans la matière. Ces mesures étaient particulièrement importantes à l'époque car il était difficile de comprendre ce qu'était le zéro absolu sans l'apport de la mécanique quantique et qu'aucun accord théorique n'existait quant au comportement de la résistivité électrique proche du zéro absolu. Kamerlingh Onnes étudie la résistivité du mercure proche du zéro absolu le 8 avril 1911 à Leiden (Pays-Bas). Le mercure est choisi car il est très facile à purifier à température ambiante sous sa forme liquide. Surprise : la résistivité électrique du mercure tombe à zéro sous 4.17 K. La *supraconductivité* est découverte (de nombreuses références peuvent être trouvées dans [98]) ! On sait maintenant qu'un supraconducteur est en fait défini par deux caractéristiques : une *résistivité électrique nulle* et une répulsion du champ magnétique hors de son volume, appelé l'*effet Meissner*.

C'est ce dernier effet, découvert en 1933 par Walther Meissner et Robert Ochsenfeld [99], qui inspire aux frères Heinz et Fritz London l'idée que la supraconductivité

est une véritable phase de la matière qui est caractérisée par une fonction d'onde électronique macroscopique [100]. Vient alors en 1957 la publication des deux piliers théoriques les plus cruciaux dans la compréhension de la supraconductivité : le *problème de Cooper* et la *théorie BCS* [101, 102], du nom de John Bardeen, Leon Neil Cooper, et John Robert Schrieffer, Prix Nobel de physique 1972. Le problème de Cooper explique que deux électrons en présence d'une mer de Fermi et ressentant la moindre interaction attractive vont former un état lié de paire (la vérification expérimentale de l'existence de ces paires d'électrons viendra en 1961 avec les expériences de quantification du flux [103, 104]). La théorie BCS suppose alors la présence d'une telle interaction pour finalement expliquer et prédire des effets propres à la supraconductivité ! C'est l'effet isotopique, observé peu de temps auparavant dans les différents métaux et alliages supraconducteurs, qui les a guidé vers un mécanisme d'appariement utilisant le *couplage électron-phonon* décrit dans l'illustration naïve de la figure Fig.6.1. Notons que ce qui y est présenté ne permet pas vraiment de comprendre la formation de paires électroniques de petite taille. Davantage de mécanique quantique est nécessaire pour comprendre l'entière du mécanisme d'appariement.

La théorie BCS, qui sera vue plus en détail dans la section suivante, considère originellement un appariement $(\vec{k} \uparrow, -\vec{k} \downarrow)$ symétrique sous le renversement du temps (ce qui justifie l'effet destructeur du champ magnétique sur la supraconductivité) mais ne prend pas en compte la dépendance en fréquence du couplage électron-phonon de la sous-section Sous-Sec.6.3.1. Ceci explique le léger désaccord de la théorie BCS avec certains métaux et alliages où le couplage électron-phonon est particulièrement important, comme le mercure ou le plomb. Il faut encore attendre quelques années pour que l'aspect essentiel de cette dépendance en fréquence soit pris en compte [105, 106] avec la théorie de Migdal et Eliashberg [105, 107] (une très belle revue de cette théorie est disponible dans [108]). Toute supraconductivité expliquée par cette théorie est appelée *supraconductivité conventionnelle*.

Cependant, ce sentiment d'aboutissement est aussi venu avec une grande déception : la théorie d'Eliashberg établit que la température critique maximale pouvant être atteinte par un supraconducteur à une bande dont l'appariement provient du couplage électron-phonon est d'environ 23 K. Cette température critique maximale est par ailleurs atteinte par l'alliage de niobium-germanium Nb_3Ge , comme le

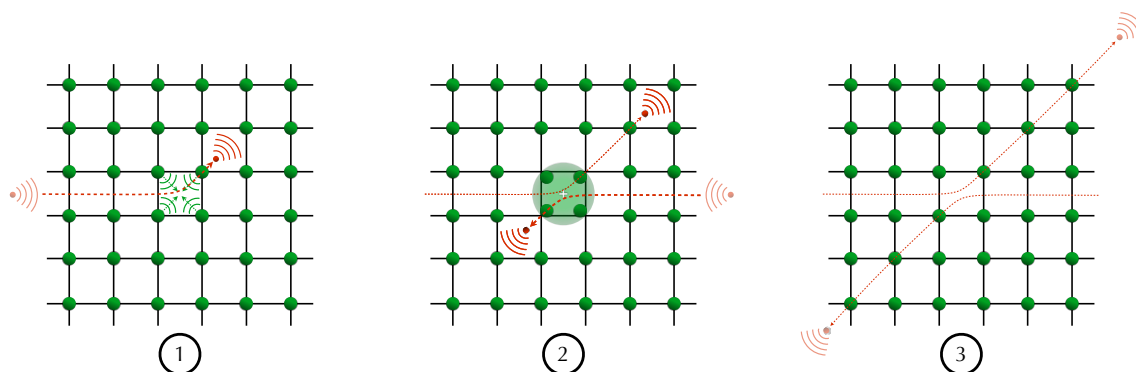


FIGURE 6.1 Illustration naïve du mécanisme d'appariement *via* l'interaction électron-phonon. **Étape 1** : Un électron (particule-onde en rouge) se meut dans une certaine partie du réseau d'ions (en vert) et se fait diffuser par le réseau. Il faut imaginer que le déplacement du réseau forme un nouveau réseau de diffraction pour l'électron. Ce dernier attire par la même occasion certains ions à lui. **Étape 2** : Les ions attirés forment un surplus de charges positives (à cause de l'inertie de masse de ces derniers) qui attire un deuxième électron un peu plus tard. Cet électron est également diffusé dans la même direction que le premier électron, mais en sens opposés. **Étape 3** : Le retard dans l'interaction permet aux électrons d'éviter de se repousser trop fortement. Ils peuvent ainsi former une paire de Cooper, symétrique sous le renversement du temps.

montre la figure Fig.6.2. Notons que le diborure de magnésium MgB_2 est un supraconducteur conventionnel mais possède deux bandes électroniques au niveau de Fermi, ce qui lui permet d'atteindre une température critique de 39 K [109,110]. Quoiqu'il en soit, la recherche en supraconductivité s'arrête alors presque complètement. En effet, impossible de faire des applications concrètes avec des matériaux devant être refroidis à de telles températures...

Le domaine de la supraconductivité reprend son envol en 1986 lors de la découverte des *supraconducteurs à haute température critique*, ou *cuprates* par Johannes Georg Bednorz et Karl Alexander Müller [111], Prix Nobel de physique 1987. Le premier composé synthétisé, LaBaCuO_4 , présentait, une fois dopé au strontium, une température critique de l'ordre de 40 K, soit une température supérieure aux 23 K prévus par la théorie d'Eliashberg, malgré le fait que les cuprates puissent être globalement considérés comme des matériaux à seule une bande effective (nous en reparlerons à la sous-section Sous-Sec.6.5.8). Cela signifie que leur physique ne peut

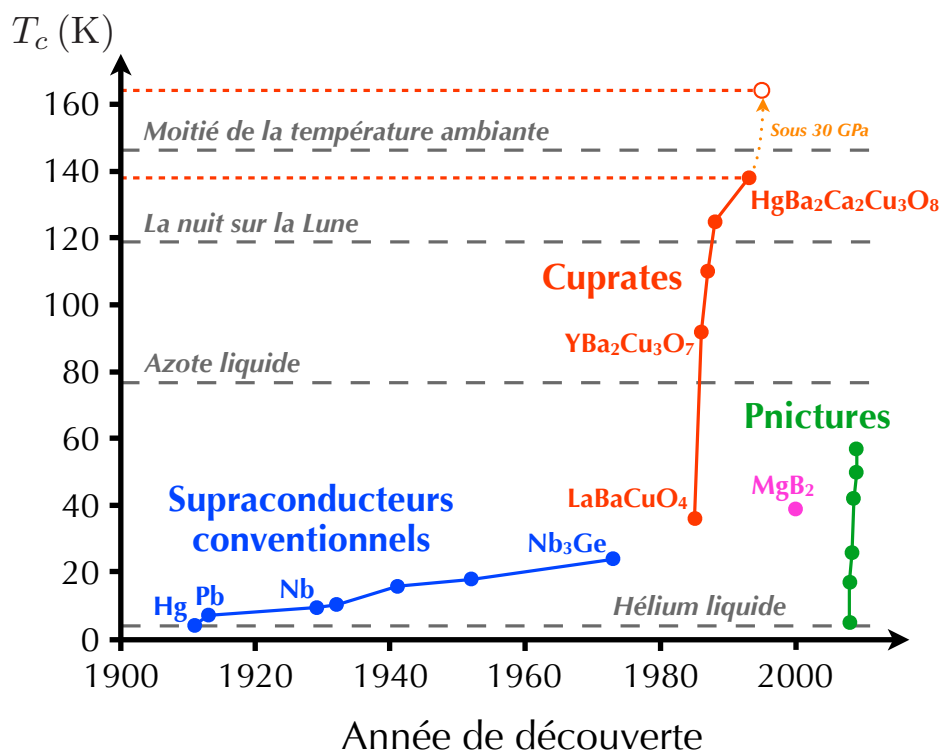


FIGURE 6.2 Évolution de la température critique en fonction des années de découverte pour différents supraconducteurs. Les traits tiretés rouges marquent les records de température critique de 138 K à pression ambiante et de 164 K sous 30 GPa de pression.

être décrite par la théorie BCS et qu'ils présentent quelque chose de singulièrement nouveau : on parle de *supraconductivité non conventionnelle*. Depuis, la supraconductivité a été observée à 138 K dans le composé $\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ [112] et à 164 K dans un composé similaire au mercure sous 30 GPa de pression [113]. Il est important de noter que tous les cuprates ont en commun des plans de cuivre et d'oxygène. Bien que nous nous concentrerons sur la famille des cuprates par la suite, d'autres familles de matériaux supraconducteurs sont tout aussi fascinantes, notamment les *pnictures* où supraconductivité et magnétisme se mélangent de façon inédite [114]. De récentes mesures dans le sulfure d'hydrogène H_2S marquent même le retour de la supraconductivité conventionnelle avec un composé supraconducteur à 190 K sous pression à $P \simeq 150$ GPa [115]. Ici, les atomes d'hydrogène, très légers, semblent être essentiels à la création de modes phononiques de haute fréquence donnant naissance à un fort couplage électron-phonon.

6.2 Supraconductivité conventionnelle à faible couplage - Théorie BCS

6.2.1 Diagonalisation du hamiltonien effectif

On a vu dans la section précédente que l'interaction effective responsable de l'appariement des électrons dans le cadre de la supraconductivité conventionnelle était l'interaction électron-phonon. On se place ici dans la *limite de couplage faible* où la dépendance en fréquence de cette interaction peut être négligée. On pose l'interaction effective $V(\vec{r} - \vec{r}')$ entre deux électrons qui est ainsi vue comme étant une *interaction instantanée*. Le hamiltonien de départ s'exprime comme

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \quad (6.1)$$

où $\xi_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / 2m - \mu$ et $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ est la transformée de Fourier spatiale de l'interaction électronique à deux corps. Les termes présentés ici sont ceux qui sont supposés pertinents dans le cadre de la supraconductivité conventionnelle.

La théorie BCS est une théorie de champ moyen où l'*approximation de champ moyen* va consister à écrire

$$\hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} = \langle \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \rangle + \left[\hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} - \langle \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \rangle \right] \quad (6.2)$$

et à négliger tous les termes ne couplant pas un champ moyen à un couple d'opérateurs fermioniques. L'équation Eq.(6.2) est justifiée par le fait que pour un grand nombre de particules, les fluctuations de l'opérateur $\hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow}$ autour de sa valeur moyenne seront très petites. Le but final est d'obtenir un hamiltonien grand-canonique quadratique qui sera facile à diagonaliser. On obtient

$$\hat{\mathcal{H}} \simeq \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \left[\hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \langle \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \right]. \quad (6.3)$$

Remarquons que le terme

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle \quad (6.4)$$

a tout simplement été omis dans l'équation précédente. Il est en effet inutile à la compréhension de la supraconductivité tant que l'on ne cherche pas à calculer l'énergie totale de l'état BCS pour la comparer à celle d'une éventuelle autre phase en compétition avec la supraconductivité. On définit alors le *gap supraconducteur*

$$\Delta_{\vec{k}} = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle \quad (6.5)$$

qui joue le rôle de *paramètre d'ordre* pour la phase supraconductrice car la moyenne thermodynamique de l'opérateur de destruction de paire est nulle en dehors de cette phase. On écrit finalement le hamiltonien BCS

$$\hat{\mathcal{H}}_{BCS} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} - \sum_{\vec{k}} \left(\Delta_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\vec{k}}^* \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \right). \quad (6.6)$$

L'hamiltonien effectif trouvé ici est alors quadratique en opérateurs fermioniques, contrairement à l'hamiltonien originel qui était quartique, et on peut utiliser une *transformation de Bogoliubov-Valatin* pour le diagonaliser.

L'idée est d'opérer une transformation unitaire pour trouver de nouveaux opérateurs, respectant les mêmes lois d'anticommutation que les opérateurs $\hat{c}$ et $\hat{c}^\dagger$, qui rendent $\hat{\mathcal{H}}_{BCS}$ diagonal. Dans le cas de l'hamiltonien BCS, cela se fait très facilement en écrivant l'hamiltonien Eq.(6.6) sous forme matricielle :

$$\hat{\mathcal{H}}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} & -\Delta_{\vec{k}} \\ -\Delta_{\vec{k}}^* & -\xi_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

avec $\xi_{-\vec{k}} = \xi_{\vec{k}}$ pour un réseau symétrique sous inversion spatiale. Les énergies

propres sont $\lambda_{\vec{k}}^{\pm} = \pm E_{\vec{k}}$ avec

$$\boxed{E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}}. \quad (6.8)$$

Les vecteurs propres vérifient alors

$$\begin{pmatrix} \pm E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}} & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}}^* & \pm E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix} = 0. \quad (6.9)$$

D'où

$$(\pm E_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}}) a_{\vec{k}} = -\Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}. \quad (6.10)$$

On sait aussi que la transformation ne sera unitaire que si

$$|a_{\vec{k}}|^2 + |b_{\vec{k}}|^2 = 1. \quad (6.11)$$

Le gap $\Delta_{\vec{k}}$ pouvant être complexe, les vecteurs propres peuvent l'être aussi. Les valeurs propres Eq.(6.8) sont cependant réelles car la matrice de départ est hermitienne. En utilisant l'équation Eq.(6.10) dans la condition de normalisation Eq.(6.11), on a

$$|a_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right), \quad (6.12)$$

$$|b_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right). \quad (6.13)$$

On définit ainsi

$$\boxed{u_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}} e^{i\varphi_{u\vec{k}}}}, \quad (6.14)$$

$$\boxed{v_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}} e^{i\varphi_{v\vec{k}}}} \quad (6.15)$$

où les facteurs de phase ajoutés ne sont aucunement déterminés par les contraintes Eq.(6.10) et Eq.(6.11). On a

$$\boxed{|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1}. \quad (6.16)$$

On peut néanmoins déterminer que le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_{\vec{k}}^+ = E_{\vec{k}}$ s'écrit

$$\begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix}_{E_{\vec{k}}} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} \\ -v_{\vec{k}}^* \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

en vérifiant l'équation Eq.(6.10) qui donne

$$\Delta_{\vec{k}} = |\Delta_{\vec{k}}| e^{i(\varphi_{u\vec{k}} + \varphi_{v\vec{k}})} . \quad (6.18)$$

Pour le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_{\vec{k}}^- = -E_{\vec{k}}$, on peut choisir

$$\begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix}_{-E_{\vec{k}}} = \begin{pmatrix} -v_{\vec{k}} \\ -u_{\vec{k}}^* \end{pmatrix} \quad (6.19)$$

pour obtenir le même gap Eq.(6.18) en passant par la condition Eq.(6.10), tout en satisfaisant l'unitarité de la matrice de transformation

$$\boxed{\mathcal{U} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & -v_{\vec{k}} \\ -v_{\vec{k}}^* & -u_{\vec{k}}^* \end{pmatrix}} \quad (6.20)$$

avec $\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = I_2$, la matrice identité 2×2 . Notons que la convention de signe choisie ici donne le déterminant inhabituel $\text{Det } \mathcal{U} = -1$. On a désormais

$$\mathcal{U}^\dagger \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} & -\Delta_{\vec{k}} \\ -\Delta_{\vec{k}}^* & -\xi_{\vec{k}} \end{pmatrix} \mathcal{U} = \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (6.21)$$

d'où

$$\hat{\mathcal{H}}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \end{pmatrix} \mathcal{U} \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \mathcal{U}^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} . \quad (6.22)$$

On peut finalement introduire une nouvelle paire d'opérateurs définis par

$$\begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}1} \\ \hat{\gamma}_{\vec{k}2}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{U}^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

ou encore

$$\begin{cases} \hat{\gamma}_{\vec{k}1} &= u_{\vec{k}}^* \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} - v_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \\ \hat{\gamma}_{\vec{k}2} &= -u_{\vec{k}}^* \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} - v_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \end{cases}, \quad (6.24)$$

et

$$\begin{cases} \hat{\gamma}_{\vec{k}1}^\dagger &= u_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger - v_{\vec{k}}^* \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \\ \hat{\gamma}_{\vec{k}2}^\dagger &= -u_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger - v_{\vec{k}}^* \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \end{cases}. \quad (6.25)$$

Ces opérateurs fermioniques sont les opérateurs de création et d'annihilation des *excitations* de l'état supraconducteur, soient des *superpositions quantiques d'électrons et de trous*. Ils diagonalisent le hamiltonien BCS :

$$\hat{\mathcal{H}}_{BCS} = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}1}^\dagger & \hat{\gamma}_{\vec{k}2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}1} \\ \hat{\gamma}_{\vec{k}2}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (6.26)$$

6.2.2 Équation de gap

On peut utiliser les équations Eq.(6.24) et Eq.(6.25) pour écrire

$$\begin{cases} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} &= u_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}1} - v_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}2}^\dagger \\ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} &= -v_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}1}^\dagger - u_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}2} \end{cases}. \quad (6.27)$$

On peut désormais calculer le gap Eq.(6.5) :

$$\begin{aligned}
\Delta_{\vec{k}} &= -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle (v_{\vec{k}'} \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger + u_{\vec{k}'} \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}) (u_{\vec{k}'} \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} - v_{\vec{k}'} \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} - \hat{\gamma}_{\vec{k}'2} \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger \rangle \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \sqrt{1 - \frac{\xi_{\vec{k}'}^2}{E_{\vec{k}'}^2}} e^{i(\varphi_{u\vec{k}'} + \varphi_{v\vec{k}'})} \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} - \hat{\gamma}_{\vec{k}'2} \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{|\Delta_{\vec{k}'}|}{2E_{\vec{k}'}} e^{i(\varphi_{u\vec{k}'} + \varphi_{v\vec{k}'})} \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} - \hat{\gamma}_{\vec{k}'2} \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger \rangle. \tag{6.28}
\end{aligned}$$

Pour obtenir l'équation de gap, il faut encore utiliser l'équation Eq.(6.18) ainsi que le fait que

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} - \hat{\gamma}_{\vec{k}'2} \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger \rangle &= \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} - (1 - \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}) \rangle \\
&= -(1 - \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'1}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'1} \rangle - \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}'2}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'2} \rangle) \\
&= -(1 - 2f(E_{\vec{k}'})) \\
&= -\tanh\left(\frac{\beta E_{\vec{k}'}}{2}\right) \tag{6.29}
\end{aligned}$$

où $f(E_{\vec{k}'}) = (e^{\beta E_{\vec{k}'}} + 1)^{-1}$ est la distribution de Fermi-Dirac car les opérateurs $\hat{\gamma}_\alpha^\dagger \hat{\gamma}_\alpha$ comptent des quasi-particules fermioniques sans potentiel chimique associé. On a finalement l'équation de gap :

$$\boxed{\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}'}} (1 - 2f(E_{\vec{k}'})) = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\vec{k}'}}{2}\right)}. \tag{6.30}}$$

Nous reparlerons de cette équation dans la section Sec.6.4 pour explorer la possibilité d'envisager d'autres mécanismes d'appariement dans le cadre de la supraconductivité non conventionnelle.

6.2.3 Cohérence de phase macroscopique

Suivons la démarche de [116] en posant la quantité

$$C_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{1 - 2f(E_{\vec{k}})}{2E_{\vec{k}}}} = \sqrt{\frac{1}{2E_{\vec{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\vec{k}}}{2}\right)} \quad (6.31)$$

qui est réelle et positive. On peut alors réécrire l'équation Eq.(6.30) :

$$[C_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}] = - \sum_{\vec{k}'} C_{\vec{k}} V_{\vec{k}\vec{k}'} C_{\vec{k}'} [C_{\vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'}] . \quad (6.32)$$

Cela peut être mis sous la forme plus simple

$$X_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} \mathcal{R}_{\vec{k}\vec{k}'} X_{\vec{k}'} \quad (6.33)$$

où $\mathcal{R}$ est une matrice réelle symétrique qui possède donc des vecteurs propres réels. Imaginons maintenant qu'on écrive $\forall \vec{k}, X_{\vec{k}} = \tilde{X}_{\vec{k}} e^{i\varphi_{\vec{k}}}$ avec $\tilde{X}_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$:

$$\left[\tilde{X}_{\vec{k}} e^{i\varphi_{\vec{k}}} \right] = \sum_{\vec{k}'} \mathcal{R}_{\vec{k}\vec{k}'} \left[\tilde{X}_{\vec{k}'} e^{i\varphi_{\vec{k}'}} \right] . \quad (6.34)$$

On a alors

$$\tilde{X}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}'} \mathcal{R}_{\vec{k}\vec{k}'} \left[\tilde{X}_{\vec{k}'} e^{i(\varphi_{\vec{k}'} - \varphi_{\vec{k}})} \right] . \quad (6.35)$$

Le seul moyen d'assurer que les deux membres de cette équation soient réels est de prendre

$$\boxed{\forall \vec{k}', \quad \varphi_{\vec{k}'} = \varphi_{\vec{k}} = \varphi} . \quad (6.36)$$

En se rappelant que $X_{\vec{k}} = C_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}$ avec $C_{\vec{k}} \in \mathbb{R}$, on peut être certain que la phase $\varphi_{\vec{k}}$ est en fait la phase globale associée à toutes les paires de Cooper ($\vec{k} \uparrow, -\vec{k} \downarrow$) d'après la définition Eq.(6.5). Ainsi, toutes les paires d'électrons sont *cohérentes de phase* dans l'état supraconducteur !

6.3 Supraconductivité conventionnelle à fort couplage

6.3.1 La colle d'appariement électron-phonon

Une des façons les plus simples de comprendre les bases de la colle d'appariement électron-phonon mentionnée précédemment est de regarder les travaux de Bardeen et Pines tenant compte des interactions électron-électron ainsi que des degrés de liberté du réseau [117]. Ils obtiennent alors l'*interaction effective* suivante entre deux électrons de vecteurs d'onde $\vec{k}$ et $\vec{k}'$ et d'énergies $\xi_{\vec{k}}$ et $\xi_{\vec{k}'}$, [108] :

$$V_{\vec{k}\vec{k}'}^{eff} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0((\vec{k} - \vec{k}')^2 + k_{TF}^2)} \left[1 + \frac{\omega_{ph}^2(\vec{k} - \vec{k}')}{(\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'})^2 - \omega_{ph}^2(\vec{k} - \vec{k}')} \right] \quad (6.37)$$

où $\vec{k}_{TF}$ est le vecteur d'onde de Thomas-Fermi et $\omega_{ph}(\vec{k})$ est la relation de dispersion des phonons. Le vecteur d'onde de Thomas-Fermi de norme

$$k_{TF} = \sqrt{\frac{me^2k_F}{\epsilon_0\pi^2\hbar^2}} \quad (6.38)$$

intervient dans le cadre de l'approximation de Thomas-Fermi permettant de traiter l'écrantage électrique dans un gaz d'électrons suffisamment dense, de vecteur d'onde de Fermi $\vec{k}_F$. Pour simplifier l'analyse de la physique de l'équation Eq.(6.37), posons dès lors

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}' \quad \text{et} \quad \xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'} \equiv \omega \quad (6.39)$$

où ω dépend implicitement de $\vec{k}$ et $\vec{k}'$. On peut ainsi réécrire l'interaction effective Eq.(6.37) sous la forme

$$V_{\vec{q}}^{eff}(\omega) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(q^2 + k_{TF}^2)} \left[1 + \frac{\omega_{ph}^2(\vec{q})}{\omega^2 - \omega_{ph}^2(\vec{q})} \right]. \quad (6.40)$$

On peut typiquement voir $\vec{q}$ comme étant le vecteur d'onde de la paire d'électrons et la fréquence ω comme étant l'énergie mise en jeu lors de l'interaction entre les

deux électrons. On remarque alors que

$$\begin{aligned}\omega < \omega_{ph}(\vec{q}) &\implies V_{\vec{q}}^{eff}(\omega) < 0, \\ \omega > \omega_{ph}(\vec{q}) &\implies V_{\vec{q}}^{eff}(\omega) > 0.\end{aligned}\tag{6.41}$$

L'interaction effective est attractive à basse fréquence mais répulsive à haute fréquence. Comment expliquer cela ?

En fait, il faut tout d'abord savoir à quoi correspond concrètement une basse fréquence ou une haute fréquence. La physique de la transformation de Fourier temporelle nous apprend qu'une basse fréquence est associée à un intervalle de temps long tandis qu'une haute fréquence est associée à un intervalle de temps court. On peut ainsi comprendre ce qui se passe ici. À basse fréquence, les électrons s'apparient de façon *retardée* : un électron crée la surcharge positive dans le réseau et ce n'est qu'après un temps relativement long qu'un deuxième électron va être attiré. L'éloignement spatial des deux électrons explique que la répulsion coulombienne soit faible entre ces derniers, d'où la nature attractive de l'interaction. À haute fréquence cependant, les électrons s'apparient de façon *quasi instantanée* : un électron crée la surcharge positive dans le réseau et un deuxième électron est attiré presque immédiatement. La proximité des deux électrons explique le fait que la répulsion coulombienne soit très forte entre ces derniers, d'où la nature répulsive de l'interaction (on parle de *pseudo-potentiel coulombien* dans le cadre de la théorie d'Eliashberg). L'interaction électron-phonon est alors considérée comme étant une *colle d'appariement* car l'appariement se fait à basse fréquence et ne varie donc que sur de grands intervalles de temps.

6.3.2 Formalisme de Nambu - Fonction de Green et fonction spectrale anormales

Dans l'état supraconducteur, l'existence de paires d'électrons justifie le fait de travailler avec des fonctions de Green à deux corps différentes des *fonctions de Green normales*

$$\mathcal{G}_{\sigma}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}(\tau) \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}\tag{6.42}$$

rencontrées jusqu'à maintenant. Ces nouvelles fonctions de Green sont construites à partir de deux opérateurs $\hat{c}$ ou de deux opérateurs $\hat{c}^\dagger$ afin de détruire ou de créer une paire d'électrons. La meilleure façon d'ajouter ces nouvelles fonctions de Green au problème que nous étudions et d'utiliser le *formalisme de Nambu* [118] qui considère les *spineurs de Nambu*

$$\hat{\alpha}_{\vec{k}}(\tau) = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger(\tau) \end{pmatrix} \quad \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger(\tau) = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger(\tau) & \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(\tau) \end{pmatrix} \quad (6.43)$$

pour définir la fonction de Green matricielle

$$G(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\alpha}_{\vec{k}}(\tau) \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_\uparrow(\vec{k}, \tau) & \mathcal{F}(\vec{k}, \tau) \\ [\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)]^* & -\mathcal{G}_\downarrow(-\vec{k}, -\tau) \end{pmatrix} \quad (6.44)$$

où

$$\mathcal{F}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (6.45)$$

est généralement appelée *fonction de Green anormale* ou *fonction de Gork'ov*. On peut dès lors définir une *fonction spectrale anormale* $\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)$ via la représentation spectrale

$$\mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega}. \quad (6.46)$$

Sachant que les électrons supraconducteurs forment des paires $(\vec{k} \uparrow, -\vec{k} \downarrow)$, on remarque que cette fonction de Green anormale représente l'amplitude de probabilité du processus détruisant une paire de Cooper sur un temps imaginaire τ . Quant au sens physique de la fonction spectrale anormale, il est très important de remarquer qu'elle n'est pas forcément positive, contrairement aux fonctions spectrales normales, car elle n'est pas construite à partir d'une fonction de Green associant des opérateurs conjugués hermitiques l'un de l'autre. Nous y reviendrons plus en détail dans le chapitre Chap.7.

Notons que pour faire apparaître $[\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)]^*$ dans l'équation Eq.(6.44), il faut bien faire attention à la différence Eq.(2.112) entre $[\hat{c}_\alpha(\tau)]^\dagger$ et $\hat{c}_\alpha^\dagger(\tau)$. On peut aussi

remarquer que ce formalisme avait en fait déjà été utilisé à l'équation Eq.(6.7) lors de la diagonalisation du hamiltonien effectif BCS.

6.3.3 Fonction de gap dans la théorie d'Eliashberg

Dans le cadre du formalisme de Nambu, on peut utiliser les fonctions de Green normale et anormale dépendantes de la fréquence afin de définir une *fonction de gap* $\Delta(\omega)$ qui dicte le comportement des fonctions spectrales normale et anormale locales d'un *système supraconducteur isotrope*. Les calculs détaillés dans l'annexe Ann.C.1 et tirés en partie d'un article très complet de Scalapino, Schrieffer, et Wilkins [119] donnent les fonctions spectrales normale et anormale locales suivantes :

$$\mathcal{A}_{loc}(\omega) = 2\pi N(0) \operatorname{Re} \left(\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right) \quad (6.47)$$

et

$$\mathcal{A}_{an}(\omega) = 2\pi N(0) \operatorname{Re} \left(\frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right). \quad (6.48)$$

Une des preuves les plus directes en faveur de la théorie d'Eliashberg est venue de la dépendance en fréquence de cette fonction de gap mesurée par effet tunnel [120]. En effet, les signatures des fréquences de phonons ainsi que de leurs harmoniques dans la densité d'états étaient très bien expliquées par la théorie [119, 121, 122].

Deux points sont à noter. Tout d'abord, l'hypothèse d'isotropie faite ici s'applique extrêmement bien aux supraconducteurs conventionnels. Nous en reparlerons dans la section Sec.6.4. Enfin, on peut généraliser la définition de la fonction de gap en dehors de la théorie d'Eliashberg [123, 124]. Les calculs détaillés dans l'annexe Ann.C.2 donnent

$$\Delta(\vec{k}, \omega) = \frac{2\omega \mathcal{F}(\vec{k}, \omega)}{\mathcal{G}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{G}^*(\vec{k}, -\omega)}. \quad (6.49)$$

6.4 Symétrie du gap supraconducteur et appariement singulet

La symétrie du gap supraconducteur (thermodynamique) correspond à la façon dont le gap varie et change de signe dans l'espace des vecteurs d'onde. Par exemple, les supraconducteurs conventionnels sont caractérisés par un gap isotrope qui ne dépend donc pas de $\vec{k}$: on parle d'un gap de *symétrie s* (ou d'un gap *s-wave*) par analogie avec la forme sphérique isotrope d'une orbitale *s*, comme illustré dans la figure Fig.6.3. On dit également qu'on a affaire à une *supraconductivité de type s*.

La plupart des supraconducteurs non conventionnels exhibent cependant un gap d'une symétrie bien plus originale. La symétrie en question est semblable à celle d'une orbitale $d_{x^2-y^2}$, d'où le nom de supraconductivité de type *d* ou *d-wave*. Un tel gap est caractérisé par deux types de zones particulières :

- des zones *nodales*, le long des bissectrices des axes $(O, \vec{k}_x)$ et $(O, \vec{k}_y)$, où le gap s'annule complètement en des *nœuds* ;
- des zones *anti-nodales*, le long des axes $(O, \vec{k}_x)$ et $(O, \vec{k}_y)$, où le gap est maximal.

Cette symétrie de gap est également illustrée dans la figure Fig.6.3.

Encore plus intrigant, le gap supraconducteur de symétrie *d* change de signe sous une rotation de 90° , ce qui protège la position des nœuds ! En partant d'un angle orienté dans le sens trigonométrique, le gap est maximal à $\theta = 0$, diminue ensuite jusqu'à s'annuler en $\theta = \pi/4$ puis change de signe pour atteindre un maximum négatif en $\theta = \pi/2$. Les deux symétries qui viennent d'être présentées sont associées à un *appariement singulet*, soit à des paires $(\vec{k} \uparrow, -\vec{k} \downarrow)$. En effet, ces symétries sont spatialement symétriques et antisymétriques sous échange de spins (respectant ainsi l'anticommutation des opérateurs fermioniques). Les paires de Cooper se forment avec des électrons de spins opposés.

On peut noter que d'autres symétries d'appariement peuvent être envisagées pour la supraconductivité non conventionnelle [125, 126], notamment les symétries *s étendue* et $s_{\pm}$ (techniquement équivalentes aux yeux de la théorie des groupes) qui sont souvent étudiées dans le cadre des pnictures. La symétrie *s étendue* se traduit au

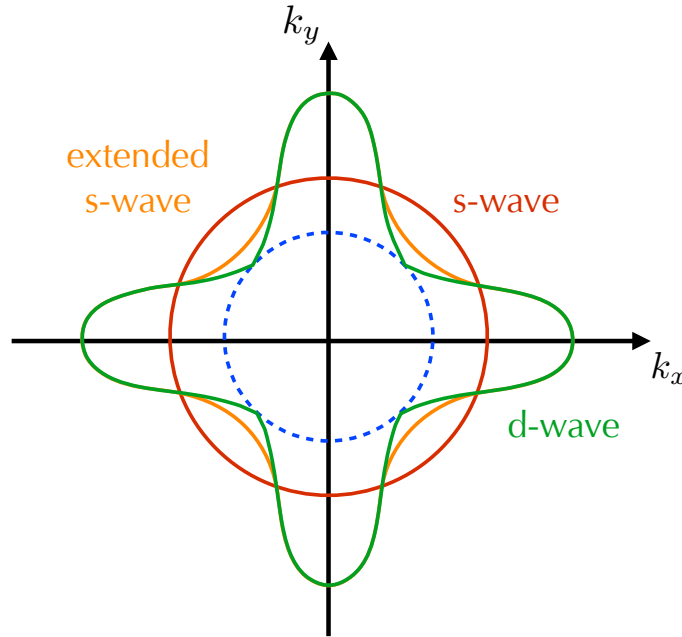


FIGURE 6.3 Module du gap supraconducteur $|\Delta_{\vec{k}}|$ vis-à-vis d'une surface de Fermi typique (bleu) dans l'espace réciproque en deux dimensions pour une supraconductivité de type s (métaux, alliages) et une supraconductivité de type d (cuprates par exemple). Pour une supraconductivité de type d , le gap est loin d'être isotrope. On peut noter que contrairement au gap de symétrie s , le gap de symétrie d s'annule linéairement avec l'angle de rotation dans le plan $(O, \vec{k}_x, \vec{k}_y)$ et change de signe sous une rotation de 90° . D'autres symétries supraconductrices existent, entre autres, la symétrie s étendue qui ressemble à la symétrie d , mais sans nœuds ni changements de signe.

niveau du gap supraconducteur par une structure similaire à la symétrie d , mais sans nœud ni changement de signe. Quant à la symétrie $s_{\pm}$, elle résulte de l'apparition de nœuds accidentels : on obtient ainsi un gap similaire au gap de symétrie d , mais sans changement de signe. Cependant, ces différentes symétries sont souvent défavorisées par rapport à la supraconductivité de type d dans le modèle de Hubbard répulsif [127, 128]. On peut cependant imaginer une supraconductivité de type $s + d$ où le paramètre d'ordre supraconducteur est la somme d'un paramètre d'ordre de symétrie s et d'un paramètre d'ordre de symétrie d , ou encore une supraconductivité de type $s + id$ (similaire à $s + d$ mais avec un paramètre d'ordre de symétrie d multiplié par le nombre imaginaire pur i). Des travaux indiquent que la symétrie $s + id$ peut

être stabilisée dans des matériaux comme les cuprates si les forces de couplage des canaux d'appariement s et d sont du même ordre de grandeur [129]. Il semble par ailleurs possible de stabiliser la symétrie $s+d$ dans des supraconducteurs organiques par l'intermédiaire de leur nématicité (soit leur anisotropie spatiale) [130].

6.5 Les cuprates, des matériaux défiant ce qu'on croyait acquis en supraconductivité

6.5.1 Les six règles de Bernd Matthias

Le triomphe de la théorie BCS en 1957 a donné un sentiment d'aboutissement à la recherche en supraconductivité. Elle permettait d'expliquer les propriétés des supraconducteurs connus à l'époque, soient les métaux et les alliages, et apportaient même des prédictions inédites comme le pic de Hebel-Slichter en RMN (résonance magnétique nucléaire). Ce sentiment d'aboutissement était tel qu'un ensemble de règles visant à diriger la recherche pour trouver de nouveaux matériaux supraconducteurs, et généralement attribué à Bernd Matthias dans les années 60-70, a été énoncé :

- 1) Une grande symétrie est favorable, la symétrie cubique est la meilleure.
- 2) Une grande densité électronique est favorable.
- 3) Se tenir à distance des isolants.
- 4) Se tenir à distance de l'oxygène.
- 5) Se tenir à distance du magnétisme.
- 6) Se tenir à distance des *théoriciens*.

En notant l'ironie de cette dernière règle à la lecture d'une thèse de physique théorique sur la supraconductivité, nous allons voir que les cuprates ne respectent absolument aucune de ces règles bien qu'ils soient les supraconducteurs les plus performants au niveau de la température critique.

6.5.2 Structure cristalline typique et dopage

La figure Fig.6.4 présente la structure cristalline du célèbre cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. La structure de tout cuprate se décompose généralement en deux parties : des *plans conducteurs* de cuivre-oxygène CuO_2 , et des *couches isolantes* contenant les autres atomes ainsi que de l'oxygène. Ces matériaux peuvent être dopés en remplaçant certains éléments chimiques par d'autres éléments chimiques de taille similaire mais de valence différente afin d'ajouter ou de retirer effectivement des électrons. On parle de *dopage en électrons* quand on ajoute des électrons et de *dopage en trous* quand on en retire. Les atomes concernés sont les atomes autres que l'oxygène dans les couches isolantes. On peut noter que le dopage en trous d' $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ est particulier : ce matériau est dopé en trous en ajoutant des atomes d'oxygène le long des chaînes de CuO . Les règles 1) et 4) de Bernd Matthias sont alors mises en tort : les électrons se déplacent dans des plans CuO_2 dont la bidimensionnalité ne leur offre que peu de symétrie, par ailleurs l'oxygène compose en majorité ces plans conducteurs.

6.5.3 Isolant, antiferroaimant, supraconducteur, et métal

La figure Fig.6.5 représente le diagramme de phase de deux cuprates : le cuprate dopé aux électrons $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ et le cuprate dopé aux trous $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Le composé parent (à dopage nul) des cuprates est un *isolant de Mott*. Le dopage aux électrons comme aux trous fait apparaître une *phase antiferromagnétique* puis un *dôme supraconducteur* pour finir avec un *métal*. Les matériaux dopés aux électrons présentent souvent une coexistence des phases supraconductrice et antiferromagnétique, contrairement aux matériaux dopés aux trous. Dans tous les cas, l'antiferromagnétisme est en compétition avec la supraconductivité, que ce soit dans l'expérience ou au sein du modèle de Hubbard [131–133] (à noter qu'une coexistence des deux phases existe aussi dans les systèmes dopés aux trous simulés *via* le modèle de Hubbard). Cela met en tort les règles 2), 3) et 5) de Bernd Matthias car l'état supraconducteur naît à partir d'états isolant et magnétique. En considérant la règle 6) comme étant fausse dès le départ, nous venons d'invalider toutes les règles de Bernd Matthias, ce qui prouve en quoi les cuprates sont des matériaux si particuliers !

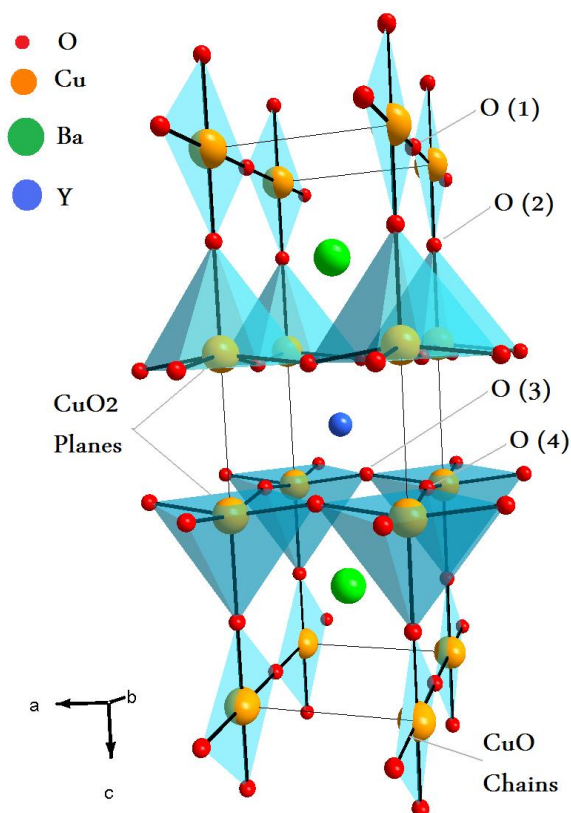


FIGURE 6.4 Structure cristalline de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. On y aperçoit notamment les plans de cuivre-oxygène CuO_2 où les électrons se déplacent. Les plans contenant l'yttrium et le baryum sont isolants. Le dopage en trous de ce composé se fait en enlevant des atomes d'oxygène le long des chaînes de cuivre-oxygène CuO .

La partie du diagramme dopée aux trous va particulièrement nous intéresser (on peut remarquer que prendre $t' = 0$ donne des diagrammes de phase théoriques identiques pour les deux sortes de dopage). La température critique supraconductrice limite le dôme supraconducteur et possède un maximum au *dopage optimal*. Ce dôme peut être divisé en deux :

- un *régime sous-dopé*, où la physique de forte interaction domine (entre le début du dôme supraconducteur et le dopage optimal) ;
- un *régime sur-dopé*, où la physique de faible interaction domine (entre le dopage optimal et la fin du dôme supraconducteur).

On peut dès lors s'attendre à ce que la supraconductivité à fort dopage se comporte d'une façon similaire à la supraconductivité BCS. La supraconductivité à faible

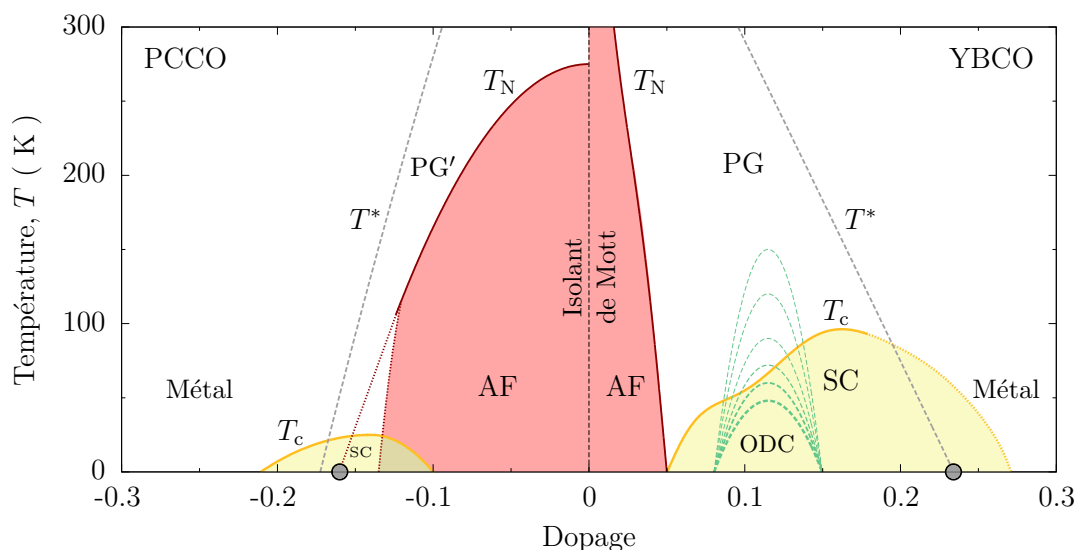


FIGURE 6.5 Diagramme de phase général des cuprates. On y voit côte à côte les diagrammes de phases du cuprate dopé en électrons $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ et du cuprate dopé en trous $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Les abréviations employées ici pour certaines phases sont les suivantes : AF pour l'antiferromagnétisme, SC pour la supraconductivité, PG pour le pseudogap, et ODC pour l'ordre de charge. Figure tirée de [134].

dopage, marquée par la physique de Mott, pourrait cependant réserver quelques surprises. Nous en reparlerons dans le chapitre Chap.8.

6.5.4 Pseudogap

Le diagramme de phase Fig.6.5 à haute température fait également apparaître le *pseudogap*, découvert en 1989 par des mesures de résonance magnétique nucléaire (RMN) [135] dont l'interprétation laisse présager l'existence d'éventuelles *fluctuations de spin antiferromagnétiques à courte portée*. Il y a trois grandes classes de mécanismes permettant d'ouvrir un pseudogap :

- une transition du premier ordre (ouvrant souvent un gap) arrondie par le désordre ;
- un régime de fortes fluctuations qui mène à l'ouverture d'un précurseur de l'état fondamental antiferromagnétique (plus généralement, n'importe quel état ordonné, du moment que celui-ci a un fort caractère bidimensionnel), comme c'est le cas dans les cuprates dopés aux électrons d'un point de vue expérimental [136] ou théorique [137, 138] ;
- la physique de Mott, qui rend le problème des cuprates dopés aux trous bien différent de celui des cuprates dopés aux électrons [139, 140].

Les conclusions tirées à partir de mesures d'ARPES et d'oscillations quantiques [141], présentées à la figure Fig.6.6, en illustrent autrement la nature. On observe une surface de Fermi cylindrique dans le régime sur-dopé, ce qui correspond à un comportement métallique. La surface de Fermi se voit cependant détruite le long des zones anti-nodales de la première zone de Brillouin dans le régime sous-dopé, signalant la présence du pseudogap. On parle d'*arcs de Fermi* pour décrire la surface de Fermi restante. Malgré ses conséquences expérimentales claires, l'origine physique du pseudogap dans les cuprates dopés aux trous est encore fortement débattue (pour une revue récente, voir [142]).

En dehors des fluctuations de spin antiferromagnétiques à courte portée précédemment mentionnées (nous y reviendrons bientôt), un des premiers mécanismes proposés repose sur un régime de *paires préformées* au-dessus de la température critique à faible dopage aux trous [143], soit des paires d'électrons qui ne sont pas cohérentes de phase. Ce mécanisme fait partie de la deuxième catégorie ci-dessus, celle liée à un régime de fortes fluctuations. Des matériaux tels que les cuprates, où la densité de porteurs supraconducteurs est petite, présentent une rigidité superfluide et un écrantage faibles, ce qui donne un plus grand rôle aux fluctuations de

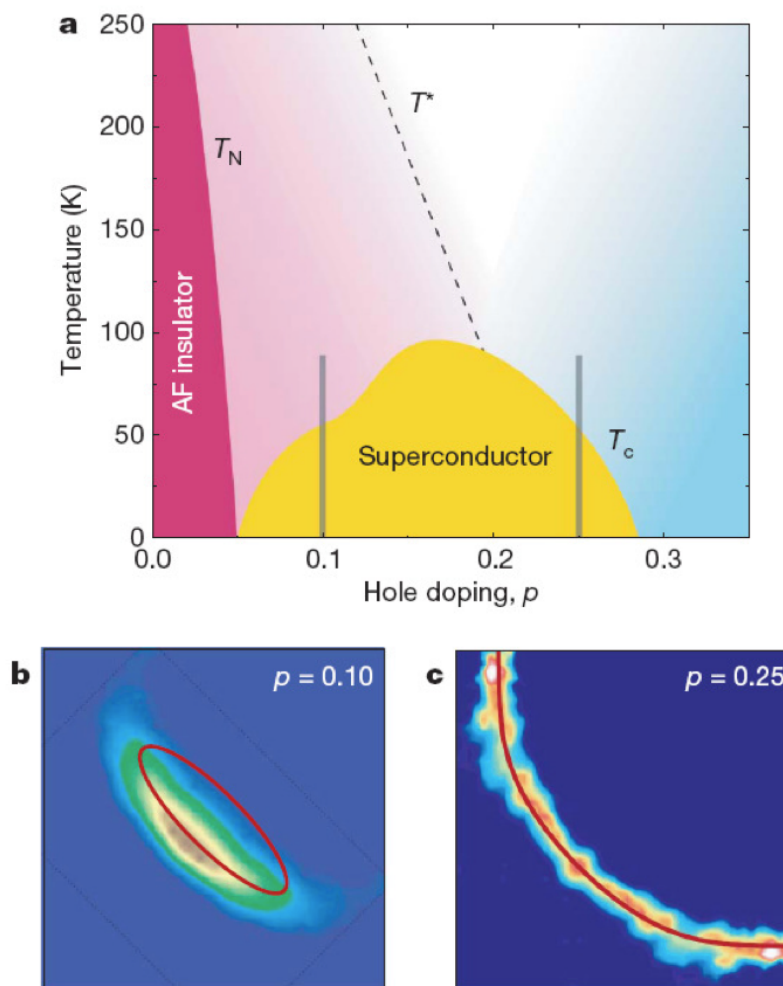


FIGURE 6.6 **a)** Diagramme de phase schématique des cuprates dopés en trous. Les lignes verticales à $p = 0.1$ et $p = 0.25$ marquent les positions de deux cuprates : $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ ou $\text{Na}_{2-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_2\text{O}_2\text{Cl}_2$ dans le régime sous-dopé et $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ dans le régime sur-dopé. **b) et c)** Distribution de l'intensité spectrale mesurée grâce à la spectroscopie par émission de photons résolue en angle (ARPES) dans un quart de la zone de Brillouin. **b)** Pour $\text{Na}_{2-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_2\text{O}_2\text{Cl}_2$ avec $p = 0.1$. L'ellipse rouge renferme une aire qui correspond à la fréquence des oscillations quantiques mesurées. **c)** Pour $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ avec $p = 0.25$. Figure tirée de [141].

la phase de la fonction d'onde décrivant les paires de Cooper [144, 145]. À haute température, il est donc possible que la phase de cette fonction d'onde fluctue sans que ça ne soit le cas pour son amplitude : des paires d'électrons se forment alors sans cohérence de phase. Cependant, des mesures de transport thermoélectrique

confirment les prédictions de théories de fluctuations gaussiennes (ou l'amplitude et la phase de la fonction d'onde supraconductrice fluctuent en même temps), autant dans les cuprates dopés aux électrons que dans les cuprates dopés aux trous, jusqu'à des températures pouvant atteindre six fois la température critique des matériaux concernés [146, 147].

Une théorie plus prometteuse, comme nous le verrons bientôt, est développée un peu plus tard. Elle porte le nom de *théorie YRZ* du nom des personnes qui en sont à l'origine : Kai-Yu Yang, Thomas M. Rice, et Fu-Chun Zhang [148]. Ce mécanisme fait partie de la troisième catégorie ci-dessus, celle liée à la physique de Mott. Il s'agit d'une théorie phénoménologique basée sur le modèle RVB de Philip W. Anderson (de l'anglais *Resonating Valence Bond*) où le système est vu comme une superposition quantique de configurations où les électrons de valence forment deux à deux des états singulet de spin dans l'espace réel *via* l'interaction d'échange J [149, 150] (nous en reparlerons davantage dans la sous-section Sous-Sec. 6.6.2). La théorie YRZ considère que la partie imaginaire de la self-energy diverge sur la première zone de Brillouin antiferromagnétique [148, 151, 152].

En parallèle, une théorie bien plus originale cherche à expliquer le pseudogap par la création de petites boucles de courant parcourant les atomes des plans cuivre-oxygène des cuprates [153]. Ce mécanisme fait partie de la première catégorie ci-dessus, celle liée à un ordre à longue portée. Ces boucles de courant peuvent s'accompagner [154] ou pas [155, 156] d'une brisure de la symétrie de translation mais doivent briser la symétrie sous renversement du temps car elles génèrent toutes un faible moment magnétique. C'est sur cela que se concentrent les expériences cherchant à démontrer l'existence de cet ordre de boucles de courant, que ce soit la diffraction de neutrons [157], les mesures de l'effet Kerr-Faraday [158], la diffusion inélastique de neutrons [159, 160], ou encore la spectroscopie par ultrasons résonants [161, 162]. Cependant, d'autres mesures, telles que la relaxation de spin de muon (μ SR) [163] et la résonance de quadrupôle nucléaire sous perturbation Zeeman [164], semblent attribuer les signatures de l'ordre de boucles de courant à des phases diluées d'impuretés magnétiques.

Quoi qu'il en soit, la question d'attribuer le statut de "phase" au pseudogap est encore fortement débattue. En effet, la ligne tiretée T^* indiquant l'émergence du pseudogap dans la figure Fig.6.5 est un crossover finissant dans le dôme supraconducteur (parfois au-delà, suivant le cuprate considéré) en un *point critique quantique* à température nulle dont nous parlerons dans la sous-section Sous-Sec.6.5.6. Une véritable phase se doit d'être bordée par une ligne de transition abrupte. Cette question est d'autant plus pertinente qu'il se pourrait que le pseudogap induise une nématicité (une brisure de la symétrie de rotation, synonyme d'anisotropie) dans le matériau [165, 166]. Malgré le crossover à T^* , les mesures d'ultrasons [161] envisagent le fait que le pseudogap soit une véritable phase de la matière car elles détectent une brisure de pente dans les fréquences de résonance lors de l'entrée dans le pseudogap. Du point de vue de l'approche à la physique de Mott prise dans cette thèse, la température T^* où la susceptibilité magnétique commence à chuter sous l'effet du pseudogap est parallèle à la ligne de Widom qui prolonge la transition de Sordi, soit la transition du premier ordre qui sépare, à basse température, la phase pseudogap et la phase de métal corrélé [81]. Bien sûr, cette transition de phase se produit dans l'état normal sous-jacent au vrai fondamental qui est supraconducteur. Dans cette approche, l'anisotropie de résistivité à T^* provient du fait que le taux de diffusion dans un régime d'isolant de Mott dopé est très sensible à l'anisotropie orthorhombique de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [167].

Une autre question grandement débattue est la suivante : le pseudogap est-il un compétiteur ou un précurseur de la supraconductivité ? De nombreuses phases sont en effet en compétition avec la supraconductivité au sein du diagramme de phase des cuprates [168]. Entre autres, un ordre de densité de spin et un ordre de densité de charge (dont nous parlerons dans la sous-section suivante) émergent dans les cuprates autour de 8% de dopage aux trous à basse température et sont en compétition entre eux et avec la supraconductivité [168, 169]. Le pseudogap pourrait également faire partie de ces compétiteurs de la supraconductivité. À côté de cela, d'autres études envisagent que le pseudogap soit fortement lié à la supraconductivité. Une des études les plus prometteuses en la matière propose une excitation fermionique cachée provenant de la physique de Mott comme lien entre pseudogap et supraconductivité [170, 171].

6.5.5 Ordre de charge

La figure Fig.6.5 présente également un ordre de charge incommensurable avec le réseau cristallin autour d'un dopage aux trous de l'ordre de 12%. L'histoire de cet ordre s'étend sur les vingt dernières années. En effet, on observe vers le milieu des années 90 que les cuprates dopés aux trous exhibent des ordres particuliers à basse température dans le régime de dopages intermédiaires, notamment un ordre de rayure résultant de la superposition d'un ordre de densité de charge et d'un ordre de densité de spin [172]. Par la suite, des mesures d'effet tunnel au cœur des vortex supraconducteurs (révélant l'état normal sous-jacent) dévoilent un ordre de charge dans ce même régime de dopages [173]. On réalise plus tard, par le biais de mesures thermoélectriques, que ce régime de dopages est marqué par une reconstruction de la surface de Fermi avec l'apparition de nouvelles poches d'électrons [174–177]. D'autres mesures thermoélectriques montrent une brisure de la symétrie de translation à basse température dans le régime sous-dopé en plus de la brisure de la symétrie de rotation habituellement attribuée au pseudogap [178]. L'ordre de charge non commensurable est découvert dans l'état supraconducteur par la diffraction de rayons X en 2012 [179]. La découverte de cet ordre a été aussi tardive car l'ordre de charge est incommensurable et l'espace réciproque à explorer est très grand. Ce nouvel ordre se présente sous une très grande diversité à travers la famille des cuprates, comme le montre la figure Fig.6.7 [180].

Voici quelques informations complémentaires sur l'ordre de charge. On sait désormais qu'il est en compétition avec la supraconductivité [168, 169, 181, 182], que la pression le supprime sans affecter le pseudogap [168] (excluant tout lien direct entre les deux), et qu'il a récemment été associé à l'apparition de nématicité autour de 12% de dopage [166].

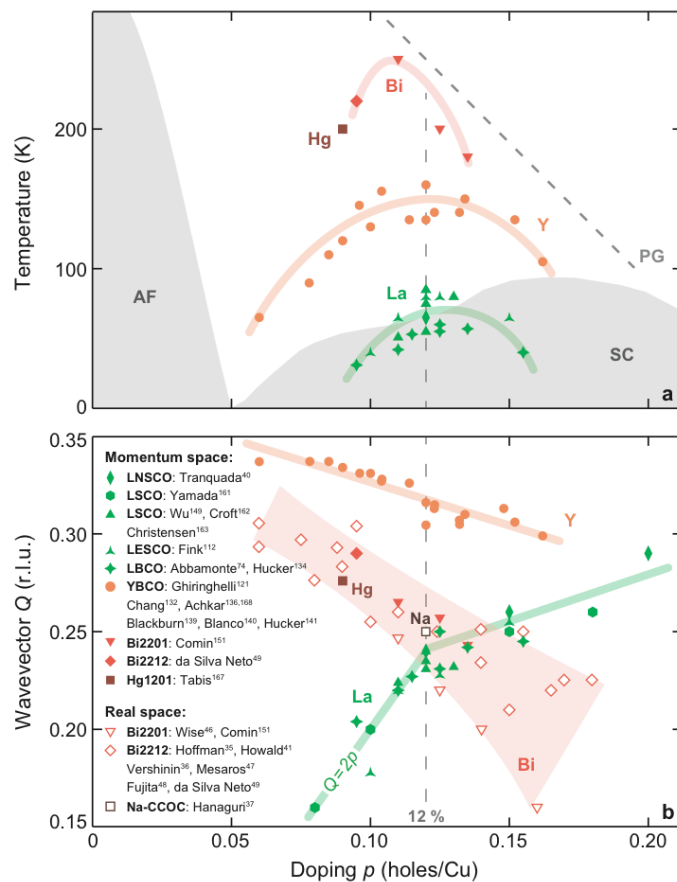


FIGURE 6.7 Température d'émergence de l'ordre de charge et vecteur d'onde associé pour toutes les familles de cuprates. **Haut :** Température d'émergence de l'ordre de charge en fonction du dopage aux trous pour toutes les familles de cuprates. Les ombres en arrière-plan marquent les frontières des régimes antiferromagnétique (AF), supraconducteur (SC), et pseudo-gap (PG) dans $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. **Bas :** Dépendance en dopage aux trous du vecteur d'onde caractéristique de l'ordre de charge (les points expérimentaux pour $\text{La}_{2-x-y}\text{Nd}_y\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ (LNSCO) et $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ (LSCO), tirés des références [183] et [184], sont calculés à partir de la position du vecteur d'onde associé à l'ordre de spin). Les symboles pleins proviennent de sondes résolues en vecteur d'onde (diffusion de rayons X résonants, diffraction de rayons X, et diffusion de neutrons), tandis que les symboles ouverts proviennent de méthodes dans l'espace réel (microscopie par effet tunnel). Figure tirée de [180], où les autres références et matériaux apparaissant dans le panneau bas sont répertoriés.

6.5.6 Des points critiques quantiques pour forger le dôme supraconducteur

L'importance des points critiques quantiques pour la compréhension du diagramme de phase des cuprates a été largement mise en évidence par le biais de mesures thermoélectriques [185, 186]. En particulier, les fluctuations régnant autour de ces points critiques quantiques sont connues comme étant un excellent moyen de donner naissance à des phases inattendues, comme les ordres en compétition avec la supraconductivité ou la supraconductivité elle-même. Leur étude peut donc donner accès aux causes donnant sa forme au dôme supraconducteur. Avant la découverte de l'ordre de densité de charge, il était envisagé que ce soit l'ordre de densité de spin qui dicte la position de ces points critiques quantiques [187]. Désormais, des travaux plus récents viennent éclairer la question d'une lumière complètement nouvelle. Nous nous concentrerons ici sur la référence [188].

La figure Fig.6.8 présente les diagrammes de phase de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ en champ magnétique nul $H = 0$ (panneau a)) et sous un champ magnétique $H = 50$ T (panneau b)). Le panneau a) montre également comment la température critique T_c est affaiblie en substituant 6% des atomes de cuivre par du zinc en champ magnétique nul [189]. On remarque que les effets du champ magnétique et de la substitution chimique en champ magnétique nul sont identiques sur le dôme supraconducteur : ce dernier se réduit à un plus petit dôme centré autour du dopage $p^* = 19\% \pm 1\%$ marquant le dopage critique où le pseudogap prend fin [190]. Le fait que le dôme supraconducteur à $H = 50$ T pique au même dopage que le dôme supraconducteur en champ magnétique nul à 6% de substitution des atomes de cuivre par du zinc montre que le point critique du pseudogap à p^* ne se déplace pas avec le champ magnétique et la substitution chimique considérée. La figure Fig.6.8 montre aussi très élégamment que l'ordre de densité de charge et le pseudogap sont des phénomènes distincts. En effet, trois aspects de cette figure convergent vers cette conclusion :

- l'ordre de charge s'éteint à 16% de dopage [191] tandis que le pseudogap disparaît à 19% de dopage [190];
- la robustesse de p^* face à la substitution au zinc sépare le pseudogap de l'ordre de densité de charge, ce dernier étant rapidement affaibli par une substitution au zinc [169];

- la température critique à $H = 50$ T commence à chuter à dopage décroissant dès l'entrée dans le pseudogap, donc clairement avant l'émergence de l'ordre de densité de charge.

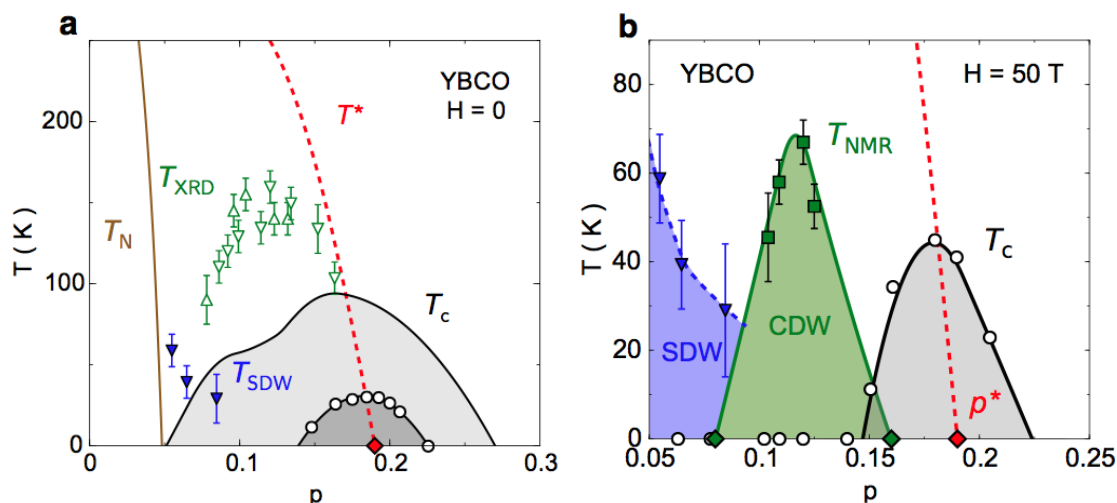


FIGURE 6.8 a) Diagramme de phase de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ en champ magnétique nul $H = 0$. La phase antiferromagnétique apparaît à faible dopage aux trous sous la température de Néel T_N , suivi du dôme supraconducteur en gris clair. Le petit dôme gris foncé montre comment la température critique T_c est affaiblie en substituant 6% des atomes de cuivre par du zinc [189]. Un ordre de densité de charge à courte portée est détecté par diffraction de rayons X sous la température T_{XRD} (triangles vers le haut [192], triangles vers le bas [191]). Cet ordre prend fin à température nulle vers 16% de dopage (à plus ou moins 0.5%) [191]. Un ordre de densité de spin à courte portée est détecté par diffraction de neutrons sous la température T_{SDW} [193]. La ligne tiretée rouge marque la position approchée de la température du pseudogap T^* , tandis que le dopage $p^* = 19\% \pm 1\%$ marque le dopage critique où le pseudogap prend fin (diamant rouge) [190]. **b)** Diagramme de phase de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ à $H = 50$ T. L'ordre de charge semble être stabilisé par le champ magnétique appliqué. Il est détecté par la résonance magnétique nucléaire (RMN) [194] sous la température T_{NMR} (carrés verts) [195]. La région verte montre la zone où le coefficient de Hall R_H est négatif [188, 196]. Cette région, signature d'une reconstruction de la surface de Fermi liée à l'ordre de charge, prend fin à 16% de dopage (à plus ou moins 0.5%). La ligne tiretée rouge est la même que dans le panneau a). L'ordre de densité de spin en champ nul est reproduit du panneau a). Figure tirée de [188].

La figure Fig.6.9 présente quant à elle la dépendance en dopage du *nombre de Hall*

$$n_H = \frac{V}{eR_H} \quad (6.50)$$

où V est le volume occupé par un atome de cuivre dans les plans de cuivre-oxygène et R_H est la *résistance Hall* mesurée dans l'échantillon sous un champ magnétique transverse. Cherchons à mieux comprendre cette quantité dans le cas où il n'y a qu'un seul type de porteurs de charge (électrons ou trous). Lorsqu'un matériau est soumis à une tension électrique longitudinale, un courant de charges $\vec{j}$ se crée dans la même direction. Ce courant est caractérisé par une densité de porteurs de charge n , de charge q et de vitesse $\vec{v}$ telles que $\vec{j} = nq\vec{v}$. Si on applique désormais un champ magnétique transverse $\vec{H}$, ce dernier va dévier les porteurs de charge dans la direction transverse *via* la force magnétique $q\vec{v} \times \vec{H}$. Puisqu'il ne peut pas y avoir d'écoulement de charges dans cette direction, les charges vont s'accumuler sur les côtés de l'échantillon jusqu'à ce qu'un champ électrique $\vec{E}_H$, créé par cette accumulation, contre-balance la déviation magnétique *via* la force électrique $q\vec{E}_H$. On définit la résistance (ou coefficient) Hall R_H de la façon suivante :

$$\vec{E}_H = R_H \vec{H} \times \vec{j}. \quad (6.51)$$

Lorsque l'équilibre entre les forces magnétique et électrique est atteint, on a

$$q\vec{E}_H + q\vec{v} \times \vec{H} = q\vec{E}_H + \frac{1}{n}\vec{j} \times \vec{H} = \vec{0} \quad \Longleftrightarrow \quad \vec{E}_H = \frac{1}{nq} \vec{H} \times \vec{j}. \quad (6.52)$$

D'où

$$R_H = \frac{1}{nq}. \quad (6.53)$$

Le signe de cette résistance donne directement accès au type des porteurs de charge. Dans le cas où des trous sont les porteurs de charge (comme c'est le cas dans les cuprates dopés aux trous en dehors de l'ordre de densité de charge), le nombre de Hall Eq.(6.50) s'écrit

$$n_H = Vn \quad (6.54)$$

et peut être interprété comme le nombre moyen de porteurs de charge compris dans le volume occupé par un atome de cuivre dans les plans de cuivre-oxygène.

Dans le cas où on a deux types de porteurs de charge, l'expression de la résistance Hall devient plus complexe et dépend de la mobilité des porteurs positifs, μ_p , et de la mobilité des porteurs négatifs, μ_n , définies à travers la conductivité $\sigma = \sum_{i=p,n} n_i e \mu_i$. Le signe de la résistance de Hall peut alors éventuellement donner une indication sur la nature des porteurs de charge majoritaires dans le matériau étudié mais le nombre de Hall Eq.(6.50) ne constitue pas vraiment une bonne mesure de la densité de porteurs de charge.

Revenons à la figure Fig.6.9. On mesure ici la densité de porteurs de charge, *via* le nombre de Hall n_H , autour du point critique quantique où le pseudogap prend fin, soit au dopage p^* . On peut noter qu'aucun point n'est présenté dans la zone où s'établit l'ordre de charge car la reconstruction de la surface de Fermi qui lui est associée marque l'apparition de poches d'électrons rendant la résistance Hall négative. On voit néanmoins très bien que la densité de porteurs passe d'une dépendance en $1 + p$ à fort dopage à une dépendance en p à faible dopage à travers une transition relativement fine autour de p^* . Comment peut-on interpréter cela ? Dans un liquide de Fermi dopé aux trous, on sait que le nombre moyen d'électrons est donné par $1 - p$ tandis que le nombre moyen de trous est donné par $1 + p$. La densité de porteurs (ici des trous) est donc donnée par $n_H = 1 + p$ et la surface de Fermi associée est une grande poche de trous, comme le montre l'icône en haut à droite de la figure Fig.6.9. Cependant, si une transition vers un isolant antiferromagnétique s'opère, la zone de Brillouin est divisée par deux (à cause de la période spatiale du réseau qui est doublée par l'ordre magnétique) et les repliements de la surface de Fermi dans la première zone de Brillouin laissent derrière eux de petites poches de trous nodales, comme le montre l'icône en haut à gauche de la figure Fig.6.9. Le matériau perd des porteurs de charge et c'est alors une densité de porteurs donnée par $n_H = p$ qui est connue comme étant une signature expérimentale des isolants antiferromagnétiques dopés aux trous [197]. C'est exactement ce genre de transition qui semble se produire au dopage p^* . Par ailleurs, des calculs théoriques très récents traitant le système étudié *via* la théorie YRZ [148, 151, 152] ou comme un simple antiferroaimant démontrent un très bel accord avec ces résultats expérimentaux [198].

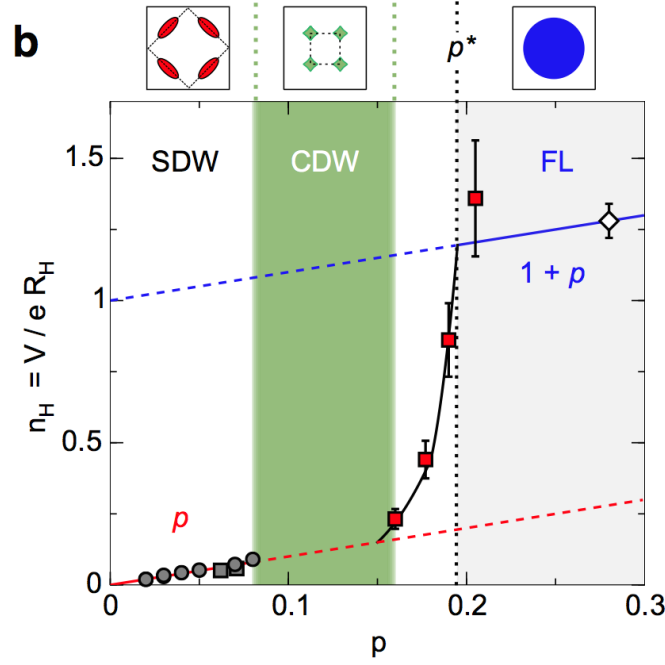


FIGURE 6.9 Dépendance en dopage du nombre de Hall $n_H = V/(eR_H)$ (où V est le volume occupé par un atome de cuivre dans les plans de cuivre-oxygène [199,200] et R_H est la résistance Hall) qui constitue une mesure directe de la densité de porteurs de charge. Cette quantité est mesurée à $T = 50$ K pour $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ (cercles) [197] et $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ (carrés gris) [201] pour $p < 8\%$. Pour $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ à $p > 15\%$ (carrés rouges), n_H est mesuré à $H = 80$ T et provient de [188]. Le diamant blanc est obtenu en prenant la limite à température nulle de la résistance Hall R_H dans $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ fortement sur-dopé [199]. La bande verte désigne la région où la reconstruction de la surface de Fermi due à l'ordre de charge a lieu. Dans cette bande, on a $R_H < 0$. À dopage décroissant, la densité de porteurs de charge chute rapidement d'une dépendance en $1 + p$ à une dépendance en p à $p^* = 19\% \pm 1\%$, soit le dopage critique sous lequel apparaît le pseudogap dans $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [190]. Les icônes au-dessus de la figure montrent des schémas de la surface de Fermi de l'état normal dans trois des quatre régions de dopage : de petites poches de trous nodales pour $p < 8\%$ (rouge), où l'ordre de densité de spin (SDW) prévaut à basse température, des petites poches d'électrons entre $p = 8\%$ et $p = 16\%$ (vert), où l'ordre de densité de charge (CDW) prévaut à basse température, et une unique et grande poche de trous au-dessus de p^* (bleu), où l'état fondamental non supraconducteur est un liquide de Fermi (FL). Dans le cas du liquide de Fermi, le centre de la zone de Brillouin est en (π, π) alors qu'il est $(0, 0)$ pour les autres cas. Figure tirée de [188].

La forme du dôme supraconducteur serait ainsi due à deux points critiques quantiques. D'un côté, le point critique quantique lié au pseudogap marquerait le début des fluctuations antiferromagnétiques permettant éventuellement d'apparier des électrons (comme nous le verrons plus tard) et donnant ainsi naissance au dôme supraconducteur. D'un autre côté, le point critique quantique à plus faible dopage, dont émergent les ordres de charge et de spin en compétition avec la supraconductivité, causerait la fin de ce dôme.

6.5.7 Une supraconductivité émergeant dans un isolant de Mott

Le dôme supraconducteur se situant entre une phase isolante et une phase métallique, on peut se demander si la supraconductivité des cuprates a plus à voir avec l'isolant de Mott ou avec le métal. La figure Fig.6.10 présente tout d'abord la façon dont se modifie la densité d'états d'un semiconducteur et d'un isolant de Mott demi-remplis sous l'effet d'un faible dopage aux trous à température nulle.

Commençons par le cas du semiconducteur. À demi-remplissage, l'énergie de Fermi ε_F se situe au milieu du gap séparant la bande de valence de la bande de conduction et les électrons occupent ainsi tous les états quantiques de la bande de valence, chaque état étant occupé par une paire d'électrons de spins opposés. Les $2N$ états accessibles de la bande de valence sont alors occupés (où N est le nombre de sites du réseau pour des atomes divalents) tandis que les $2N$ états accessibles de la bande de conduction sont vides. Lorsque le semiconducteur est dopé aux trous en retirant un électron de la bande de valence, le niveau de Fermi entre dans la bande de valence sans l'affecter particulièrement. En effet, on se retrouve simplement avec $2N - 1$ états occupés dans la bande de valence (l'état délaissé par l'électron est maintenant vide), et toujours $2N$ états accessibles vides dans la bande de conduction.

Le cas de l'isolant de Mott est bien différent. À demi-remplissage, chaque état quantique est simplement occupé et seuls les N états accessibles de la bande de Hubbard inférieure, séparée de la bande de Hubbard supérieure par l'interaction coulombienne purement locale U , sont occupés. Le fait de doper aux trous en retirant un électron réarrange alors totalement la densité d'états. En effet, l'état quantique délaissé dans la bande de Hubbard inférieure peut désormais accueillir un électron

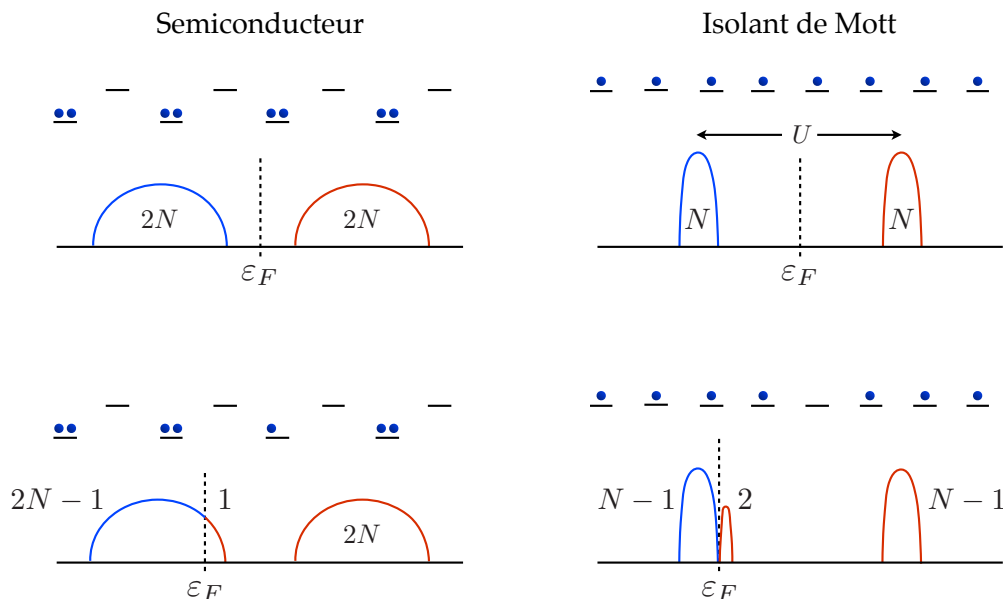


FIGURE 6.10 Schémas présentant la différence entre un semiconducteur et un isolant de Mott dopés aux trous à température nulle. Les panneaux du haut correspondent à un semiconducteur et un isolant de Mott demi-remplis avec N sites divalents. Les panneaux du bas montrent comment se modifie leur densité d'états sous l'effet d'un faible dopage aux trous. Chaque panneau est accompagné d'une représentation schématique de l'occupation des états atomiques pertinents pour la compréhension des densités d'états lorsque les corrélations électroniques sont fortes.

de spin *up* ou un électron de spin *down*, donnant naissance à 2 états quantiques accessibles. Cette même configuration quantique va également retirer un état accessible dans la bande de Hubbard supérieure car le site délaissé ne peut plus être doublement occupé par un unique saut électronique. On gagne ainsi deux états accessibles dans la bande de Hubbard inférieure pour un état accessible perdu dans la bande de Hubbard supérieure.

C'est désormais à l'expérience de trancher entre ces deux cas théoriquement distincts. La figure Fig.6.11 présente le spectre d'absorption de rayons X mous dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ pour différents dopages en trous. À dopage nul $x = 0$ (ou demi-remplissage), on observe un seul pic dans le spectre d'absorption. Cette structure se modifie progressivement en une structure à deux pics avec le dopage aux trous. On peut également remarquer que le pic à basse énergie croît environ deux fois

plus vite que le pic à haute énergie décroît. Ces observations sont en parfait accord avec la discussion précédente sur l'isolant de Mott. Quel est le lien direct avec la supraconductivité ? En fait, les composés à $x = 0.00, 0.02$, et 0.04 sont isolants tandis que les composées à $x = 0.07, 0.10$, et 0.15 sont supraconducteurs. La supraconductivité dans les cuprates se distingue alors clairement de la supraconductivité conventionnelle par le fait qu'elle peut émerger à partir d'un système isolant à faible dopage aux trous. On dit souvent d'ailleurs que les cuprates supraconducteurs sont des *isolants de Mott dopés aux trous*.

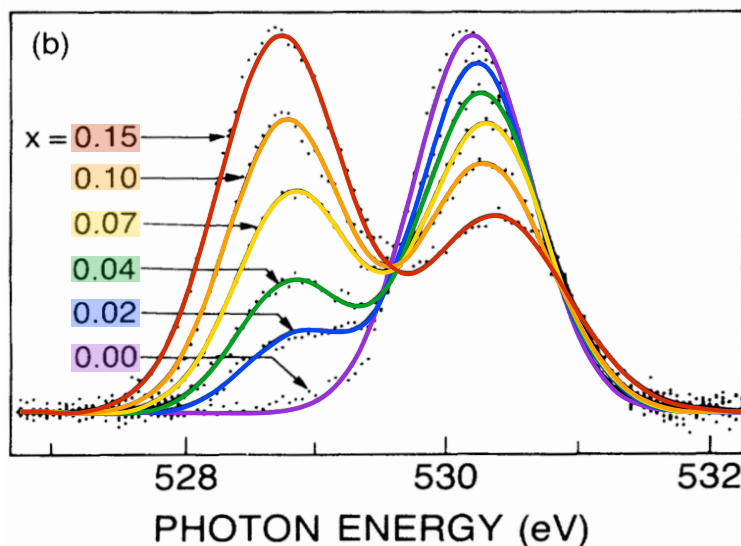


FIGURE 6.11 Spectre d'absorption de rayons X mous dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ pour différents dopages en trous. Les composés à $x = 0.00, 0.02$, et 0.04 sont isolants tandis que les composées à $x = 0.07, 0.10$, et 0.15 sont supraconducteurs. Les lignes pleines représentent des ajustements utilisant deux profils gaussiens. Figure tirée de [202]. Les couleurs ont été ajoutées à des fins de clarté.

6.5.8 Singulet de Zhang-Rice

L'étude des cuprates se fait traditionnellement en se basant sur le modèle de Hubbard à une bande, même si les récents progrès algorithmiques commencent à permettre l'utilisation du modèle de Hubbard à 3 bandes [203]. C'est le *singulet de Zhang-Rice* [204] qui explique en quoi les cuprates peuvent globalement être considérés comme des matériaux à une seule bande électronique effective. Ce singulet est illustré à la figure Fig.6.12.

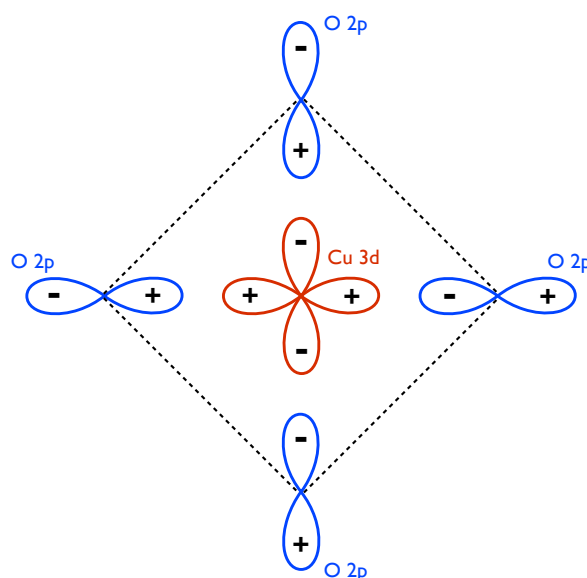


FIGURE 6.12 Diagramme schématique d'un amas CuO_4 et de l'hybridation de la superposition cohérente symétrique des états de trou des quatre atomes d'oxygène $\text{O } 2p$ entourant l'ion de cuivre avec l'état de trou du cuivre $\text{Cu } 3d$ (singulet de Zhang-Rice).

Lorsque l'on rajoute un trou dans le matériau, il s'étale comme une superposition cohérente symétrique des états de trou des quatre atomes d'oxygène $\text{O } 2p$ entourant l'ion de cuivre. Il va alors s'hybrider avec l'état de trou de l'ion central $\text{Cu } 3d$ pour former un singulet de Zhang-Rice. On peut alors approximer les plans de cuivre-oxygène CuO_2 par des plans dont chaque site contient un de ces singulets, ce qui donne un simple réseau carré à une bande.

6.6 Une colle d'appariement magnétique?

6.6.1 L'archétype de l'hélium 3 liquide

On a vu dans le cadre de la supraconductivité conventionnelle que les électrons s'appariaient *via* l'interaction électron-phonon, l'interaction entre les électrons et le réseau cristallin. La supraconductivité non conventionnelle se définit par le fait que les électrons s'apparient *via* un mécanisme d'appariement qui n'est pas majoritairement dû à l'interaction électron-phonon. La *superfluidité de l'hélium 3 liquide* peut être considérée comme l'archétype de la superfluidité non conventionnelle car les atomes d'hélium 3 s'y apparient *via* un *échange de fluctuations de spin ferromagnétiques* [205–208].

Les familles de supraconducteurs non conventionnels sont nombreuses : cuprates (ceux dont la température critique est la plus haute), pnictures, supraconducteurs organiques, fermions lourds, *etc.* Cependant, bien que la question ne soit pas encore parfaitement réglée, il semblerait que l'appariement électronique s'y fasse *via* un processus d'*échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques* [209,210] semblable au mécanisme d'appariement de l'hélium 3 liquide (où les fluctuations de spin sont ferromagnétiques). En effet, la présence d'une phase antiferromagnétique très proche de la supraconductivité dans le diagramme de phase de tous ces matériaux en est un très bon indicateur.

6.6.2 Super-échange à haute fréquence

Le mécanisme d'appariement instantané *via* le super-échange antiferromagnétique n'existe que pour des interactions électroniques très fortes (lorsque $U \gg t$ dans le modèle de Hubbard) et a été proposé durant les années 1986 et 1987 [149,211]. On sait que pour de telles valeurs de l'interaction coulombienne locale U , c'est le modèle t - J Eq.(2.132) qui décrit la physique de notre problème. On sait que le terme d'interaction de ce modèle s'écrit

$$J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) \quad (6.55)$$

où la constante de super-échange antiferromagnétique est donnée par $J = 4t^2/U$. Essayons d'avoir une image simple de la façon dont la supraconductivité (ou encore l'apparition de paires de Cooper) peut abaisser l'énergie du système à travers J (et donc U). Considérons uniquement les projections suivant z des opérateurs spin

$$\hat{S}_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z \hat{c}_{i\beta} = \frac{1}{2} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (6.56)$$

contenues dans le produit scalaire entre opérateurs spin :

$$J \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) = \frac{J}{4} [(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})(\hat{n}_{j\uparrow} - \hat{n}_{j\downarrow}) - (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow})(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow})] . \quad (6.57)$$

Nous allons alors omettre les termes qui ne permettent pas de faire apparaître un appariement singulet :

$$\begin{aligned} J \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) &\simeq -\frac{J}{2} (\hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{j\uparrow}) \\ &= -\frac{J}{2} (\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}) \\ &= -\frac{J}{2} (\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} + \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow}) . \end{aligned} \quad (6.58)$$

Définissons les opérateurs d'annihilation et de création de paire

$$\hat{d}_{ij} = \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \quad \hat{d}_{ij}^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger . \quad (6.59)$$

On peut réécrire le terme d'interaction précédent comme étant

$$J \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) \simeq -\frac{J}{2} (\hat{d}_{ij}^\dagger \hat{d}_{ij} + \hat{d}_{ji}^\dagger \hat{d}_{ji}) . \quad (6.60)$$

On obtient alors le champ moyen d'interaction

$$\left\langle J \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{t-J}} \simeq -J \langle \hat{d}_{ij}^\dagger \hat{d}_{ij} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{t-J}} . \quad (6.61)$$

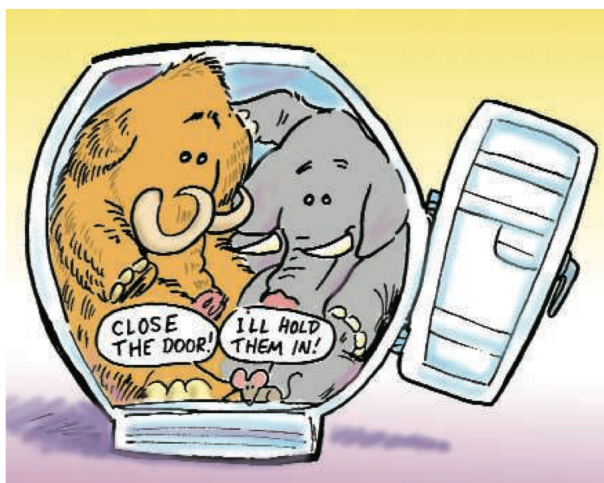
où le terme issu de la moyenne thermodynamique compte une paire de Cooper sur les sites premiers voisins i et j . Ainsi, la présence de la supraconductivité abaisse

l'énergie du système *via* J (et donc U). L'appariement se fait instantanément car on ne voit aucune dépendance temporelle ou fréquentielle dans les calculs. Aussi, les calculs faits ici ne permettent pas de distinguer un appariement d d'un appariement s étendu par exemple (ils ont *a priori* le même poids dans l'équation Eq.(6.61)). Seule la symétrie s est exclue car les paires de Cooper s'y forment à partir de deux électrons sur le même site du réseau cristallin. Des calculs avec les bosons esclaves sur cet hamiltonien ont par ailleurs suggéré, tôt après la découverte des cuprates, qu'une solution de type d était possible pour cet hamiltonien [143].

La figure Fig.6.13 résume bien le point de vue de Philip W. Anderson quant à la pertinence de ce mécanisme d'appariement dans les cuprates [212]. Pour lui, U et J (le mammoth et l'éléphant) assurent majoritairement l'appariement supraconducteur *via* le mécanisme instantané dû au super-échange, ce qui peut paraître intuitif dans des matériaux fortement corrélés comme les cuprates. L'idée sous-jacente est que le matériau isolant parent est dans un état RVB (de l'anglais *Resonating Valence Bond*), soit une superposition quantique de configurations où les électrons de valence forment deux à deux des états singulet de spin dans l'espace réel *via* l'interaction d'échange J [149, 150]. Ces paires deviennent supraconductrices lorsque le matériau est dopé aux trous. Ainsi, la présence éventuelle d'une colle qui proviendrait de l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques à basse fréquence (la souris) est de bien moindre importance. Cet autre mécanisme d'appariement éventuel est justement l'objet de la prochaine sous-section.

6.6.3 Échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques à basse fréquence

Suite à l'annonce de Philip W. Anderson [212], Douglas J. Scalapino n'a pas tardé à rétorquer qu'un mécanisme d'appariement provenant de l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques à basse fréquence serait un bien meilleur candidat [213, 214], notamment parce qu'il est appuyé par de nombreuses mesures expérimentales comme la spectroscopie infrarouge, la diffusion de neutrons, l'ARPES, ou encore les mesures par effet tunnel [215–217]. Ce mécanisme d'appariement retardé, proposé en 1986 [209, 210], est illustré à la figure Fig.6.14. Considérons le spin *up* central de la figure Fig.6.14. D'après le principe de Pauli, ce spin *up* va avoir



"We have a mammoth and an elephant in our refrigerator—
do we care much if there is also a mouse?"

FIGURE 6.13 Illustration de l'opinion de Philip W. Anderson quant à l'origine de l'appariement supraconducteur dans les cuprates. "Nous avons un mammoth et un éléphant dans notre réfrigérateur - nous soucions-nous vraiment du fait qu'il puisse aussi y avoir une souris?" Pour lui, U et J (le mammoth et l'éléphant) assurent majoritairement l'appariement supraconducteur *via* le mécanisme instantané dû au super-échange. La présence éventuelle d'une colle qui proviendrait de l'échange d'ondes de densité de spin à basse fréquence (la souris) est de bien moindre importance. Figure tirée de [212].

tendance à favoriser la présence de spins *down* dans son voisinage immédiat (les deux spins *down* encadrant le spin central). Pour les mêmes raisons, ces spins *down* vont favoriser à leur tour la présence de spins *up* et ainsi de suite... Entre le spin *up* central et un des spins *down* premier voisin, on dit qu'il y a échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques. L'amplitude de l'effet du spin central décroît avec la distance et s'évanouit sur l'échelle caractéristique qu'est la *longueur de corrélation antiferromagnétique*. La proximité d'un spin *up* et d'un spin *down* liés par cet échange peut alors engendrer la création d'une paire de Cooper.

Cependant, un problème se pose si on considère l'appariement *via* l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques : on peut montrer que cette interaction est toujours répulsive. Comment est-il alors possible d'apparier des électrons par le biais d'une telle interaction ? Un indice nous est donné par l'équation de gap

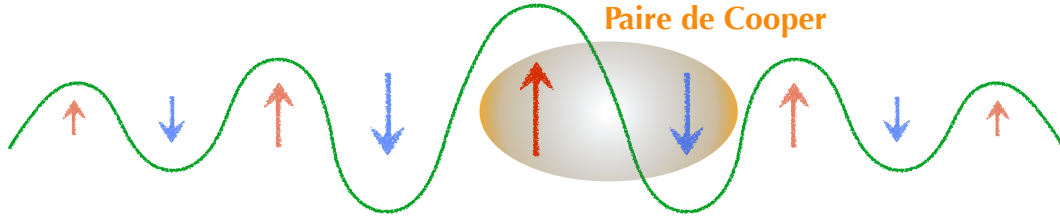


FIGURE 6.14 Illustration du mécanisme d'appariement *via* l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques à basse fréquence.

Eq.(6.30) que nous avons trouvée au sein de la théorie BCS :

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}'}} (1 - 2f(E_{\vec{k}'})) = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{\Delta_{\vec{k}'}}{2E_{\vec{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\vec{k}'}}{2}\right). \quad (6.62)$$

On a forcément

$$1 - 2f(E_{\vec{k}'}) = \tanh\left(\frac{\beta E_{\vec{k}'}}{2}\right) > 0 \quad (6.63)$$

car

$$E_{\vec{k}'} = \sqrt{\xi_{\vec{k}'}^2 + \Delta_{\vec{k}'}^2} > 0. \quad (6.64)$$

Si on considère une interaction répulsive $V_{\vec{k}\vec{k}'} > 0$, il faut que $\Delta_{\vec{k}'}$ soit de signe opposé à $\Delta_{\vec{k}}$ pour que l'équation Eq.(6.62) admette une solution. C'est finalement la *symétrie du gap supraconducteur*, présentée à la figure Fig.6.3 qui permet de répondre à la question que nous nous sommes posée.

Il est évident qu'un gap de symétrie *s* n'autorise pas d'appariement *via* une interaction répulsive car le gap ne change jamais de signe dans l'espace réciproque. Cependant, un gap de symétrie *d* change de signe lorsqu'on ajoute au vecteur d'onde $\vec{k}$ près de $(\pi, 0)$ à gauche de l'équation Eq.(6.62) le vecteur d'onde $(-\pi, \pi)$ (équivalent au vecteur d'onde (π, π) par simple ajout du vecteur $(2\pi, 0)$). Pour que l'équation Eq.(6.62) soit vérifiée sans problème, il suffit donc que l'interaction $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ possède une contribution importante provenant du vecteur d'onde (π, π) , puisque dans ce cas, la contribution à $\vec{k} = (\pi, 0)$ à gauche de l'équation Eq.(6.62) vient principalement du vecteur d'onde $\vec{k}' = (0, \pi)$ dans l'intégrale à droite, là où le gap $\Delta_{\vec{k}'}$ est de signe opposé. L'interaction $V_{\vec{k}\vec{k}'}$ est justement piquée à (π, π) dans le cas de l'interaction *via* l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques !

Résumé

La supraconductivité est une des phases les plus fascinantes de la matière solide. Découverte en 1911 dans le mercure à environ quatre degrés du zéro absolu, elle se manifeste dans un matériau lorsque ce dernier perd sa résistance électrique à un courant continu et repousse les champs magnétiques (effet Meissner) sous une température appelée température critique. Il aura fallu 46 ans et la théorie BCS de 1957 pour en connaître la cause dans les métaux et alliages métalliques : certains électrons sont capables de former des paires cohérentes de phase au caractère bosonique qui se créent par l'intermédiaire des vibrations des ions du réseau cristallin (ou encore, en échangeant un phonon). Cependant, la théorie plus raffinée d'Eliashberg prend explicitement en compte la dépendance en fréquence du mécanisme d'appariement. On parle de colle d'appariement électron-phonon (car l'appariement est retardé) et plus généralement de supraconductivité conventionnelle.

La découverte des cuprates en 1986 vient bouleverser tout ce qu'on croyait savoir de la supraconductivité. Ces matériaux artificiels, isolants de Mott au départ, deviennent des antiferroaimants, des supraconducteurs, et enfin des métaux lorsqu'on les dope aux trous en leur retirant chimiquement des électrons. La proximité entre les phases supraconductrice et antiferromagnétique, commune à de nombreuses familles de supraconducteurs exotiques, et le fait que cette supraconductivité naît dans un isolant de Mott semblent mettre en défaut les théories de champ moyen BCS et d'Eliashberg. Les phonons ne semblent en effet n'avoir rien à faire dans l'appariement électronique ici et c'est plutôt la piste d'un mécanisme d'appariement qui est envisagée. On parle de supraconductivité non conventionnelle.

Deux mécanismes d'appariement magnétiques semblent envisageables : un mécanisme *quasi* instantané utilisant le fait que la supraconductivité peut abaisser l'énergie du hamiltonien t - J dans un système possédant de fortes interactions, et un mécanisme retardé où les électrons forment une paire en s'échangeant des fluctuations de spin antiferromagnétiques.

Chapitre 7

Outils avancés pour comprendre la supraconductivité ★

Les travaux présentés dans ce chapitre font l'objet d'un article [218].

7.1 Le sens physique de la fonction spectrale anormale

7.1.1 Imparité pour l'appariement singulet

Nous avons vu dans la sous-section Sous-Sec.6.3.2 qu'on pouvait définir la *fonction de Green anormale* suivante au sein du formalisme de Nambu :

$$\boxed{\mathcal{F}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}}. \quad (7.1)$$

Cette fonction de Green anormale peut également être écrite en temps réel. On parle de *fonction de Green anormale retardée* :

$$\boxed{F^R(\vec{k}, t) = -i\theta(t) \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(t), \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}}. \quad (7.2)$$

La *fonction spectrale anormale* $\mathcal{A}_{an}(\omega)$ est alors obtenue à travers la représentation spectrale

$$F^R(\vec{k}, \omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta}. \quad (7.3)$$

Montrons que la fonction spectrale anormale est impaire en fréquences réelles dans le cas d'un appariement singulet (le cas qui nous intéressera par la suite). Nous avons

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [-i\theta(t)] e^{i(\omega+i\eta)t} dt = \frac{1}{\omega + i\eta} \quad (7.4)$$

à l'équation Eq.(2.75), et nous avons généralement

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, t) e^{i(\omega+i\eta)t} dt = \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega). \quad (7.5)$$

On peut alors voir la représentation spectrale Eq.(7.3) comme un produit de convolution issu de la transformée de Fourier de la fonction de Green anormale retardée Eq.(7.2). D'où

$$\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, t) = \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(t), \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (7.6)$$

et

$$\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(t), \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} e^{i(\omega+i\eta)t} dt. \quad (7.7)$$

On peut désormais montrer que la fonction spectrale anormale est impaire en fréquences réelles dans le cas d'un appariement singulet car ce type d'appariement revient à avoir un appariement symétrique sous inversion spatiale $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ et antisymétrique sous échange de spins entre les deux particules formant la paire de Cooper. On pourra ainsi écrire

$$\left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(t), \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = - \left\langle \left\{ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(t), \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (7.8)$$

afin de respecter ces symétries. Il faut noter que les moyennes thermodynamiques faites sur des opérateurs normaux ne sont pas soumises à l'antisymétrie sous échange de spins car elles ne sont associées qu'à une seule particule (pas d'échange de spins

possible). On a

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \left\{ \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(t), \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} e^{i(\omega+i\eta)t} dt \\
 &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(-t), \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} e^{i(\omega+i\eta)t} dt \\
 &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(t), \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} e^{-i(\omega+i\eta)t} dt \quad (7.9)
 \end{aligned}$$

en utilisant l'invariance sous translation dans le temps de la moyenne thermodynamique et la relation Eq.(7.8). La fonction spectrale anormale est ainsi impaire en fréquences réelles :

$$\boxed{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) = -\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, -\omega)} . \quad (7.10)$$

C'est également le cas des fonctions spectrales normales bosoniques, mais nous allons voir que la fonction spectrale anormale change aussi de signe sur la plage des fréquences positives.

7.1.2 Un changement de signe riche de sens physique

La figure Fig.7.1 présente l'allure typique des fonctions spectrales anormales que nous rencontrerons par la suite. Elles présenteront un maximum à basse fréquence (ligne pointillée) et un changement de signe à plus haute fréquence (ligne tiretée). On sait que la fonction spectrale traditionnelle Eq.(2.88) nous donne accès à la contribution des processus $(\vec{k}, \omega)$ (au vecteur d'onde $\vec{k}$ et à la fréquence ω) à la dynamique normale du système. La fonction spectrale anormale fait la même chose en donnant la contribution des processus d'appariement $(\vec{k}, \omega)$ à la *dynamique supraconductrice* du système. La fonction spectrale anormale est positive à basse fréquence et négative à haute fréquence, ce qui peut être interprété comme suit :

- si $\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) > 0$, les processus à deux électrons de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de fréquence ω favorisent la formation de paires de Cooper ;
- si $\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) < 0$, les processus à deux électrons de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de fréquence ω défavorisent la formation de paires de Cooper.

L'inverse de la fréquence ω correspondant au maximum de la partie positive de la fonction spectrale anormale donne alors un ordre de grandeur du *retard* caractérisant

l'appariement supraconducteur. Quant au changement de signe, il comporte un sens physique très semblable à celui de l'interaction effective électron-phonon Eq.(6.40).

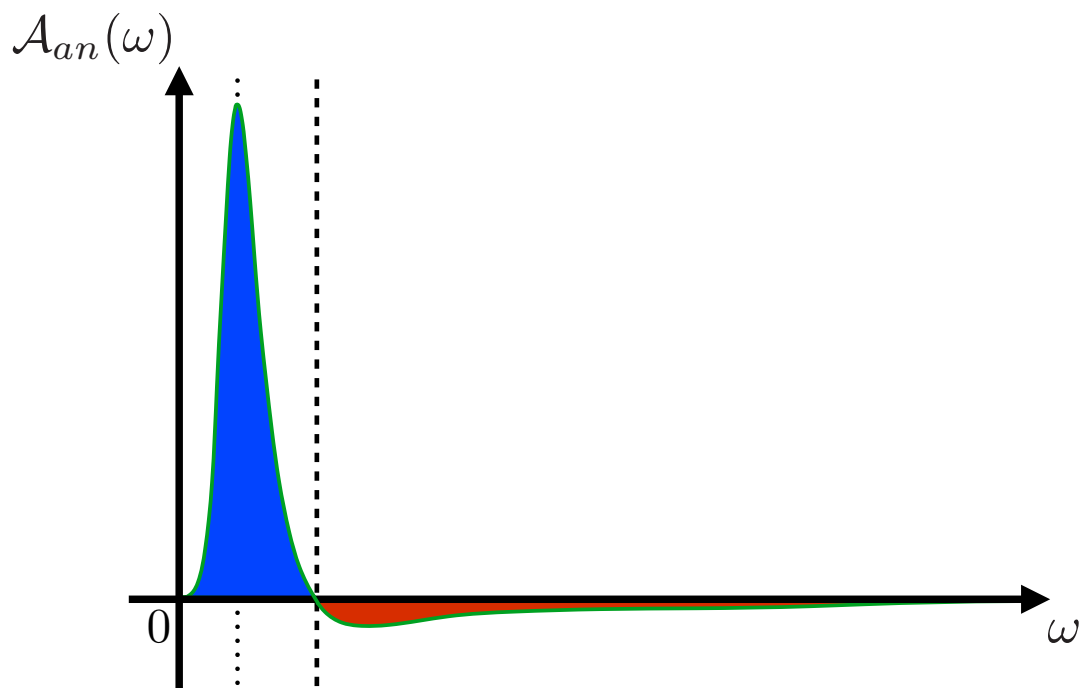


FIGURE 7.1 Allure typique d'une fonction spectrale anormale (en vert). Elle présente un maximum à basse fréquence (ligne pointillée) et un changement de signe à plus haute fréquence (ligne tiretée). Le paramètre d'ordre cumulatif montrera que l'aire bleue augmente la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur tandis que l'aire rouge la diminue.

Par ailleurs, le paramètre d'ordre cumulatif discuté dans la prochaine section montrera que l'aire bleue de la figure Fig.7.1 contribue à l'augmentation de la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur tandis que l'aire rouge contribue à sa diminution.

7.2 Paramètre d'ordre cumulatif à température nulle

Le *paramètre d'ordre cumulatif* est une quantité définie à température nulle [219] comme étant

$$I_F(\vec{k}, \omega) = \int_0^\omega \frac{d\omega'}{2\pi} \mathcal{A}_{an}^{T=0}(\vec{k}, \omega'). \quad (7.11)$$

Quelle physique se cache derrière ce paramètre d'ordre cumulatif? Cette quantité revient à sommer continument sur les fréquences réelles la fonction spectrale anormale, soit la contribution des processus d'appariement $(\vec{k}, \omega)$ à la dynamique supraconductrice. On pourrait alors très bien se demander à quoi est censé ressembler ce paramètre d'ordre cumulatif en fonction de la fréquence lorsque le paramètre d'ordre est positif. La fonction spectrale anormale est positive (négative) quand le processus $(\vec{k}, \omega)$ contribue favorablement (défavorablement) à la supraconductivité. On s'attend donc à voir croître le paramètre d'ordre cumulatif sur les fréquences favorables à l'appariement supraconducteur et à le voir décroître sur les fréquences qui lui sont défavorables. Les cas de la théorie BCS et de la théorie d'Eliashberg sont représentés à la figure Fig.7.2 a).

On voit dans ces deux cas que le paramètre d'ordre cumulatif croît à basse fréquence et décroît ensuite : comme vu précédemment, on parle alors de *colle d'appariement* car l'appariement se fait à basse fréquence et ne varie donc que sur de grands intervalles de temps. Les processus d'excitation à basse fréquence sont favorables à l'appariement car ce sont des *processus retardés*, contrairement aux processus à haute fréquence, qui sont quasi-instantanés. On y retrouve les effets de l'interaction effective électron-phonon Eq.(6.40). On peut aussi s'intéresser à la limite haute fréquence du paramètre d'ordre cumulatif. On pourrait montrer [219] que

$$I_F(\vec{k}, \omega) \xrightarrow[\omega \rightarrow +\infty]{} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}^{T=0}. \quad (7.12)$$

La limite à fréquence infinie du paramètre d'ordre cumulatif n'est rien d'autre que le paramètre d'ordre supraconducteur, ce qui justifie *a posteriori* la définition de $I_F(\vec{k}, \omega)$. Ce dernier résultat peut se comprendre parce qu'on a sommé toutes les contributions à la dynamique supraconductrice : cette somme finit alors par tendre vers la valeur moyenne constante qui traduit la force de la supraconductivité. Une

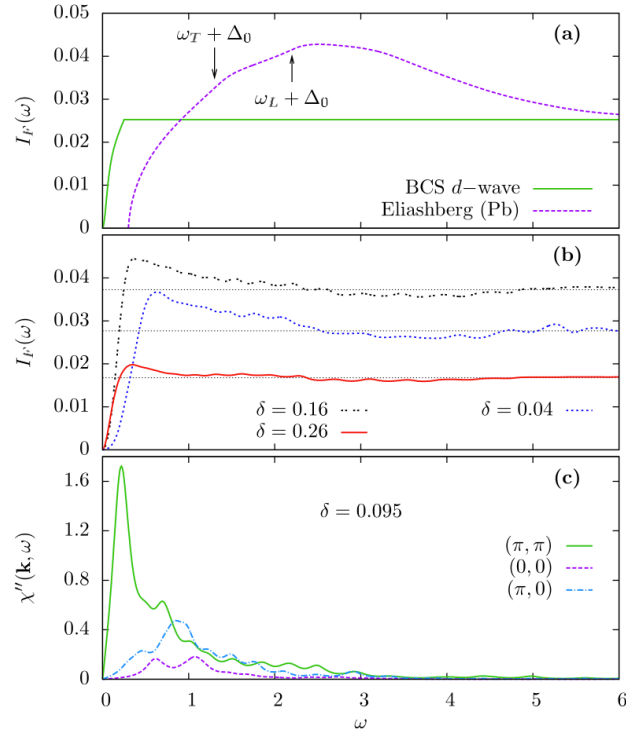


FIGURE 7.2 **a)** Paramètre d'ordre cumulatif premiers voisins à température nulle pour un supraconducteur d -wave BCS (vert) avec une fréquence de coupure $\omega_c = 0.5$, et paramètre d'ordre cumulatif local à température nulle pour le plomb dans le cadre de la théorie d'Eliashberg (magenta). Dans le cas du plomb, les fréquences sont mesurées en unités de la fréquence de phonon transverse. L'échelle verticale est arbitraire. Données pour le plomb prises dans [119]. **b)** $I_F(\omega)$ pour différents dopages en trous dans le cadre du modèle de Hubbard en CDMFT 2×2 avec diagonalisation exacte. Les lignes horizontales pointillées marquent la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur pour chaque dopage. **c)** Les trois composantes de Fourier indépendantes de la partie imaginaire de la susceptibilité de spin χ'' en CDMFT 2×2 avec diagonalisation exacte dans le cas sous-dopé. La composante (π, π) domine à basse fréquence. Figure tirée de [219].

petite discussion physique s'impose. À temps égal et en fonction de la séparation entre les sites i et j , $\langle \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}}$ nous renseigne sur la longueur de corrélation de la phase supraconductrice. De même, si on part de $\langle \hat{c}_{i\uparrow}(t) \hat{c}_{i\downarrow}(0) \rangle_{\mathcal{H}}$, ou de $\langle \hat{c}_{i\uparrow}(t) \hat{c}_{i+\delta\downarrow}(0) \rangle_{\mathcal{H}}$ (où $i + \delta$ désigne les premiers voisins du site i) dans le cas d'une supraconductivité de type d , la séparation en temps (ou en fréquence) nous renseigne sur le temps de corrélation, ou encore sur la dynamique de la paire.

Revenons à la propriété Eq.(7.12) afin de la vérifier, on peut regarder la figure Fig.7.2 b) qui nous montre deux choses. Tout d'abord, on obtient une forme similaire pour le paramètre d'ordre cumulatif dans le cadre du modèle de Hubbard par rapport à la théorie d'Eliashberg de la figure Fig.7.2 a), ce qui va dans le sens d'une colle d'appariement à basse fréquence (sûrement due à un échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques). Ensuite, on voit que les trois courbes correspondent à trois dopages en trous qui balayent le dôme supraconducteur. En regardant les valeurs asymptotiques des différents paramètres d'ordre cumulatifs, on observe la bonne évolution pour le paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage : il augmente du début du dôme supraconducteur $\delta \simeq 0.04$ jusqu'au dopage optimal $\delta \simeq 0.16$ et diminue ensuite jusqu'à la fin du dôme supraconducteur $\delta \simeq 0.26$. Quant à la figure Fig.7.2 c), elle présente simplement le fait que la contribution majeure à la partie imaginaire de la susceptibilité de spin à basse fréquence et à faible dopage en trous nous vient du vecteur d'onde (π, π) qui correspond bien à l'antiferromagnétisme.

7.3 Et à température finie ?

À température finie, nous n'avons *a priori* pas d'équivalents pour les équations Eq.(7.11) et Eq.(7.12). Les calculs détaillés dans l'annexe Ann.D donnent cependant l'expression suivante pour le *paramètre d'ordre cumulatif à température finie* :

$$\boxed{\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega') f(-\omega')} \quad (7.13)$$

où f désigne la distribution de Fermi-Dirac. Ce paramètre d'ordre cumulatif possède bien les propriétés attendues, à savoir

$$\boxed{\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) \xrightarrow{T \rightarrow 0} I_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega)} \quad (7.14)$$

et

$$\boxed{\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow +\infty} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}}^{T \neq 0}} \quad (7.15)$$

avec le paramètre d'ordre supraconducteur

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} = \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}}^{T \neq 0}. \quad (7.16)$$

Notons, qu'on peut trouver une expression plus simple du paramètre d'ordre supraconducteur Eq.(7.16) en utilisant l'impairité de la fonction spectrale anormale Eq.(7.10) et la représentation spectrale de la fonction de Green anormale :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \\ &= \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{(-i\omega_n - \omega) \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} \\ &= -i\omega_n \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} - \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} \\ &= - \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

La fonction de Green anormale est ainsi paire en fréquences de Matsubara. De surcroît, si la *symétrie sous renversement du temps* n'est pas brisée, nous sommes certains que la fonction spectrale anormale est réelle et on obtient

$$\boxed{\mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) = - \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega \operatorname{Im} \mathcal{F}(\vec{k}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} \in \mathbb{R}}. \quad (7.18)$$

On peut alors définir le *paramètre d'ordre supraconducteur à température finie* comme étant

$$\boxed{\varphi_{SC}(\vec{k}) = \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}}^{T \neq 0} = -\frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \operatorname{Re} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n)} \quad (7.19)$$

car la fonction de Green anormale est purement réelle, paire en $i\omega_n$ et décroît en $1/(i\omega_n)^2$, comme nous venons de le montrer.

Il ne nous manque désormais qu'une seule chose pour mettre en pratique cette nouvelle expression : avoir accès à la fonction spectrale anormale en fréquence réelle, à température finie. Ceci sera le sujet de la section Sec.7.4 avec la *méthode MaxEntAux*.

7.4 Méthode MaxEntAux

7.4.1 L'astuce de la fonction de Green auxiliaire

Nous avons mentionné dans la sous-section Sous-Sec.3.7.5 que la *méthode d'entropie maximale* ne peut pas être directement utilisée pour traiter des fonctions spectrales anormales. Le problème vient du fait que cette dernière, en plus d'être impaire (ce qui pourrait être traité), change de signe sur la plage des fréquences positives à une fréquence que l'on ne connaît *a priori* pas (comme on peut le voir à la figure Fig.7.1). Néanmoins, on peut noter qu'il a été proposé d'ajouter une constante à l'ensemble de la fonction spectrale anormale pour la rendre complètement positive [220], mais cela ajoute un nouveau paramètre ajustable et n'est pas valide pour les fonctions spectrales complexes. D'autres ont alors utilisé l'hypothèse que la fonction spectrale et la self-energy anormales ne changent pas de signe pour contourner ce problème [124, 221], nous verrons par la suite que ces hypothèses n'ont pas lieu d'être.

L'astuce que nous allons utiliser ici repose sur le fait que toute fonction de Green associant des opérateurs de création ou d'annihilation à leurs conjugués respectifs (comme les fonctions de Green normales par exemple) aura forcément un poids spectral positif, comme on peut le voir à l'équation Eq.(2.89). Il serait donc intéressant de construire une *fonction de Green auxiliaire* de façon à ce que cette fonction de Green ait un poids spectral positif et s'exprime en fonction des fonctions de Green normales et anormales. Il serait alors possible d'utiliser la méthode d'entropie maximale pour avoir accès aux poids spectraux auxiliaires et normaux pour ensuite en déduire la fonction spectrale anormale.

Définissons par exemple l'*opérateur mixte*

$$\hat{a}_{\vec{k}} = \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} + \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \quad (7.20)$$

et cherchons à calculer le poids spectral positif associé à la *fonction de Green auxiliaire*

$$\mathcal{G}_{aux}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{T}_\tau \hat{a}_{\vec{k}}(\tau) \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} . \quad (7.21)$$

On peut développer cette fonction de Green auxiliaire comme

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_{aux}(\vec{k}, \tau) &= - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \left[\hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(\tau) + \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger(\tau) \right] \left[\hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger(0) + \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right] \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\
&= - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\
&\quad - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\
&= \mathcal{G}_\uparrow(\vec{k}, \tau) - \mathcal{G}_\downarrow(-\vec{k}, -\tau) + \mathcal{F}(\vec{k}, \tau) + [\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)]^*. \tag{7.22}
\end{aligned}$$

Passons maintenant en fréquences de Matsubara. Ici, c'est surtout la transformée de Fourier discrète de $[\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)]^*$ qui pose éventuellement problème. On a

$$\mathcal{F}(\vec{k}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \tau} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \tag{7.23}$$

d'où

$$\begin{aligned}
[\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)]^* &= \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{+i\omega_n \tau} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}^*(\vec{k}, \omega)}{-i\omega_n - \omega} \\
&\stackrel{m=-(n+1)}{=} \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_m \tau} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}^*(\vec{k}, \omega)}{i\omega_m - \omega}. \tag{7.24}
\end{aligned}$$

Si la *symétrie sous renversement du temps* n'est pas brisée, la fonction spectrale anormale est forcément réelle, ce qui implique que $\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)$ et $[\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)]^*$ ont la même transformée de Fourier discrète. Finalement :

$$\boxed{\mathcal{G}_{aux}(\vec{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_\uparrow(\vec{k}, i\omega_n) - \mathcal{G}_\downarrow(-\vec{k}, -i\omega_n) + 2 \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n)} \tag{7.25}$$

et

$$\mathcal{A}_{aux}(\vec{k}, \omega) = \mathcal{A}_\uparrow(\vec{k}, \omega) + \mathcal{A}_\downarrow(-\vec{k}, -\omega) + 2 \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega). \tag{7.26}$$

La *fonction spectrale anormale* s'extrait donc après trois prolongements analytiques *via*

$$\boxed{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2} \left[\mathcal{A}_{aux}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{A}_\uparrow(\vec{k}, \omega) - \mathcal{A}_\downarrow(-\vec{k}, -\omega) \right]}. \tag{7.27}$$

Le paramètre d'ordre cumulatif à température finie s'obtient comme étant

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) &= \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega') f(-\omega') \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\mathcal{A}_{aux}(\vec{k}, \omega') - \mathcal{A}_{\uparrow}(\vec{k}, \omega') - \mathcal{A}_{\downarrow}(-\vec{k}, -\omega') \right] f(-\omega'),\end{aligned}\quad (7.28)$$

ce qui établit ainsi un lien entre les poids spectraux analytiquement prolongeables et le paramètre d'ordre cumulatif à température finie. Notons que comme $\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)$ est impaire et que les poids spectraux normaux sont normalisés à l'unité (d'après l'équation Eq.(2.95)), cela impose que le poids spectral auxiliaire $\mathcal{A}_{aux}(\vec{k}, \omega)$ soit normalisé à deux :

$$\boxed{\int \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}_{aux}(\vec{k}, \omega) = 2} . \quad (7.29)$$

D'un point de vue informatique, il est surtout important de connaître les parties réelle et imaginaire de la fonction de Green auxiliaire pour ensuite en faire le prolongement analytique, les autres étant directement données par le programme. Or, l'équation Eq.(7.25) permet de trouver

$$\boxed{\begin{cases} \operatorname{Re} \mathcal{G}_{aux}(\vec{k}, i\omega_n) &= \operatorname{Re} \mathcal{G}_{\uparrow}(\vec{k}, i\omega_n) - \operatorname{Re} \mathcal{G}_{\downarrow}(-\vec{k}, i\omega_n) + 2 \operatorname{Re} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) \\ \operatorname{Im} \mathcal{G}_{aux}(\vec{k}, i\omega_n) &= \operatorname{Im} \mathcal{G}_{\uparrow}(\vec{k}, i\omega_n) + \operatorname{Im} \mathcal{G}_{\downarrow}(-\vec{k}, i\omega_n) \end{cases}} \quad (7.30)$$

en utilisant le fait que la fonction de Green anormale en fréquences de Matsubara soit réelle et que

$$\begin{cases} \operatorname{Re} \mathcal{G}_{\downarrow}(-\vec{k}, -i\omega_n) &= \operatorname{Re} \mathcal{G}_{\downarrow}(-\vec{k}, i\omega_n) \\ \operatorname{Im} \mathcal{G}_{\downarrow}(-\vec{k}, -i\omega_n) &= -\operatorname{Im} \mathcal{G}_{\downarrow}(-\vec{k}, i\omega_n) . \end{cases} \quad (7.31)$$

Il faut aussi remarquer que l'astuce présentée ici est grandement simplifiée dans le cas d'un appariement singulet sans brisure de la symétrie sous renversement du temps car la symétrie sous inversion spatiale et l'équivalence des spins *up* et *down*

donne

$$\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2} \left[\mathcal{A}_{aux}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{A}(\vec{k}, -\omega) \right] \quad (7.32)$$

où $\mathcal{A}(\vec{k}, \omega)$ est la fonction spectrale normale en $(\vec{k}, \omega)$. Cette méthode simplifiée ne requiert que deux prolongements analytiques. Pour une supraconductivité de type d étudiée en CDMFT 2×2 , où seuls les vecteurs d'onde $(0, 0)$, $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$, et (π, π) sont accessibles en pratique, la seule contribution en terme de vecteur d'onde à la fonction spectrale anormale vient de $\vec{k} = (\pi, 0)$ (ou $\vec{k} = (\pi, 0)$ avec un signe opposé) car c'est le seul vecteur d'onde accessible où le gap supraconducteur de symétrie d est non nul (voir Fig.6.3). Pour l'étude de la supraconductivité de type s , on pourra intégrer sur les vecteurs d'onde car le gap est isotrope dans l'espace réciproque, ce qui donnera

$$\mathcal{A}_{an}(\omega) = \frac{1}{2} [\mathcal{A}_{aux}(\omega) - \mathcal{A}_{loc}(\omega) - \mathcal{A}_{loc}(-\omega)] \quad (7.33)$$

On se servira de cette intégration pour l'étude du plomb, un supraconducteur conventionnel à couplage fort, qui servira à vérifier la méthode MaxEntAux dans la section Sec.7.5.

7.4.2 Fonctions de Green auxiliaires généralisées pour l'appariement singulet ou triplet multi-bandes

Définissons

$$\mathcal{G}_\gamma(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_{\vec{k}\gamma}(\tau) \hat{c}_{\vec{k}\gamma}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (7.34)$$

où γ est un indice à la fois pour le spin et la bande électronique. On peut maintenant définir un premier opérateur mixte

$$\hat{a}_{\vec{k}\gamma\delta} = \hat{c}_{\vec{k}\gamma} + \hat{c}_{-\vec{k}\delta}^\dagger \quad (7.35)$$

et une première fonction de Green auxiliaire

$$\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux1}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{a}_{\vec{k}\gamma\delta}(\tau) \hat{a}_{\vec{k}\gamma\delta}^\dagger(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (7.36)$$

possédant un poids spectral positif. On peut développer cette fonction de Green comme

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux1}(\vec{k}, \tau) &= \mathcal{G}_{\gamma}(\vec{k}, \tau) - \mathcal{G}_{\delta}(-\vec{k}, -\tau) - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{c}_{\vec{k}\gamma}(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\delta}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{c}_{-\vec{k}\delta}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{\vec{k}\gamma}^{\dagger}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \mathcal{G}_{\gamma}(\vec{k}, \tau) - \mathcal{G}_{\delta}(-\vec{k}, -\tau) + \mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, \tau) + [\mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, \tau)]^*\end{aligned}\quad (7.37)$$

avec

$$\mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{c}_{\vec{k}\gamma}(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\delta}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} . \quad (7.38)$$

Les deux derniers termes sont généralement associés à des fonctions spectrales conjuguées complexes l'une de l'autre. En utilisant la représentation spectrale

$$\mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, i\omega_n) = - \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{c}_{\vec{k}\gamma}(\tau) \hat{c}_{-\vec{k}\delta}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} . \quad (7.39)$$

On peut réécrire l'équation Eq.(7.37) en fréquences de Matsubara :

$$\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux1}(\vec{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{\gamma}(\vec{k}, i\omega_n) - \mathcal{G}_{\delta}(-\vec{k}, -i\omega_n) + \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an}(\vec{k}, \omega) + \mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an*}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} . \quad (7.40)$$

En pratique, la fonction de Green auxiliaire en fréquences de Matsubara peut être calculée *via*

$$\boxed{\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux1}(\vec{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{\gamma}(\vec{k}, i\omega_n) - \mathcal{G}_{\delta}(-\vec{k}, -i\omega_n) + \mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, i\omega_n) + [\mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, -i\omega_n)]^*} . \quad (7.41)$$

La relation Eq.(7.37) peut aussi être utilisée si le prolongement analytique est directement fait à partir du temps imaginaire.

On peut en plus définir, par analogie avec l'opérateur Eq.(7.35), un deuxième opérateur mixte

$$\boxed{\hat{b}_{\vec{k}\gamma\delta} = \hat{c}_{\vec{k}\gamma} + i \hat{c}_{-\vec{k}\delta}^{\dagger}} \quad (7.42)$$

et une deuxième fonction de Green auxiliaire

$$\boxed{\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux2}(\vec{k}, \tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{b}_{\vec{k}\gamma\delta}(\tau) \hat{b}_{\vec{k}\gamma\delta}^{\dagger}(0) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}} \quad (7.43)$$

possédant également un poids spectral positif. Par analogie avec les relations Eq.(7.40)

et Eq.(7.41), on a

$$\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux2}(\vec{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{\gamma}(\vec{k}, i\omega_n) - \mathcal{G}_{\delta}(-\vec{k}, -i\omega_n) - i \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an*}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \quad (7.44)$$

et

$$\boxed{\mathcal{G}_{\gamma\delta}^{aux2}(\vec{k}, i\omega_n) = \mathcal{G}_{\gamma}(\vec{k}, i\omega_n) - \mathcal{G}_{\delta}(-\vec{k}, -i\omega_n) - i \left(\mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, i\omega_n) - [\mathcal{F}_{\gamma\delta}(\vec{k}, -i\omega_n)]^* \right)} \quad (7.45)$$

Le prolongement analytique des deux fonctions de Green auxiliaires donne

$$\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{aux1}(\vec{k}, \omega) = \mathcal{A}_{\gamma}(\vec{k}, \omega) + \mathcal{A}_{\delta}(-\vec{k}, -\omega) + \mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an}(\vec{k}, \omega) + \mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an*}(\vec{k}, \omega), \quad (7.46)$$

$$\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{aux2}(\vec{k}, \omega) = \mathcal{A}_{\gamma}(\vec{k}, \omega) + \mathcal{A}_{\delta}(-\vec{k}, -\omega) - i(\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an*}(\vec{k}, \omega)) \quad (7.47)$$

dont on extrait, après quatre prolongements analytiques, la fonction spectrale anormale recherchée :

$$\boxed{\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{an}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{2} \left[\mathcal{A}_{\gamma\delta}^{aux1}(\vec{k}, \omega) + i \mathcal{A}_{\gamma\delta}^{aux2}(\vec{k}, \omega) - (1 + i) \left(\mathcal{A}_{\gamma}(\vec{k}, \omega) + \mathcal{A}_{\delta}(-\vec{k}, -\omega) \right) \right]} \quad (7.48)$$

En gardant en mémoire le fait que γ et δ contiennent à la fois le spin et l'indice de bande, cette méthode est valide pour l'appariement singulet ou triplet, et pour le cas à plusieurs orbitales, avec ou sans symétrie sous inversion spatiale ou symétrie sous renversement du temps.

7.5 Application au plomb

7.5.1 Démarche

Nous allons vérifier la pertinence de la *méthode MaxEntAux* en nous intéressant au prolongement analytique des solutions aux équations d'Eliashberg en fréquences de Matsubara pour le plomb. Nous avons choisi un matériau aussi simple que le plomb car les résultats concernant ce dernier sont désormais indiscutables et servent donc d'excellente base à une démarche de vérification. On prend ainsi au départ les

résultats en fréquences réelles publiés dans [119]. Nous allons alors transformer ces résultats en des résultats dépendants des fréquences de Matsubara et la méthode MaxEntAux sera testée en prolongeant analytiquement ces derniers résultats pour les comparer aux données originelles.

Considérons l'interpolation par spline $\Delta(\omega)$ de la fonction de gap extraite de [119], présentée à la figure Fig.7.3. La fréquence de phonon transverse $\omega_1^t = 4.4$ meV est prise comme unité de fréquence ($\omega = 1 \equiv \omega_1^t$). Suivant les équations Eq.(6.47) et Eq.(6.48), on peut calculer les fonctions spectrales locale et anormale

$$\mathcal{A}^{loc}(\omega) = \mathcal{C} \operatorname{Re} \left(\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right), \quad (7.49)$$

$$\mathcal{A}^{an}(\omega) = \mathcal{C} \operatorname{Re} \left(\frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right) \quad (7.50)$$

où la racine carrée complexe est choisie de sorte que sa partie réelle soit paire en ω et que sa partie imaginaire soit impaire, en accord avec la remarque technique à la fin de la sous-section Sous-sec.6.3.3. $\mathcal{C}$ est la constante normalisant $\mathcal{A}^{loc}(\omega)$ à 1 sur l'intervalle de fréquences $[-\omega_c, \omega_c]$, où la fréquence de coupure est $\omega_c = 25$. Il est important de noter que les résultats publiés pour $\Delta(\omega)$ ne s'étendent que jusque $\omega \simeq 7$. Les fonctions spectrales Eq.(7.49) et Eq.(7.50) sont alors étendues comme des constantes jusque ω_c de façon à ce que les parties réelle et imaginaire de $\Delta(\omega)$ obtenues *via* la relation Eq.(7.55) (équivalent local de l'équation Eq.(6.49)) soient en accord avec les résultats publiés dans [119].

En utilisant les représentations spectrales

$$\mathcal{G}^{loc}(i\omega_n) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}^{loc}(\omega)}{i\omega_n - \omega}, \quad (7.51)$$

$$\mathcal{F}(i\omega_n) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}^{an}(\omega)}{i\omega_n - \omega}, \quad (7.52)$$

les équations précédentes pour les fonctions spectrales locale et anormale donnent les fonctions de Green locale et anormale en fréquences de Matsubara pour $T = 1.3 \text{ K} = 0.02 \omega_1^t$. L'intégrale sur les vecteurs d'onde de la relation Eq.(7.25) dans le

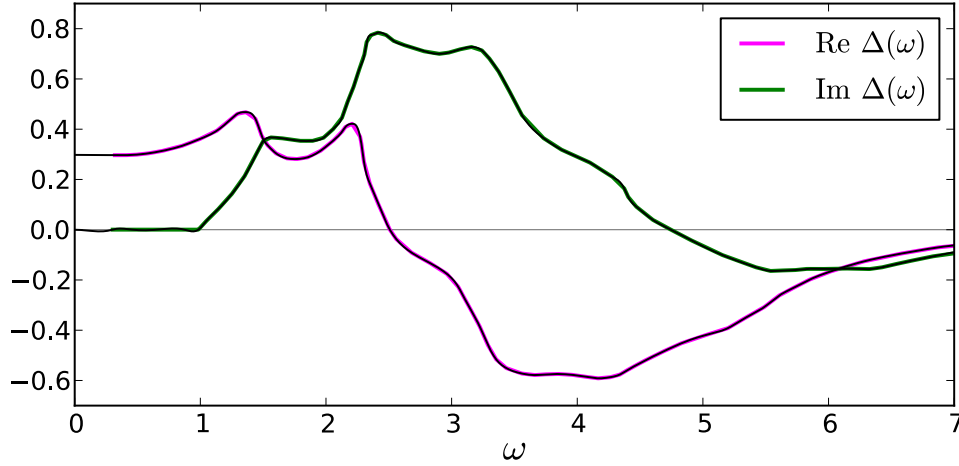


FIGURE 7.3 Interpolations des parties réelle et imaginaire de la fonction de gap tirées de [119]. Lignes pleines magenta et verte : parties réelle et imaginaire, respectivement, de la fonction de gap extraite de [119]. Lignes pleines noires : interpolations par spline des données. Notons que ces interpolations sont extrapolées dans le gap supraconducteur $0 \leq \omega \leq 0.3$ avec une fonction polynomiale qui satisfait la continuité de la fonction de gap et de sa dérivée, et qui possède une pente nulle à $\omega = 0$. $\text{Re } \Delta$ est paire en ω et $\text{Im } \Delta$ est impaire.

cas de l'appariement singulet s'écrit

$$\mathcal{G}^{aux}(i\omega_n) = \mathcal{G}^{loc}(i\omega_n) - \mathcal{G}^{loc}(-i\omega_n) + 2\mathcal{F}(i\omega_n). \quad (7.53)$$

On ajoute un bruit gaussien pour imposer une erreur relative de 10^{-4} sur chaque composante en fréquences de Matsubara des fonctions de l'équation Eq.(7.53) afin de simuler des erreurs statistiques Monte Carlo (les résultats qui seront présentés par la suite restent en fait valides pour une erreur relative de 10^{-3}). En utilisant le code *OmegaMaxEnt* pour la méthode d'entropie maximale [58], on prolonge analytiquement $\mathcal{G}^{loc}(i\omega_n)$ et $\mathcal{G}^{aux}(i\omega_n)$ pour obtenir $\mathcal{A}^{loc}(\omega)$ et $\mathcal{A}^{aux}(\omega)$. On peut ensuite extraire la fonction spectrale anormale de l'équation Eq.(7.33)

$$\boxed{\mathcal{A}^{an}(\omega) = \frac{1}{2} [\mathcal{A}^{aux}(\omega) - \mathcal{A}^{loc}(\omega) - \mathcal{A}^{loc}(-\omega)]}. \quad (7.54)$$

Les parties imaginaires des fonctions de Green locale et anormale sont proportion-

nelles aux fonctions spectrales $\mathcal{A}^{loc}(\omega)$ et $\mathcal{A}^{an}(\omega)$ tandis que leurs parties réelles sont obtenues *via* les relations de Kramers-Krönig. La fonction de gap découle finalement de la relation

$$\Delta(\omega) = \frac{2\omega \mathcal{F}(\omega)}{\mathcal{G}^{loc}(\omega) - \mathcal{G}^{loc*}(-\omega)} . \quad (7.55)$$

Avant de poursuivre avec les résultats, une remarque technique peut être faite concernant la relation de Kramers-Krönig

$$\text{Re } \mathcal{G}(\omega) = -\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (7.56)$$

permettant d'obtenir les parties réelles des différentes fonctions de Green à partir de leurs parties imaginaires. En effet, la valeur principale de l'intégrale peut être difficile à évaluer numériquement, surtout si on veut un résultat très précis. Une astuce peut néanmoins être utilisée ici. En considérant que l'on intègre numériquement entre les réels a et b (tels que la partie imaginaire de la fonction de Green considérée soit négligeable pour $\omega = a$ et $\omega = b$), il s'agit d'écrire

$$\begin{aligned} \text{Re } \mathcal{G}(\omega) &= -\mathcal{P} \int_a^b \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega') - \text{Im } \mathcal{G}(\omega)}{\omega - \omega'} - \mathcal{P} \int_a^b \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega)}{\omega - \omega'} \\ &= \mathcal{P} \int_a^b \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega) - \text{Im } \mathcal{G}(\omega')}{\omega - \omega'} + \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega)}{\pi} \ln \left(\frac{b - \omega}{\omega - a} \right) . \end{aligned} \quad (7.57)$$

On voit maintenant que le terme intégré ne représente plus aucun problème dans le cas où $\omega' = \omega$ car

$$\frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega) - \text{Im } \mathcal{G}(\omega')}{\omega - \omega'} \xrightarrow{\omega' \rightarrow \omega} \frac{d \text{Im } \mathcal{G}}{d\omega}(\omega) . \quad (7.58)$$

On a ainsi

$$\boxed{\text{Re } \mathcal{G}(\omega) = \int_a^b \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega) - \text{Im } \mathcal{G}(\omega')}{\omega - \omega'} + \frac{\text{Im } \mathcal{G}(\omega)}{\pi} \ln \left(\frac{b - \omega}{\omega - a} \right)} . \quad (7.59)$$

Le seul prix à payer pour utiliser cette méthode est d'exclure les valeurs a et b pour ω afin de ne pas avoir de problème avec le logarithme népérien, ce qui n'est pas particulièrement grave car la partie imaginaire de $\mathcal{G}(\omega)$ y est négligeable.

7.5.2 Fonction de gap

On peut désormais comparer la fonction de gap originelle de la figure Fig.7.3 avec la fonction de gap Eq.(7.55) obtenue après prolongement analytique *via* la méthode d'entropie maximale. Une comparaison directe est présentée dans la figure Fig.7.4.

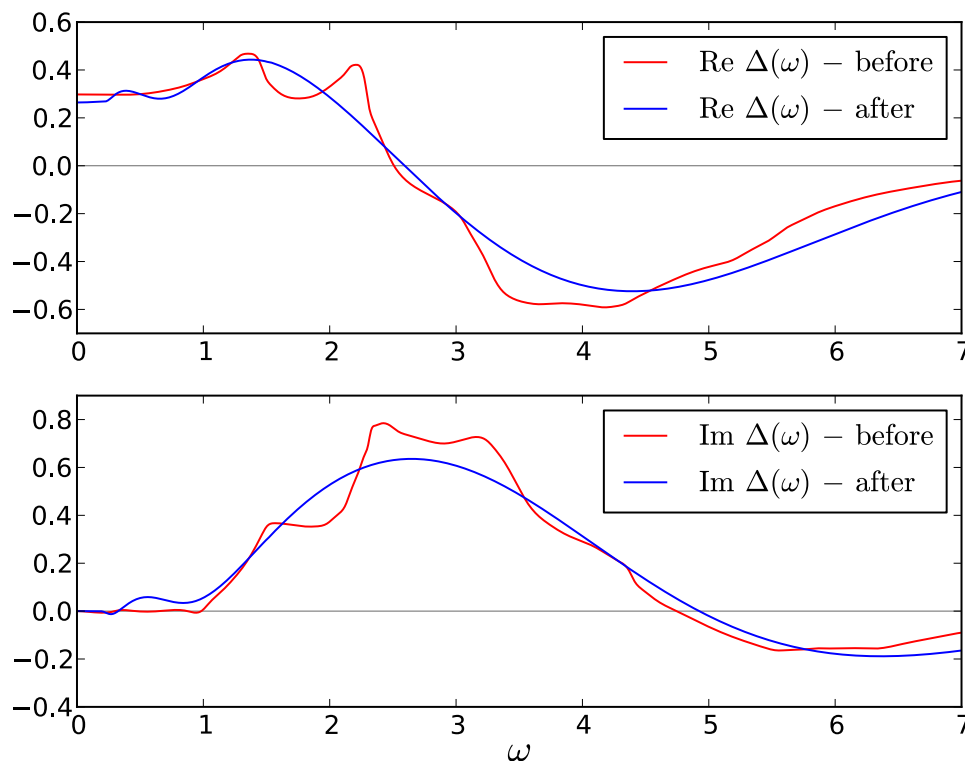


FIGURE 7.4 Comparaison entre les fonctions de gap obtenues avant et après prolongement analytique, avec la méthode MaxEntAux. Lignes pleines rouges : interpolations par spline des parties réelle et imaginaire de la fonction de gap extraite de [119] avant prolongement analytique. Lignes pleines bleues : parties réelle et imaginaire de la fonction de gap obtenue de l'équation Eq.(7.55), après prolongement analytique.

Même si certains détails sont perdus dans le prolongement analytique, les caractéristiques principales sont préservées, notamment le fait que la fonction de gap possède un maximum puis devient négative à suffisamment haute fréquence avant de s'évanouir.

7.5.3 Fonction spectrale anormale et paramètre d'ordre cumulatif

Le panneau haut de la figure Fig.7.5 compare la fonction spectrale obtenue de l'équation Eq.(7.50) utilisant la fonction de gap publiée, avec la même fonction extraite de la relation Eq.(7.54) après prolongement analytique des données en fréquences de Matsubara. Une partie négative est clairement visible dans les deux quantités au-dessus de 2.5 fois la fréquence de phonon transverse.

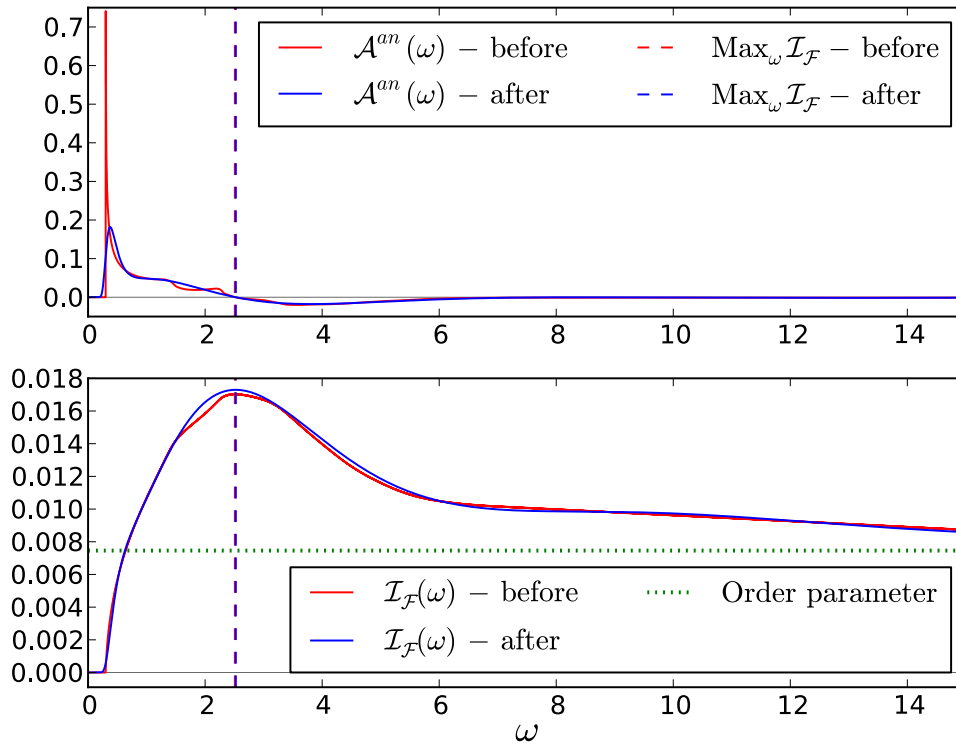


FIGURE 7.5 Comparaison entre les fonctions spectrales anormales et les paramètres d'ordre cumulatifs obtenus avant et après prolongement analytique, avec la méthode MaxEntAux. Lignes pleines rouges : fonction spectrale anormale et paramètre d'ordre cumulatif extraits de l'équation Eq.(7.50), avant prolongement analytique. Lignes pleines bleues : fonction spectrale anormale et paramètre d'ordre cumulatif obtenus à partir de la relation Eq.(7.54), après prolongement analytique. Lignes tiretées : fréquence du maximum de chaque paramètre d'ordre cumulatif. À cette échelle, les lignes tiretées rouge et bleue sont indiscernables. Ligne pointillée verte : valeur du paramètre d'ordre supraconducteur.

Le paramètre d'ordre cumulatif Eq.(7.13), montré dans le panneau bas de la

figure Fig.7.5, contient l'information importante sur la dynamique d'appariement, comme expliqué dans les sections Sec.7.2 et Sec.7.3. Il est bien préservé par le prolongement analytique. Les fréquences plus grandes que le gap contribuent positivement au paramètre d'ordre supraconducteur. En fait, toutes les fréquences allant jusqu'au maximum, autour de 2.5 fois la fréquence de phonon transverse, contribuent positivement à l'appariement. Au-delà de ce maximum, l'effet de la répulsion coulombienne représentée par le pseudo-potentiel μ^* dans la théorie d'Eliashberg tend à casser les paires de Cooper. La position du pic du paramètre d'ordre cumulatif (soit la position du changement de signe de la fonction spectrale anormale) et la région contribuant négativement à l'appariement sont bien préservées par le prolongement analytique.

7.6 Comment distinguer des appariements retardé et *quasi* instantané et évaluer quantitativement une contribution *quasi* instantanée à l'appariement

On pourrait s'attendre à ce que la différence entre un appariement retardé et un appariement *quasi* instantané soit parfaitement évidente. Un appariement retardé serait forcément caractérisé par une fonction spectrale anormale positive à basse fréquence et négative à haute fréquence, ou encore par une partie positive à basse fréquence puis nulle à haute fréquence (comme dans le cas de la théorie BCS), tandis qu'un appariement *quasi* instantané exhiberait une fonction spectrale fondamentalement différente. La figure Fig.7.6 montre cependant que ce n'est pas le cas en présentant le paramètre d'ordre cumulatif du *modèle de Hubbard attractif* demi-rempli à $U = -8$ et température nulle.

Au sein du modèle de Hubbard attractif, il n'existe absolument aucune répulsion entre fermions. Ce modèle possède une phase supraconductrice de type *s* (car les paires de Cooper se forment à partir de deux électrons sur le même site du réseau) où le mécanisme d'appariement est forcément instantané car il n'y a aucune répulsion à surmonter avec le moindre retard. On remarque alors que le paramètre d'ordre cumulatif présente un gap de symétrie *s* à basse fréquence et augmente

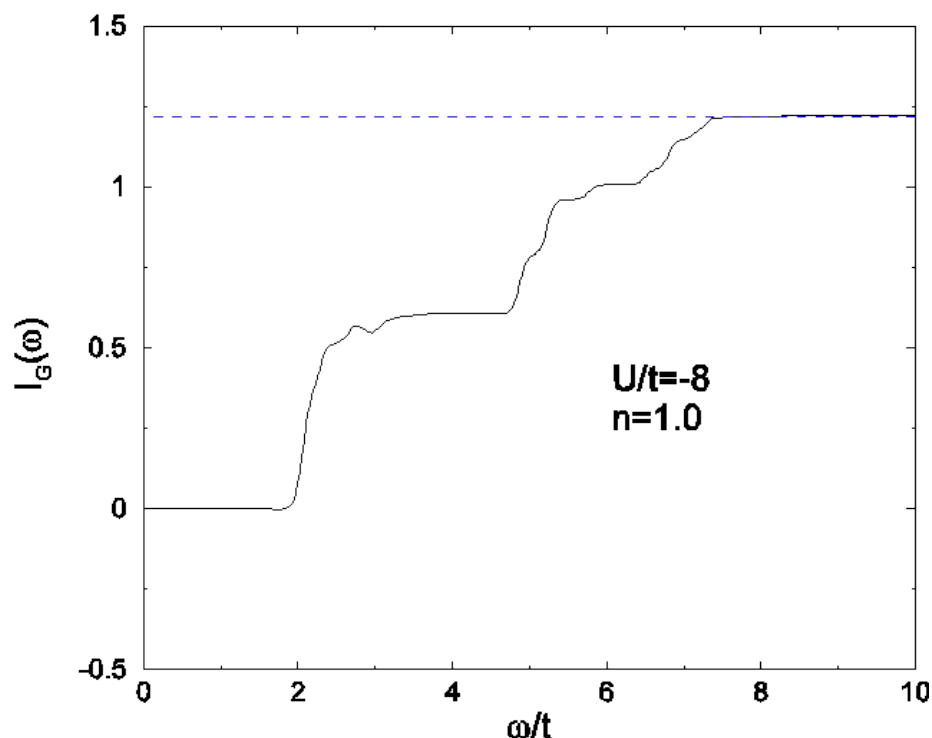


FIGURE 7.6 Paramètre d'ordre cumulatif à $\vec{k} = (0, 0)$ du modèle de Hubbard attractif demi-rempli à $U = -8$ et température nulle. La ligne tiretée indique la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur. Figure décrite dans [219].

progressivement vers sa valeur asymptotique (le paramètre d'ordre supraconducteur), atteinte pour $\omega \simeq 7t$. *A priori*, il n'y a aucune différence entre ce mécanisme d'appariement instantané et un mécanisme d'appariement retardé, si ce n'est que la plage de fréquences sur laquelle se fait l'appariement est de l'ordre de la largeur de bande ($W = 8t$ pour le réseau carré). En effet, on voit que cette plage est bien plus petite dans les figures Fig.7.2 a) et Fig.7.2 b). Ainsi, une première façon de distinguer des appariements retardé et *quasi* instantané serait de dire que le premier se forme sur une plage de fréquences petite par rapport à la largeur de bande, contrairement au deuxième.

En plus de ce critère très qualitatif, il serait bon de pouvoir évaluer quantitativement une contribution instantanée à l'appariement supraconducteur. Pour cela, il est nécessaire de remonter à la quantité prenant en compte les "interactions supraconductrices" (la dynamique supraconductrice) de la manière la plus "nue" : la

self-energy anormale Σ_{an} , décrite sommairement dans l'annexe Ann.C.2. *Grosso modo*, cette quantité remplit les termes hors-diagonaux de la matrice des inverses des fonctions de Green (comme la fonction de Green anormale qui remplit les termes hors-diagonaux de la matrice des fonctions de Green). Pour comprendre en quoi la *self-energy anormale* contient une information quantitative sur la nature de l'appariement supraconducteur, il suffit d'écrire la représentation spectrale de cette quantité :

$$\Sigma_{an}(i\omega_n) = \Sigma_{an}(+\infty) + \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\text{Im } \Sigma_{an}(\omega)}{i\omega_n - \omega}. \quad (7.60)$$

Une contribution à fréquence infinie est ici rajoutée car la *self-energy anormale* n'obéit pas à une règle de somme lui imposant de s'annuler à l'infini, contrairement aux fonctions de Green rencontrées précédemment [222,223]. On peut alors prendre la partie réelle de cette équation pour obtenir

$$\boxed{\text{Re } \Sigma_{an}(i\omega_n) = \text{Re } \Sigma_{an}(+\infty) - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega \text{Im } \Sigma_{an}(\omega)}{\omega_n^2 + \omega^2}}. \quad (7.61)$$

Maintenant, si la *self-energy anormale* renferme toute la dynamique supraconductrice, la contribution à fréquence infinie $\text{Re } \Sigma_{an}(+\infty)$ permet définitivement de trancher quant à la nature de l'appariement :

- si l'appariement se fait sur une plage de fréquences petite par rapport à la largeur de bande et $\text{Re } \Sigma_{an}(+\infty) = 0$, le mécanisme d'appariement est purement retardé ;
- si l'appariement se fait sur une plage de fréquences petite par rapport à la largeur de bande et $\text{Re } \Sigma_{an}(+\infty) > 0$ (< 0), le mécanisme d'appariement est globalement retardé mais possède une partie *quasi* instantanée favorisant (défavorisant) la supraconductivité ;
- si l'appariement se fait sur une plage de fréquences de l'ordre de la largeur de bande et $\text{Re } \Sigma_{an}(+\infty) \neq 0$, le mécanisme d'appariement est globalement *quasi* instantané.

Le signe de la contribution à fréquence infinie doit être comparé à celui du paramètre d'ordre supraconducteur, qui est positif ici. Bien sûr, cette contribution à fréquence infinie ne dépend pas de la fréquence et sera donc identique en fréquences de Matsubara ou en fréquences réelles.

La figure Fig.7.7 présente justement les parties réelles de la self-energy anormale à $\vec{k} = (0,0)$ du modèle de Hubbard attractif demi-rempli à $U = -4$ et $U = -8$, à température nulle. En plus de la dépendance en fréquence non triviale sur toute la plage de fréquences, on y constate clairement des contributions positives non négligeables à fréquence infinie. Il est à noter qu'avec un modèle de relation de dispersion quadratique sans cutoff en énergie, il est impossible d'avoir un appariement instantané. Autrement dit, une bande de largeur finie, donne naissance à un cutoff naturel correspondant à un appariement instantané (de type Hartree-Fock).

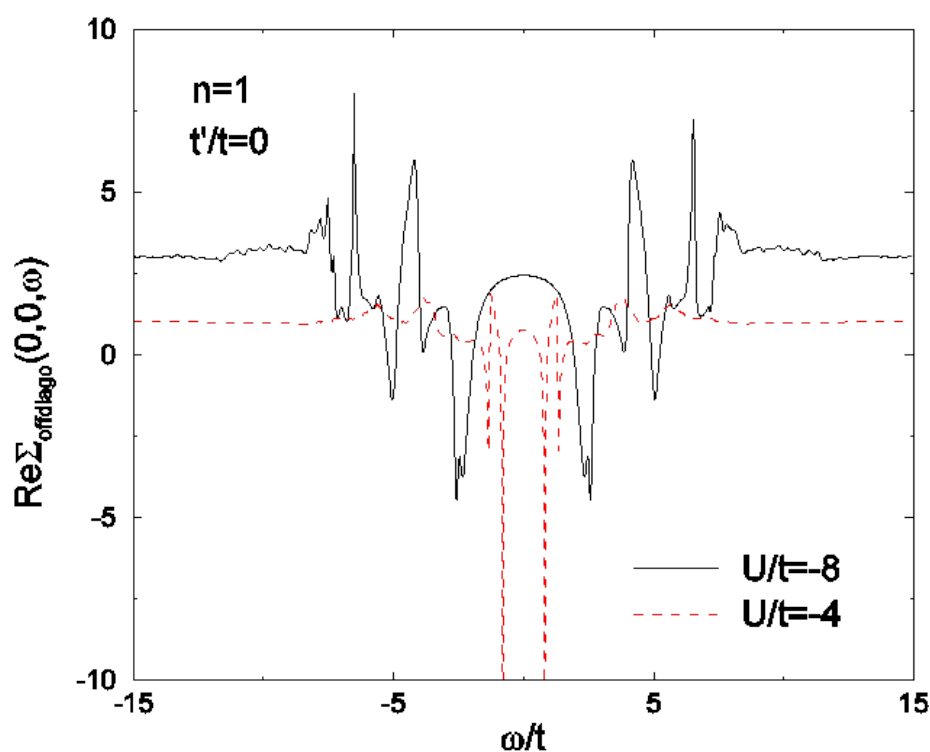


FIGURE 7.7 Parties réelles de la self-energy anormale à $\vec{k} = (0,0)$ du modèle de Hubbard attractif demi-rempli à $U = -4$ et $U = -8$, à température nulle. Figure tirée de [224].

Résumé

Alors que les fonctions spectrales associées à des fonctions de Green normales sont toujours positives, il n'en est rien pour la fonction spectrale anormale $\mathcal{A}_{an}$ associée à la physique du mécanisme d'appariement supraconducteur. En effet, les fonctions spectrales anormales étudiées dans cette thèse présentent toutes un pic positif à basse fréquence suivi d'un changement de signe et d'une petite partie négative tendant vers zéro à haute fréquence. La partie positive correspond aux énergies favorables à la formation de paires supraconductrices alors que la partie négative correspond aux énergies défavorables à la formation de paires d'électrons.

Ce changement de signe pose problème quand il s'agit d'obtenir la fonction spectrale anormale *via* la méthode d'entropie maximale car cette dernière requiert en entrée un modèle par défaut $\mathcal{D}(\omega)$ tel que $\mathcal{A}_{an}(\omega)/\mathcal{D}(\omega) > 0$. Or, il est impossible de connaître la fréquence de changement de signe de $\mathcal{A}_{an}(\omega)$ à l'avance pour s'assurer de choisir le modèle par défaut tel que $\mathcal{A}_{an}(\omega)/\mathcal{D}(\omega) > 0$. C'est ici que notre méthode MaxEntAux, généralisée pour pouvoir traiter n'importe quel cas d'intérêt, entre en action : elle définit une fonction de Green auxiliaire fictive, construite de façon à avoir un poids spectral positif et à s'exprimer en fonction de fonctions de Green normales et de la fonction de Green anormale. Il est alors très simple de faire les prolongements analytiques des fonctions de Green auxiliaire et normales avec la méthode d'entropie maximale et de les soustraire pour extraire la fonction spectrale anormale. Le test de cette méthode sur le plomb supraconducteur a démontré son efficacité à reproduire les grandes caractéristiques de la dynamique supraconductrice.

La fonction spectrale anormale ne suffit pas à déterminer parfaitement la nature de l'appariement. En effet, même si la largeur de la plage de fréquences sur laquelle elle est positive (cette largeur étant comparée à la largeur de bande) donne une vague idée de la nature de l'appariement, ce sont la valeur et le signe de la contribution à fréquence infinie de la partie réelle de self-energy anormale, $\text{Re } \Sigma_{an}(+\infty)$, qui assurent la présence ou non d'une contribution *quasi* instantanée favorable ou défavorable au mécanisme d'appariement.

Chapitre 8

Répulsion aux premiers voisins et supraconductivité à $T = 0$

8.1 Une physique plus réaliste

8.1.1 Modèle de Hubbard étendu

Nous avons vu précédemment le modèle de Hubbard Eq.(2.131) où les électrons se meuvent *via* une amplitude de saut aux premiers voisins t et interagissent *via* l'interaction coulombienne purement locale U . On pourrait cependant remettre en cause la pertinence physique d'un tel modèle. En effet, les électrons devraient pouvoir sauter sur des sites deuxièmes ou troisièmes voisins par exemple. Bien plus flagrant encore, les électrons ne devraient pas interagir entre eux uniquement lorsqu'ils sont sur le même site. Il est vrai que l'interaction coulombienne voit sa portée réduite dans un cristal à cause de l'effet des électrons environnant, on parle d'*écranage*. Cependant, cet écranage n'est jamais tel que l'interaction coulombienne devient purement locale. Il est donc important de rajouter une portée à l'interaction coulombienne.

Introduisons dès lors le *modèle de Hubbard étendu*

$$\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu} = \sum_{\langle i,j \rangle_{1,2,3}, \sigma} \left(t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + c.h \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i. \quad (8.1)$$

En plus de l'amplitude de saut aux premiers voisins $t_{\langle i,j \rangle_1} = -t$ du modèle de Hubbard standard, on a ajouté des termes de saut aux deuxièmes voisins $t_{\langle i,j \rangle_2} = -t'$ et aux troisièmes voisins $t_{\langle i,j \rangle_3} = -t''$. Déterminés à l'aide de calculs de structure de bande électronique, ces termes de saut permettent de travailler sur un matériau donné. Ensuite, un nouveau terme d'interaction $V > 0$ apparaît ici : il représente la *répulsion coulombienne aux premiers voisins*. Deux électrons peuvent désormais interagir entre eux lorsqu'ils sont sur des sites adjacents ! On peut noter que le demi-remplissage est désormais obtenu en considérant $\mu = U/2 + 4V$ lorsque seule l'amplitude de saut aux premiers voisins t est prise en compte.

8.1.2 Modèle t - J étendu

Le modèle t - J Eq.(2.132) contient la physique de très forte interaction du modèle de Hubbard standard *via* la constante d'échange antiferromagnétique $J = 4t^2/U$, obtenue en utilisant la théorie des perturbations dégénérée au second ordre. Or, comme dans toute théorie des perturbations, le dénominateur de J correspond à une différence en énergie entre 2 états du système. Ici, la différence en énergie est celle séparant un état initial d'un état où un des électrons de l'état initial est venu occuper doublement un site premier voisin.

Deux cas de figure à demi-remplissage sont présentés à la figure Fig.8.1. On voit que dans le cas où seule l'interaction U est présente, la différence en énergie entre les deux états est U , ce qui va donner $J = 4t^2/U$. Par contre, lorsque l'interaction aux premiers voisins V est ajoutée, le coup en énergie est diminué d'une énergie V parce que l'électron qui saute libère un site derrière lui et se libère ainsi de l'interaction avec un de ses premiers voisins. La nouvelle constante d'échange antiferromagnétique à *demi-remplissage* est donc

$$J = \frac{4t^2}{U - V}. \quad (8.2)$$

V permet ainsi de renforcer les corrélations antiferromagnétiques à travers la constante d'échange antiferromagnétique J .

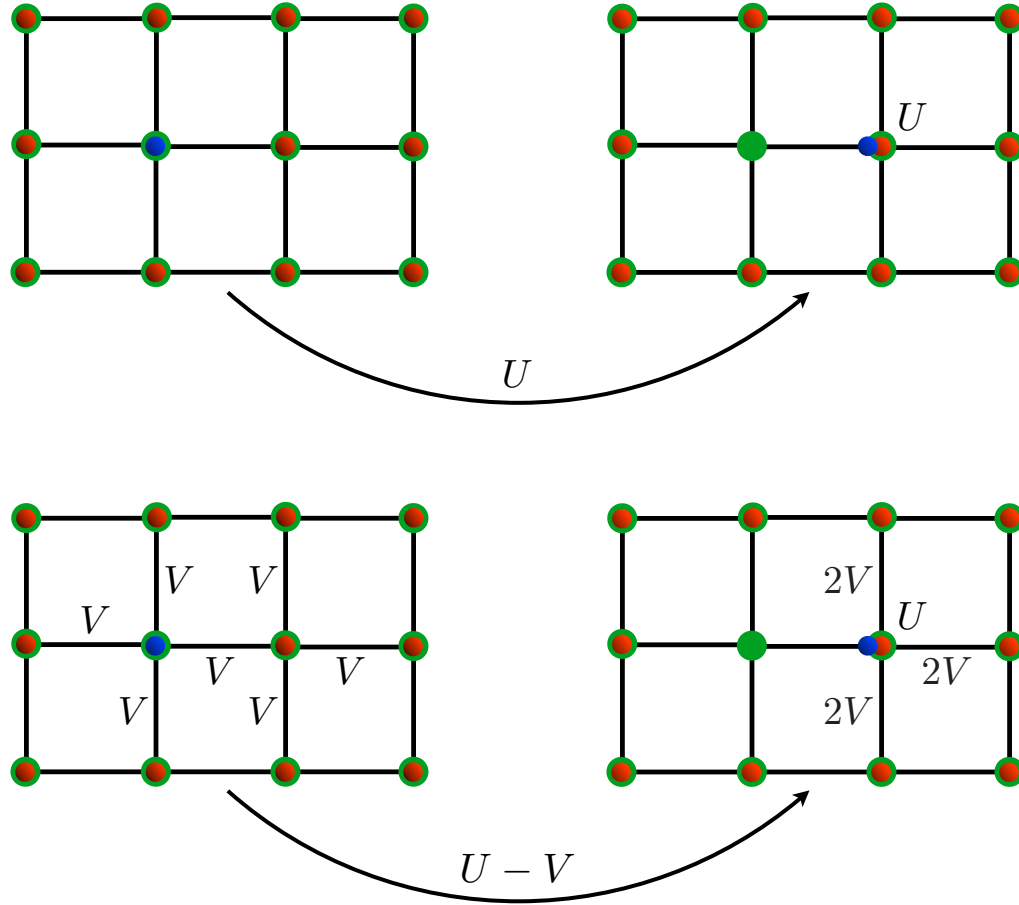


FIGURE 8.1 Coût en énergie d'un saut électronique menant à la double occupation d'un site premier voisin à demi-remplissage. **Haut** : Cas où seule l'interaction coulombienne purement locale U est présente. **Bas** : Cas où l'interaction coulombienne aux premiers voisins V est ajoutée.

Les résultats qui vont être présentés dans le reste de ce chapitre sont issus de travaux récents [225] réalisés à température nulle dans le cadre de la CDMFT 2×2 résolue par diagonalisation exacte, en seule présence de la supraconductivité. Les amplitudes de saut ont été fixées de façon à traiter le célèbre $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [226] :

$$t = 1 \quad t' = -0.3 \quad t'' = 0.2. \quad (8.3)$$

8.2 Approximation de Hartree pour la répulsion aux premiers voisins

Lorsque l'on travaille dans le cadre d'une théorie de champ moyen dynamique, l'ajout de V ne se fait pas automatiquement. En effet, l'interaction coulombienne aux premiers voisins couple des sites de l'amas entre eux mais couple également des sites de l'amas avec des sites en dehors de l'amas. Tout en traitant exactement les interactions intra-amas, il faudrait donc trouver une façon de couper les interactions inter-amas et de les remplacer par un champ moyen pour être en mesure de résoudre le problème d'impureté quantique. Nous allons étudier ici le cas de la CDMFT 2×2 , illustré à la figure Fig.8.2.

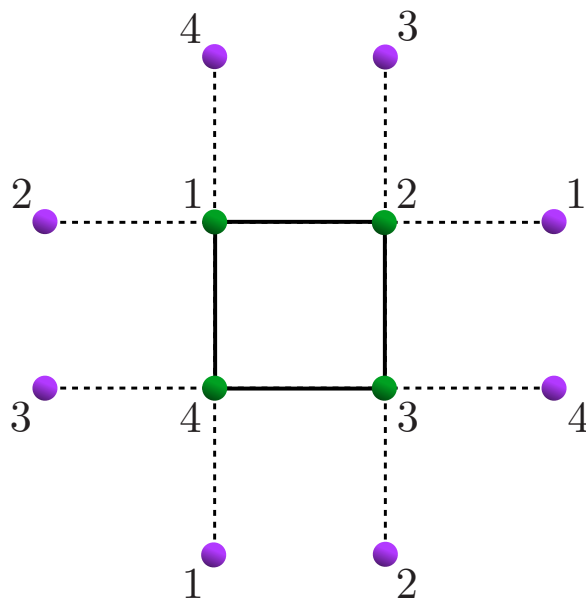


FIGURE 8.2 Numérotation des sites d'un amas 2×2 (en vert) et des sites premiers voisins de cet amas (en violet) pour le calcul du traitement Hartree de l'interaction coulombienne aux premiers voisins. La numérotation des sites hors amas se fait en utilisant des conditions aux bords périodiques pour l'amas. Lignes pleines : liens d'interaction traités exactement. Lignes tiretées : liens d'interaction traités dans l'approximation de Hartree.

On peut tout d'abord séparer le terme d'interaction aux premiers voisins du hamiltonien de Hubbard étendu Eq.(8.1) en une partie intra-amas $\hat{\mathcal{H}}_{intra}$ et une

partie inter-amas $\hat{\mathcal{H}}_{inter}$ puis appliquer une approximation de Hartree sur le terme inter-amas :

$$V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j = V \sum_{\langle i,j \rangle_{intra}} \hat{n}_i \hat{n}_j + V \sum_{\langle i,j \rangle_{inter}} [\langle \hat{n}_j \rangle \hat{n}_i + \langle \hat{n}_i \rangle \hat{n}_j - \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle] . \quad (8.4)$$

Cette approximation revient à négliger la variation de l'opérateur nombre autour de sa valeur moyenne. Écrivons maintenant la matrice des interactions aux premiers voisins inter-amas V_{inter} dans la base des sites de l'amas :

$$V_{inter} = \begin{pmatrix} 0 & V & 0 & V \\ V & 0 & V & 0 \\ 0 & V & 0 & V \\ V & 0 & V & 0 \end{pmatrix} . \quad (8.5)$$

Cette matrice étant réelle symétrique, on peut écrire le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{inter}$ sous la forme

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}}_{inter} = \sum_{i,j} V_{ij}^{inter} \left[\langle \hat{n}_j \rangle \hat{n}_i - \frac{1}{2} \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle \right]} . \quad (8.6)$$

Ici, on ne somme plus sur des paires de sites mais sur tous les sites (d'où un facteur 1/2 pour éviter le double comptage des interactions) et on a introduit

$$V_{ij}^{inter} = \begin{cases} V & \text{si } i, j \in \langle i, j \rangle_{inter} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} . \quad (8.7)$$

Par ailleurs, la matrice V_{inter} possède les 4 valeurs propres

$$\lambda_1 = -2V \quad \lambda_2 = 2V \quad \lambda_3 = 0 \quad \lambda_4 = 0 \quad (8.8)$$

associées aux 4 vecteurs propres

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} . \quad (8.9)$$

On peut alors directement définir des opérateurs propres

$$\hat{O}_a = \sum_{k=1}^4 v_{ak} \hat{n}_k \quad (8.10)$$

et écrire

$$\hat{\mathcal{H}}_{inter} = \sum_{a=1}^2 \lambda_a \left[\langle \hat{O}_a \rangle \hat{O}_a - \frac{1}{2} \langle \hat{O}_a \rangle^2 \right] \quad (8.11)$$

avec

$$\hat{O}_1 = \frac{1}{2} (-\hat{n}_1 + \hat{n}_2 - \hat{n}_3 + \hat{n}_4), \quad (8.12)$$

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} (\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_3 + \hat{n}_4). \quad (8.13)$$

On remarque que l'effet moyen de V peut être double. En effet, l'opérateur propre $\hat{O}_2$ agit uniformément sur tous les sites sous la forme globale d'un potentiel chimique effectif tandis que l'opérateur propre $\hat{O}_1$ différencie les sites de façon à éventuellement générer un ordre de charge commensurable sur l'amas. En pratique, la moyenne $\langle \hat{O}_2 \rangle$ est toujours calculée par le programme, même lorsque V est explicitement mis à zéro. Par ailleurs, l'ordre de charge sur l'amas n'est pas encore permis en présence de supraconductivité de type $d_{x^2-y^2}$ car les deux ordres ne partagent pas les mêmes symétries. On a alors toujours $\langle \hat{O}_1 \rangle = 0$ et

$$\hat{\mathcal{H}}_{inter} = 2Vn \left[\sum_i \hat{n}_i - 2n \right]. \quad (8.14)$$

La moyenne de cet hamiltonien donne

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_{inter} \rangle = 4Vn^2. \quad (8.15)$$

Ceci est normal en regardant la figure Fig.8.2 : nous avons 8 liens apportant chacun une énergie Vn^2 , mais les conditions aux bords périodiques et la prise en compte du problème de double comptage de l'interaction rendent équivalents les liens inter-amas joignant la même paire de sites. Il ne reste ainsi que la moitié des 8 liens de départ, ce qui impose alors une énergie totale de $8Vn^2/2$, soit $4Vn^2$.

8.3 Dynamique supraconductrice à température nulle

8.3.1 Comparaison entre J et la dynamique de la partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique

Vérifions que la constante d'échange antiferromagnétique Eq.(8.2) est valable. La figure Fig.8.3 présente une comparaison à demi-remplissage ($t' = t'' = 0$, $\mu = U/2$) entre la constante d'échange $J = 4t^2/(U - V)$ et la fréquence ω_χ où se produit le pic dominant dans la partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique. On s'attend à ce que $\omega_\chi \sim J$ parce que J est la seule échelle d'énergie magnétique pertinente du problème. On voit que l'accord entre ces deux quantités s'améliore à mesure que l'on entre dans le régime de forte interaction. La raison est simple : le modèle t - J devient pertinent dans le régime de forte interaction, ce qui donne à J son rôle d'échelle d'énergie magnétique dominante.

8.3.2 Effets de V sur le paramètre d'ordre supraconducteur

La figure Fig.8.4 présente les effets de V sur le paramètre d'ordre supraconducteur de symétrie d en fonction du dopage en trous pour différentes valeurs de l'interaction U . Nous nous intéressons à différentes valeurs d'interaction locale U afin d'être en mesure d'observer si une supraconductivité naissant dans un système à faible interaction se comporte comme une supraconductivité naissant dans un système à forte interaction. La valeur séparant ces deux domaines d'interaction est la valeur critique de l'interaction U où la transition de Mott se produit à demi-remplissage en CDMFT 2×2 , soit $U_c \simeq 6t$ [39, 74, 93]. On voit alors que la figure Fig.8.4 a) se situe à faible interaction ($U < U_c$) tandis que les figures Fig.8.4 b) et Fig.8.4 c) se situent à forte interaction ($U > U_c$).

À faible interaction $U = 4 < U_c$, la supraconductivité existe à demi-remplissage car l'interaction U n'est pas assez forte pour y donner naissance à un isolant de Mott. On s'aperçoit aussi que la supraconductivité est vite détruite par V et disparaît pour une valeur de V de l'ordre de 2. Ceci est attendu au sein d'une approche perturbative

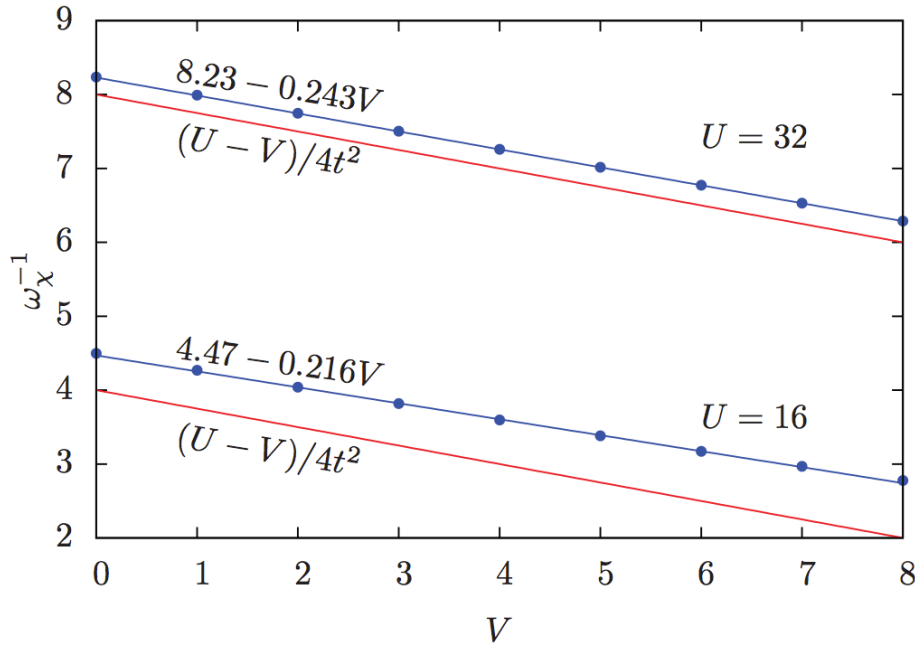


FIGURE 8.3 Comparaison à demi-remplissage ($t' = t'' = 0, \mu = U/2$) entre l'inverse de la fréquence ω_χ où se produit le pic dominant dans la partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique et l'inverse de la constante d'échange $J = 4t^2/(U - V)$. La correspondance entre les deux quantités devient meilleure dans le régime de forte interaction car le modèle t - J y devient pertinent. Figure tirée de [225].

en U/W (soit, à faible interaction) [227, 228] : la supraconductivité y disparaît pour $V > U^2/W = 2$ ici (car $W = 8t \equiv 8$ pour un réseau carré).

À interaction intermédiaire $U = 8 > U_c$, la supraconductivité n'existe plus à demi-remplissage car l'isolant de Mott y a pris place. Quelque chose de remarquable apparaît aussi : la supraconductivité, très vite détruite auparavant par V , résiste désormais très bien à V dans le régime sous-dopé ! Cela se comprend grâce à la figure Fig.8.5 a) : on y voit que la partie imaginaire de la susceptibilité de spin locale ne présente un véritable pic à basse fréquence qu'à faible dopage. Le mécanisme d'appariement par échange de fluctuations de spin semblable à celui décrit dans la sous-section Sous-sec.6.6.3 y est donc favorisé. La figure Fig.8.5 b) montre que la fréquence où se produit le pic dominant dans la partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique augmente avec V , ce à quoi on s'attend si $J \simeq 4t^2/(U - V)$ (nous ne sommes plus à demi-remplissage ici). Des travaux parallèles ont également

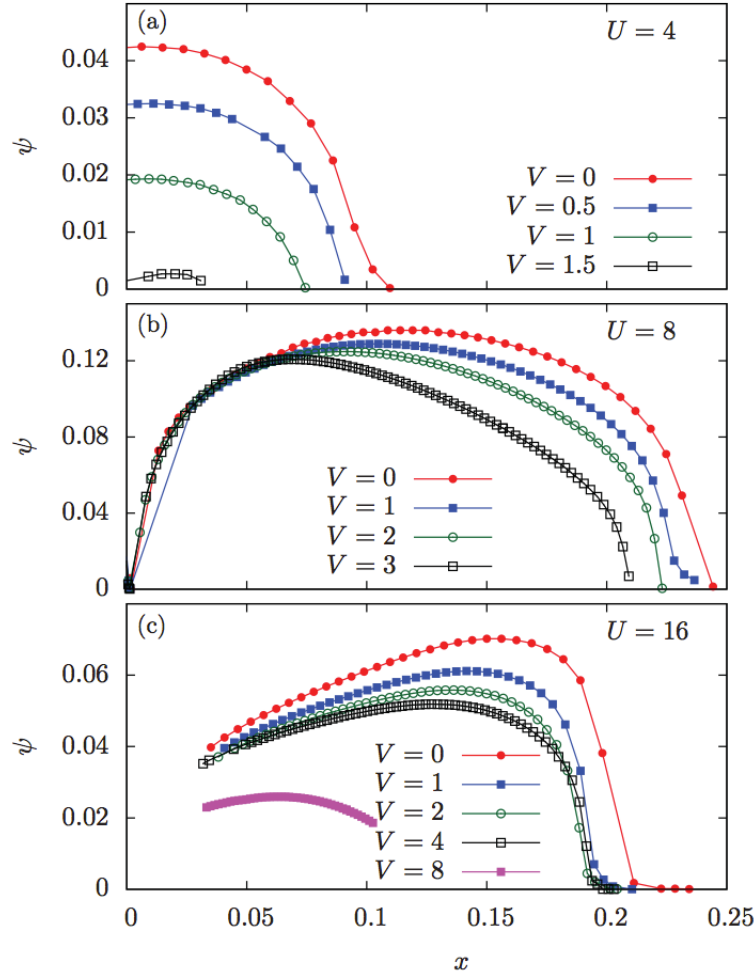


FIGURE 8.4 Effets de V sur le paramètre d'ordre supraconducteur ψ en fonction du dopage en trous x en CDMFT 2×2 pour 3 valeurs de U : **a)** $U = 4 < U_c$, **b)** $U = 8 > U_c$ et **c)** $U = 16 > U_c$. Figure tirée de [225].

montré une forte corrélation à basse énergie entre la position des pics dans la partie imaginaire de la self-energy anormale (dynamique supraconductrice) et la position des pics dans la partie imaginaire de la susceptibilité de spin locale (dynamique de spin) [219]. Nous verrons d'ici peu pourquoi le paramètre d'ordre supraconducteur n'augmente pas forcément, même si J augmente lorsque V augmente. Dans le régime sur-dopé, la supraconductivité est davantage affectée, ce qui est normal car la physique y est plus métallique et plus semblable au cas $U < U_c$, donc mieux traitée par une approche de champ moyen comme la théorie BCS ou la théorie d'Eliashberg (où une augmentation de la force de l'interaction coulombienne est

toujours défavorable à la supraconductivité à cause du pseudo-potentiel à haute fréquence).

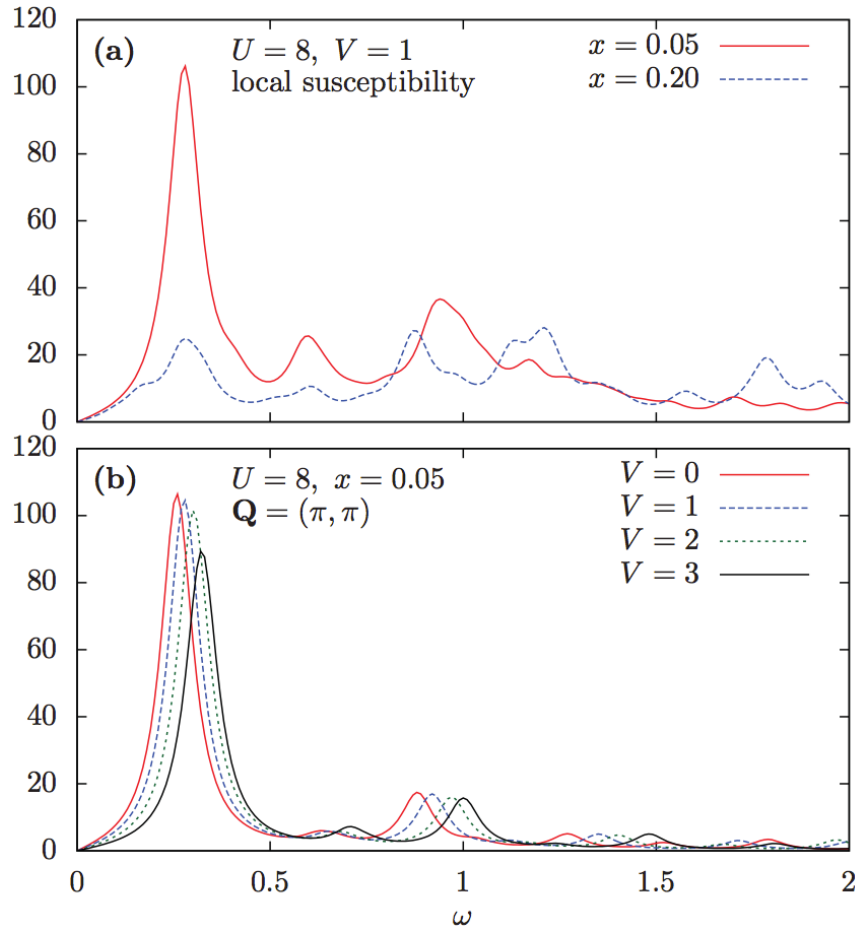


FIGURE 8.5 **a)** Partie imaginaire de la susceptibilité de spin locale à $U = 8$ et $V = 1$ en fonction de la fréquence dans les régimes sous-dopé ($x = 0.05$) et sur-dopé ($x = 0.20$). **b)** Partie imaginaire de la susceptibilité de spin antiferromagnétique à $U = 8$ et $x = 0.05$ en fonction de la fréquence pour différentes valeurs de V . Figure tirée de [225].

À forte interaction $U = 16 > U_c$, le constat est sensiblement identique au cas à $U = 8$. Par contre, on peut remarquer que l'argument donné précédemment pour l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques fonctionne également pour le mécanisme d'appariement *quasi* instantané utilisant le super-échange à haute fréquence de la sous-section Sous-sec.6.6.2, à très forte interaction. Cependant, si on rajoute V dans le problème, on peut s'intéresser au terme calculé à l'équation

Eq.(6.58) :

$$\begin{aligned}
& J \left(\hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) + V \hat{n}_i \hat{n}_j \\
&= -\frac{J}{2} (\hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{j\uparrow}) + V (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) (\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}) \\
&= V (\hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{j\downarrow}) + \left(V - \frac{J}{2} \right) (\hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{j\uparrow}). \quad (8.16)
\end{aligned}$$

On voit bien que l'appariement provenant de J va disparaître dès que $V > J/2$. Or, la figure Fig.8.4 c) nous montre que même à un fort dopage en trous, où la physique est mieux décrite par une approche champ moyen, ce critère ne suffit pas à détruire la supraconductivité, y compris pour $V = 8$ et $J = 4 \times 1^2 / (16 - 8) = 1/2$. Ce mécanisme d'appariement semble donc peu approprié ici.

Résumons avant de poursuivre. Deux types de supraconductivité se distinguent très clairement :

- une *supraconductivité à faible interaction* ($U < U_c$) qui s'éteint très vite lorsque V augmente ;
- une *supraconductivité à forte interaction* ($U > U_c$) qui résiste très bien à une augmentation de V , particulièrement dans le régime sous-dopé.

On peut s'en convaincre en comparant la force de la supraconductivité entre les figures Fig.8.4 a) pour $U = 4$ et $V = 1.5$ et Fig.8.4 b) pour $U = 8$ et $V = 3$: le rapport V/U est le même mais la supraconductivité ne survit quasiment pas à basse interaction.

8.3.3 Effets de V sur le paramètre d'ordre cumulatif

La figure Fig.8.6 présente le paramètre d'ordre cumulatif à température nulle $I_F(\omega)$ de l'équation Eq.(7.11)

$$I_F(\omega) = I_F(\vec{k} = (\pi, 0), \omega) = \int_0^\omega A_{an}(\vec{k} = (\pi, 0), \omega') d\omega' \quad (8.17)$$

pour différentes valeurs de U, V et du dopage en trous x . On peut tout d'abord noter l'accord entre les figures Fig.8.4 et Fig.8.6 au niveau de la valeur asymptotique du

paramètre d'ordre cumulatif, égale au paramètre d'ordre supraconducteur d'après l'équation Eq.(7.12). On s'aperçoit ensuite que les paramètres d'ordre cumulatifs de la figure Fig.8.6 ont une allure similaire à ceux de la figure Fig.7.2 : $I_F(\omega)$ forme un pic à basse fréquence et décroît à haute fréquence pour saturer à la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur. Cela pourrait signaler la présence d'un *mécanisme d'appariement retardé* à basse fréquence provenant d'un échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques.

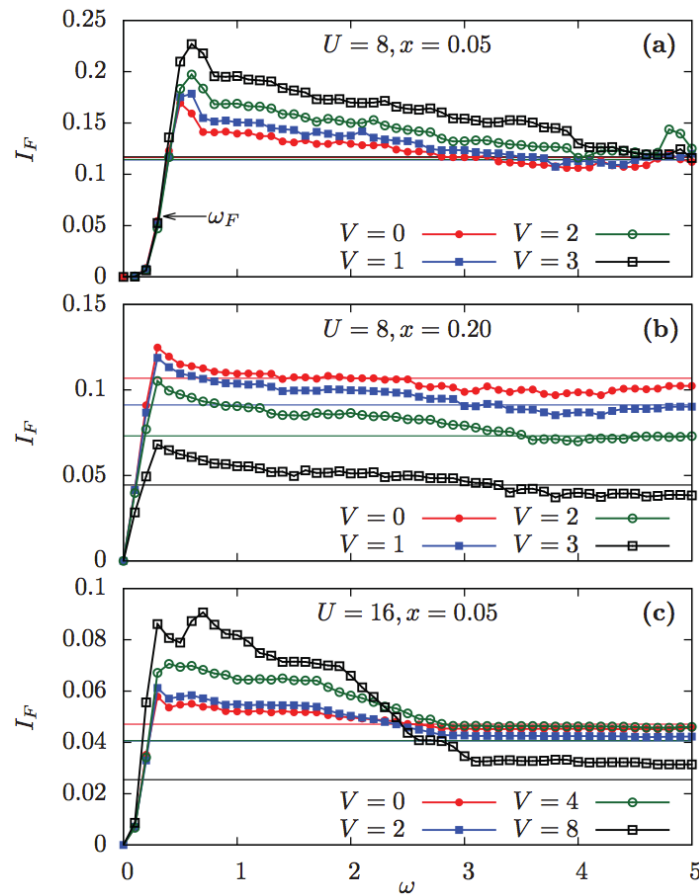


FIGURE 8.6 Paramètre d'ordre cumulatif $I_F(\omega)$ pour différentes valeurs de V à **a)** $U = 8, x = 0.05$, **b)** $U = 8, x = 0.20$ et **c)** $U = 16, x = 0.05$. La valeur asymptotique du paramètre d'ordre cumulatif, $I_F(+\infty)$, égale au paramètre d'ordre supraconducteur, est indiquée par des lignes horizontales. La fréquence caractéristique d'appariement ω_F est définie comme étant la fréquence à laquelle $I_F(\omega)$ est égal à la moitié de sa valeur asymptotique. Figure tirée de [225].

On peut même estimer le retard de l'appariement en calculant la fréquence typique d'appariement ω_F , définie comme étant la fréquence à laquelle $I_F(\omega)$ est égal à la moitié de sa valeur asymptotique. On sait que l'amplitude de saut $t \equiv 1$ est notre unité d'énergie dans le problème. On lit en gros $\hbar\omega_F \simeq 0.1 t$ pour $U = 16$, $V = 8$ et $x = 0.05$ sur la figure Fig.8.6. Prenons une amplitude de saut typique dans $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$: $t \simeq 0.35$ eV. On obtient ainsi $\omega_F \simeq 0.1 t/\hbar \simeq 0.05 \times 10^{15}$ Hz, d'où un retard dans l'interaction

$$t_F = \frac{2\pi}{\omega_F} \simeq 2 \times 10^{-14} \text{ s}. \quad (8.18)$$

Cela semble-t-il raisonnable ? Calculons le temps t_{at} pris par un électron pour passer d'un atome à un autre. En prenant une vitesse de Fermi typique $v_F = 10^5 \text{ m.s}^{-1}$ et une distance interatomique typique $a = 3 \text{ \AA}$ dans $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ [229], on a alors

$$t_{at} = \frac{a}{v_F} = 3 \times 10^{-15} \text{ s}. \quad (8.19)$$

Finalement :

$$\frac{t_F}{t_{at}} \simeq 6.7. \quad (8.20)$$

Un électron a ainsi le temps de parcourir en gros 6.7 distances interatomiques, soient environ $20 \text{ \AA}$ avant d'affecter un autre électron *via* un échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques pour créer une paire de Cooper avec lui. On s'attend donc à obtenir une paire de Cooper d'une taille moyenne d'environ $20 \text{ \AA}$, ce qui semble être un ordre de grandeur correct sachant qu'on mesure entre $10 \text{ \AA}$ et $40 \text{ \AA}$ à température *quasi* nulle et à faible dopage en trous dans $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ [230].

Les effets de V sur le paramètre d'ordre cumulatif apparaissent très clairement à forte interaction sur la figure Fig.8.6 c) : V crée davantage d'appariement à basse fréquence mais affaiblit la supraconductivité à haute fréquence. V a donc des effets antagonistes sur la supraconductivité. Comment expliquer cela ? Une comparaison simple avec la théorie d'Eliashberg est possible. À basse fréquence, V favorise la colle d'appariement qu'est l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques *via* $J \simeq 4t^2/(U - V)$, tout comme la contribution des phonons à basse fréquence dans la théorie d'Eliashberg. À haute fréquence, l'augmentation de la répulsion coulombienne par V est défavorable à la supraconductivité, tout comme l'effet du pseudo-potential à haute fréquence dans la théorie d'Eliashberg.

8.4 Une répulsion *quasi* instantanée plus quantitative pour la brisure de paires ★

Les travaux réalisés durant cette thèse ont permis de renforcer et d’approfondir l’interprétation physique des données présentées précédemment. Pour ce faire, il suffit de suivre la section Sec.7.6 et d’étudier la partie réelle de la self-energy anormale. Cette dernière est présentée en $\vec{k} = (\pi, 0)$ à $U = 8$ ($t = 1$, $t' = -0.3$, et $t'' = 0.2$), 4% de dopage aux trous, et à $T = 0$ dans la figure Fig.8.7 pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$. On aperçoit très bien une *contribution négative à fréquence infinie* apparaître en présence de V et croître (en valeur absolue) à mesure que V augmente.

Nous avons vu que l’appariement dans la fonction spectrale anormale se faisait sur une plage de fréquences très petite par rapport à la largeur de bande $W = 8t \equiv 8$, indiquant alors l’existence d’un mécanisme d’appariement retardé. La contribution négative $\text{Re } \Sigma_{an}^{T=0}(+\infty)$ traduit alors quantitativement le fait que V induit une répulsion *quasi* instantanée défavorable à la supraconductivité, comme remarqué précédemment.

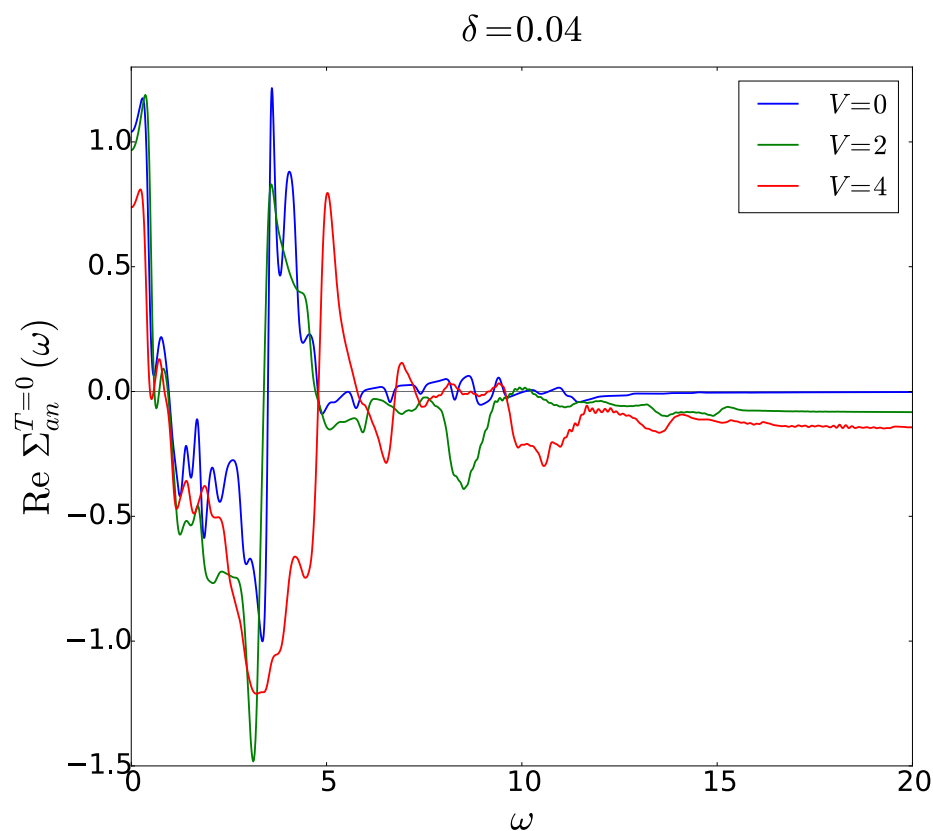


FIGURE 8.7 Partie réelle de la self-energy anormale en $\vec{k} = (\pi, 0)$ à $U = 8$ ($t = 1$, $t' = -0.3$, et $t'' = 0.2$), 4% de dopage aux trous, et à $T = 0$ pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$. Une contribution à fréquence infinie apparait en présence de V et croît à mesure que V augmente, signalant l'existence d'une composante *quasi* instantanée au mécanisme d'appariement en présence de V . La partie réelle de la self-energy anormale étant paire en fréquence, on ne présente que $\omega \geq 0$. Cette figure, issue de simulations faites par Simon Verret et David Sénéchal, vient prolonger les résultats de [225].

Résumé

La répulsion coulombienne aux premiers voisins a le mérite de rendre la physique du modèle de Hubbard bien plus réaliste. Elle limite en effet la sévérité de l'écrantage supposé dans le modèle de Hubbard. Par ailleurs, elle intervient dans la constante d'échange antiferromagnétique du modèle t - J sous la forme $J = 4t^2/(U - V)$ et permet ainsi de renforcer les corrélations antiferromagnétiques. Il faut cependant noter que l'ajout de la répulsion aux premiers voisins ne se fait pas automatiquement dans le cadre des théories de champ moyen : il est nécessaire de couper les interactions couplant des sites de l'amas avec des sites en dehors de l'amas pour les remplacer par des champs moyens dans l'approximation de Hartree.

Quant à l'effet de cette répulsion sur la supraconductivité à température nulle, on peut distinguer deux régimes d'interaction et de dopage aux trous. Si $U < U_c$ (où U_c est l'interaction critique où se produit la transition de Mott à demi-remplissage), la supraconductivité est très rapidement détruite par V , ce qui est en accord avec ce qu'on pourrait attendre d'un calcul champ moyen à faible interaction. Si $U > U_c$, on a un régime de faible dopage où la supraconductivité est très résistante à V , et un régime de fort dopage où la supraconductivité est rapidement détruite par V . L'explication derrière cela est qu'à forte interaction U , le couplage antiferromagnétique J peut intervenir à basse fréquence dans l'appariement pour contrer l'effet briseur de paires de V à haute fréquence (analogue au pseudo-potentiel de la théorie d'Elia-shberg). Cependant, cette physique antiferromagnétique perd de son importance lorsque le dopage croît, ce qui laisse uniquement l'effet négatif de V en jeu.

L'étude de la partie réelle de la self-energy anormale est cependant venue renforcer et approfondir l'interprétation physique globale quant à l'apport de V à l'appariement supraconducteur. Une contribution négative à fréquence infinie y apparaît en effet en présence de V , quantifiant l'effet briseur de paires de V à haute fréquence mentionné précédemment. La plage de fréquence sur laquelle se fait l'appariement dans la fonction spectrale anormale, petite devant la largeur de bande $W = 8t \equiv 8$, indique néanmoins un appariement majoritairement retardé.

Chapitre 9

Dynamique supraconductrice à température finie dans les cuprates ★

Les travaux présentés dans ce chapitre font l'objet
de deux articles en préparation [231,232].

Les simulations qui seront présentées à partir d'ici sont issues de la CDMFT 2×2 avec le solveur d'impureté CT-HYB. Elles se placent dans le régime d'interaction intermédiaire $U/t = 9$, en prenant le saut aux premiers voisins $t = 1$ comme unité d'énergie, et en supprimant toute frustration magnétique ($t' = 0$) pour limiter la gravité du problème de signe. La répulsion aux premiers voisins V a *grosso modo* été fixée aux valeurs $V = 0$, $U/4$, et $U/2$. Plus spécifiquement, nous avons choisi $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$.

La seule supraconductivité étudiée est la supraconductivité de type d en fonction de la température et du dopage aux trous. En utilisant la valeur de l'interaction coulombienne aux premiers voisins avec une constante diélectrique de l'ordre de 10, on obtient $V \simeq 400$ meV pour un matériau comme $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [225], tandis que la constante $J \simeq 130$ meV est évaluée à l'aide d'expériences de diffusion de neutrons mesurant la relation de dispersion des ondes de spin [233]. Pour une interaction U dépassant 1 eV, la répulsion $V = 2 \simeq U/4$ semble donc donner le cas le plus réaliste. Par ailleurs, un guide pour le lancement des simulations est consultable dans l'annexe Ann.G.

9.1 Dynamique supraconductrice

9.1.1 Température critique

La figure Fig.9.1 présente les dômes supraconducteurs de notre système d'électrons corrélés pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$. On y voit clairement que V tend à augmenter la température critique à faible dopage aux trous et à la diminuer à fort dopage aux trous.

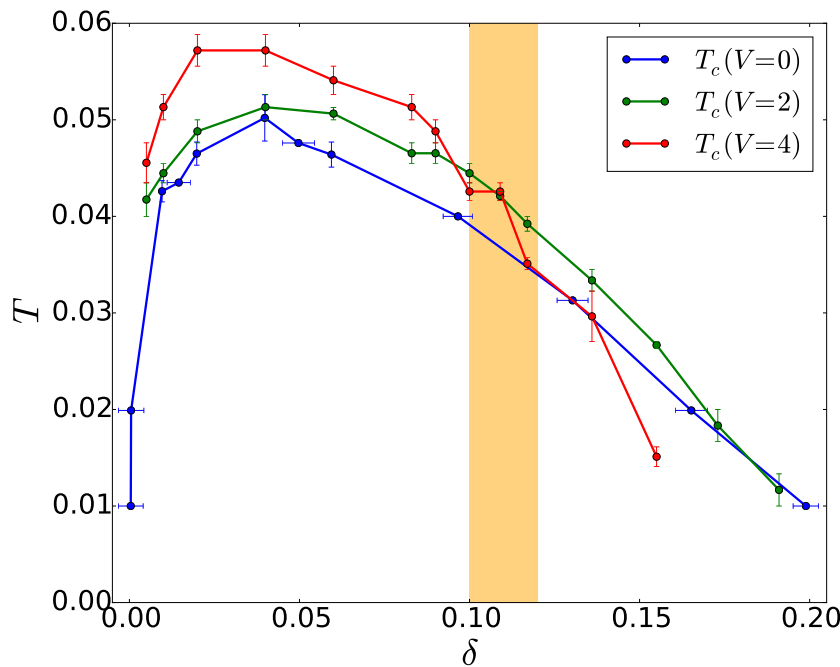


FIGURE 9.1 Effets de V sur la température critique supraconductrice. L'aire orangée signale une zone où les simulations ont particulièrement eu du mal à converger.

Une interprétation assez simpliste de cela revient à dire que V accroît la constante d'échange antiferromagnétique $J = 4t^2/(U - V)$ qui joue un rôle dans l'appariement, mais que J perd de la pertinence à mesure que le dopage aux trous augmente (il en va de même généralement pour la physique de l'antiferromagnétisme). Nous verrons bientôt que la dynamique permet d'avoir une idée bien plus précise de ce

qui se passe ici. En autres choses, l'appariement se fera sur une très courte plage de fréquences (d'une longueur proche de $W/16 = 0.5t \simeq J$ au plus), ce qui assure une partie retardée au mécanisme d'appariement.

La zone orangée de la figure Fig.9.1 est aussi des plus intéressantes car elle marque la présence de problèmes de convergence dans les simulations, particulièrement à $V = 4$. Ce genre de problèmes ont souvent lieu à l'approche de transition de phase, à cause du *ralentissement critique* les caractérisant. La figure Fig.9.2 montre justement qu'une transition du premier ordre semble se produire en température à $V = 4$ pour 10 et 12% de dopage aux trous. La cause de tels problèmes pourrait venir du fait que le système tendrait vers un ordre de charge. Cette possibilité sera davantage explorée dans la section Sec.9.2.

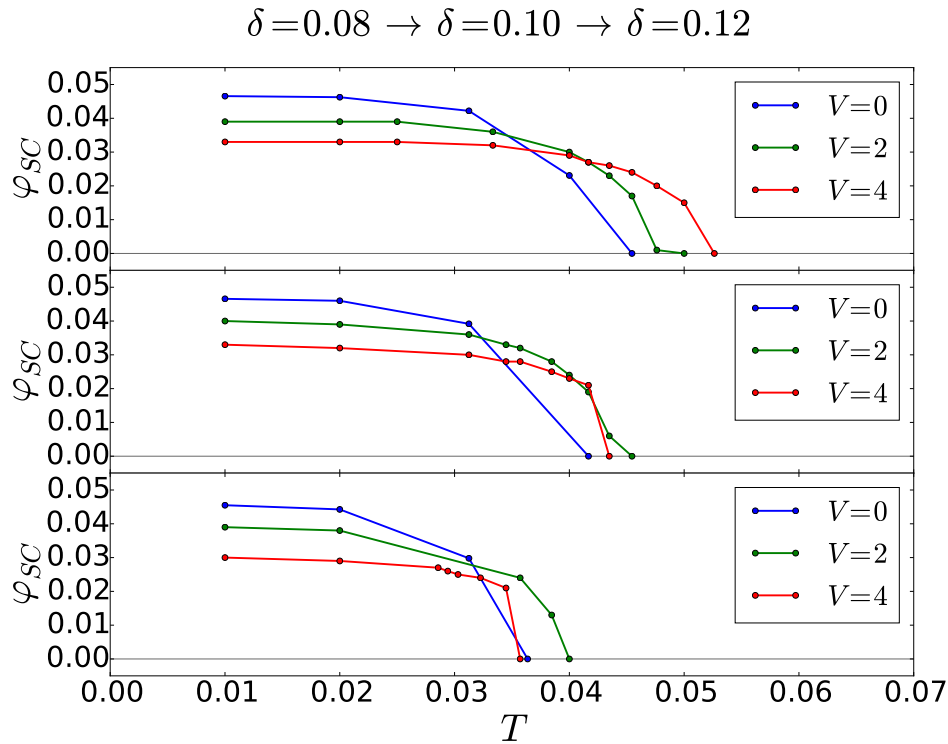


FIGURE 9.2 Paramètre d'ordre supraconducteur à différentes valeurs de V en fonction de la température pour les dopages aux trous $\delta = 0.08$, $\delta = 0.10$, et $\delta = 0.12$ (de haut en bas, respectivement). Le paramètre d'ordre à $V = 4$ semble marquer un saut en température pour 10 et 12% de dopage, annonçant la présence éventuelle d'une transition du premier ordre. Les barres d'erreur sont plus petites que la taille des points.

9.1.2 Paramètre d'ordre supraconducteur

La figure Fig.9.3 présente une comparaison des paramètres d'ordre supraconducteurs φ_{SC} à $U = 9$ et 4% de dopage aux trous tirés de la diagonalisation exacte à $T = 0$ ($\varphi_{SC}^{T=0}$) et des simulations Monte Carlo quantique en temps continu à $T = 0.01$ ($\varphi_{SC}^{T=0.01} \equiv \varphi_{SC}^{T=0.01}(\vec{k} = (\pi, 0))$ défini à l'équation Eq.7.19). On remarque que le paramètre d'ordre supraconducteur est directement affaibli par V à faible dopage, contrairement à la figure Fig.8.4 pour $U = 8$ avec frustration magnétique. On en conclut donc que la frustration magnétique, liée à t' et t'' , modifie l'influence de V sur la supraconductivité. Une explication plus complète de ce point semble difficile pour l'instant.

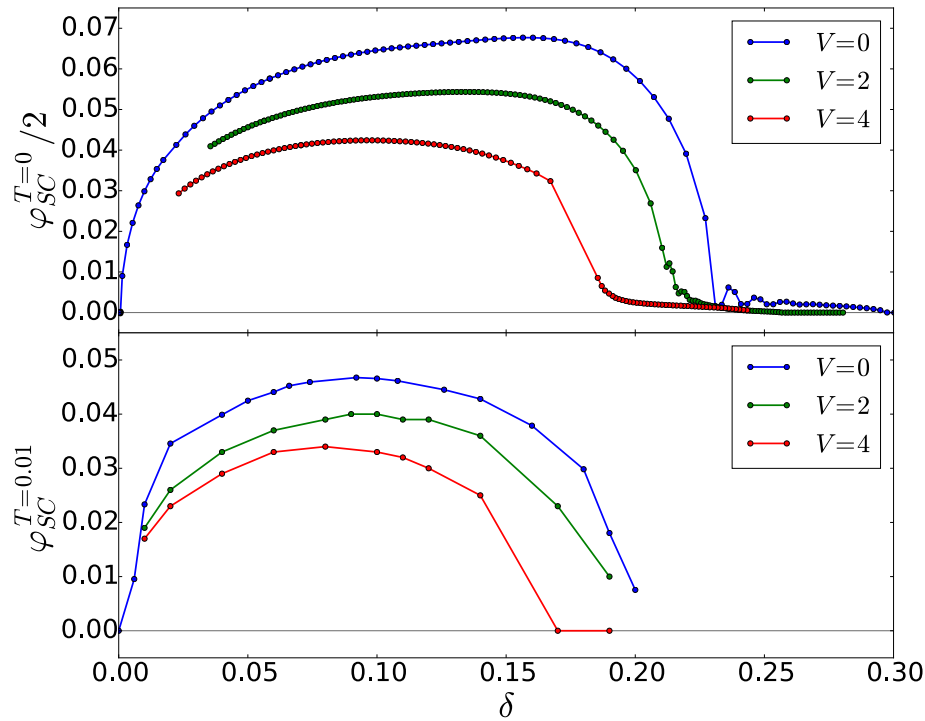


FIGURE 9.3 Comparaison des paramètres d'ordre supraconducteurs φ_{SC} à $U = 9$ et 4% de dopage aux trous tirés de la diagonalisation exacte à $T = 0$ (en haut) et des simulations Monte Carlo quantique en temps continu à $T = 0.01$ (en bas). La multiplication de $\varphi_{SC}^{T=0}$ par un facteur $1/2$ est nécessaire pour s'assurer que les paramètres d'ordre sont normalisés de la même façon dans les deux méthodes. Les résultats à température nulle proviennent de simulations faites par Simon Verret et David Sénéchal.

Avant de continuer, prenons juste un instant pour vérifier la normalisation des paramètres d'ordre présentés dans la figure Fig.9.3. On a

$$\varphi_{SC}^{T=0.01} = \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}^{T=0.01} \Big|_{\vec{k}=(\pi,0)} = \frac{1}{2N_c} \sum_{i,\delta} \langle \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{i+\delta\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}^{T=0.01} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_{i+\delta})} \Big|_{\vec{k}=(\pi,0)} \quad (9.1)$$

où $i + \delta$ désigne les sites sur l'amas qui sont premiers voisins du site i de l'amas. L'amas comporte N_c sites. On corrige ici le double comptage venant de la somme sur les sites avec un facteur $1/2$. En notant le facteur de phase

$$\mathcal{D}_{ij} = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \Big|_{\vec{k}=(\pi,0)} , \quad (9.2)$$

on a ainsi

$$\varphi_{SC}^{T=0.01} = \frac{1}{2N_c} \sum_{i,\delta} \langle \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{i+\delta\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}^{T=0.01} \mathcal{D}_{ii+\delta} . \quad (9.3)$$

Or, le paramètre d'ordre sortant du programme de diagonalisation exacte écrit par le professeur David Sénéchal est défini comme

$$\varphi_{SC}^{T=0} = \frac{1}{2N_c} \left[\sum_{i,\delta} \langle \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{i+\delta\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}^{T=0} \mathcal{D}_{ii+\delta} + c.h \right] = 2 \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}^{T=0} \Big|_{\vec{k}=(\pi,0)} . \quad (9.4)$$

L'accord avec la définition Eq.7.19 adaptée à notre problème d'amas requiert donc un facteur multiplicatif $1/2$ sur $\varphi_{SC}^{T=0}$ dans la figure Fig.9.3.

La dépendance en T , δ , et V du paramètre d'ordre supraconducteur φ_{SC} à travers les dômes supraconducteurs à $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$ est montrée dans la figure Fig.9.4 (le code couleur "bleu-vert-rouge" associé aux lignes de transition pour les différentes valeurs de V est présenté à la figure Fig.9.1 et sera conservé par la suite). Aux vues des plages de couleurs (obtenues par interpolation linéaire) des panneaux de gauche de la figure Fig.9.4, il est clair que φ_{SC} garde la même dépendance en T et δ pour toute valeur de V , et que sa valeur à $T = 0$ n'est pas proportionnelle à la température critique. On peut cependant remarquer que les valeurs de φ_{SC} diminuent globalement avec V . Les panneaux de droite de la figure Fig.9.4 permettent cependant d'être plus subtil. En fait, le paramètre d'ordre supraconducteur est affaibli par V à basse température mais se voit *renforcé* à haute température. Qu'est-ce qui cause cela ?

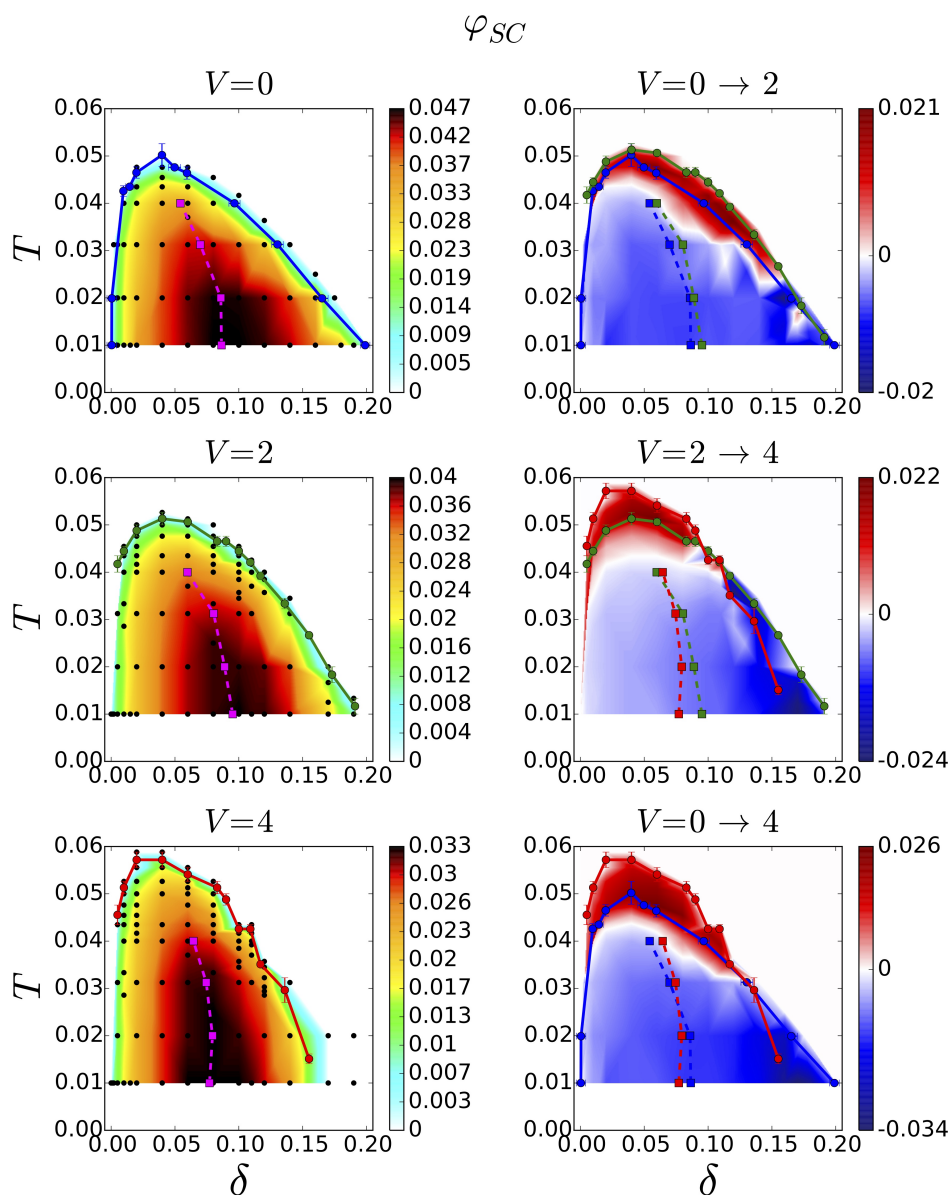


FIGURE 9.4 Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur du paramètre d'ordre supraconducteur. **Droite :** Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation du paramètre d'ordre supraconducteur entre différentes valeurs de V . Lignes tiretées : dopage où le paramètre d'ordre est maximal pour une température donnée.

9.1.3 Densité d'états locale et ordre de singulets de spins à courte portée

La figure Fig.9.5 présente l'évolution de la *densité d'états locale* en fonction de la température à 4% de dopage aux trous. On voit que le gap observé se remplit progressivement avec la température sans pour autant que les pics de cohérence ne bougent. Cela est parfaitement attendu dans le cas des cuprates et fait même partie des distinctions principales entre ces matériaux et les supraconducteurs conventionnels où ce sont surtout les pics de cohérence qui se referment sur le niveau de Fermi [234].

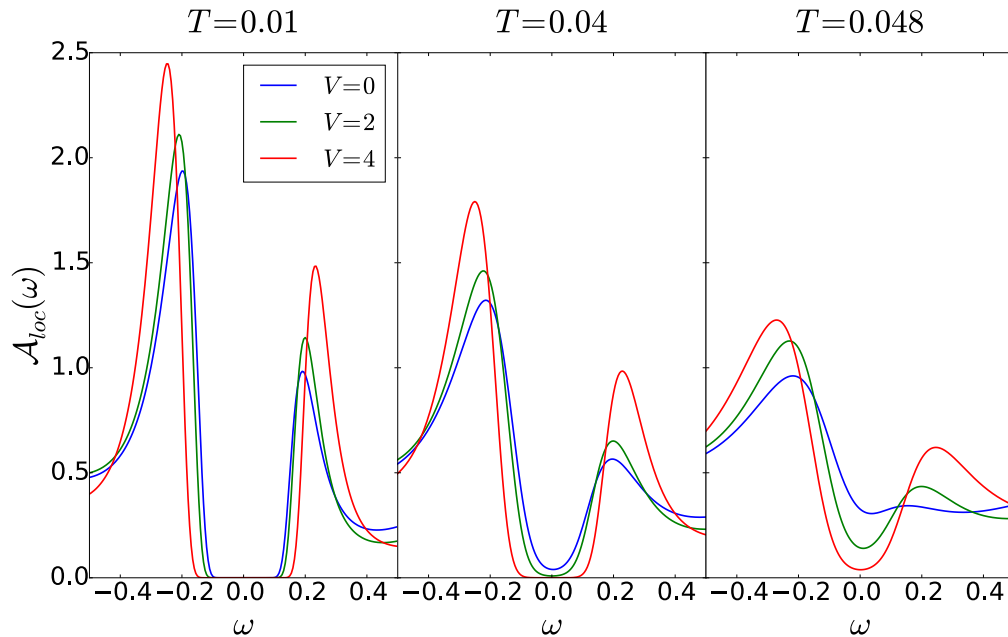


FIGURE 9.5 Évolution de la densité d'états locale en fonction de la température à 4% de dopage aux trous.

On peut aussi remarquer que le gap n'a pas la structure attendue pour une supraconductivité de symétrie *d*, où le gap s'annule linéairement avec ω autour de $\omega = 0$, mais ressemble plutôt à un gap de type *s*. Ce gap est observé à toute température, mais également à tout dopage aux trous comme le montre la figure Fig.9.6. Par ailleurs, il est important de noter que cette structure particulière est renforcée par *V* à toute température et tout dopage, sauf à fort dopage aux trous où

la situation est beaucoup moins claire.

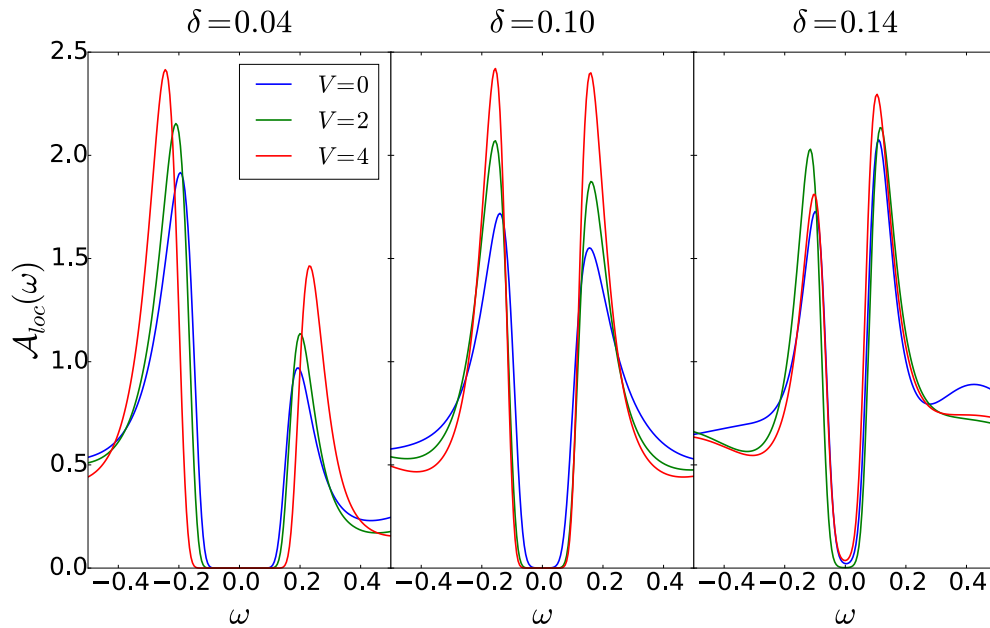


FIGURE 9.6 Évolution de la densité d'états locale en fonction du dopage aux trous à $T = 0.02$.

Même sans avoir pu mesurer les probabilités associées aux états propres de la plaquette CDMFT à $t'/t = 0$, on peut très bien imaginer que ce gap soit dû à un *ordre de singulets de spins à courte portée* [81, 235]. En effet, cet ordre magnétique apparaît naturellement dans les systèmes à suffisamment forte interaction U et en absence de frustration magnétique ($t'/t = 0$). L'interaction créant les paires de spins dans l'état singulet est J . D'autres arguments permettent de se convaincre de cette interprétation. On voit par exemple sur la figure Fig.9.6 que le gap se réduit à mesure que le dopage aux trous augmente, ce qui est normal car la physique antiferromagnétique (et donc J) perd de sa pertinence en s'éloignant du demi-remplissage. La figure Fig.9.7 montre également que cette structure de gap disparaît dans la densité d'états locale et la fonction spectrale anormale lorsque la frustration magnétique augmente dans une zone similaire du diagramme de phase dopé aux trous.

Enfin, la densité d'états locale étant la première quantité issue du prolongement analytique que nous rencontrons dans ce chapitre, il est important de savoir à quel

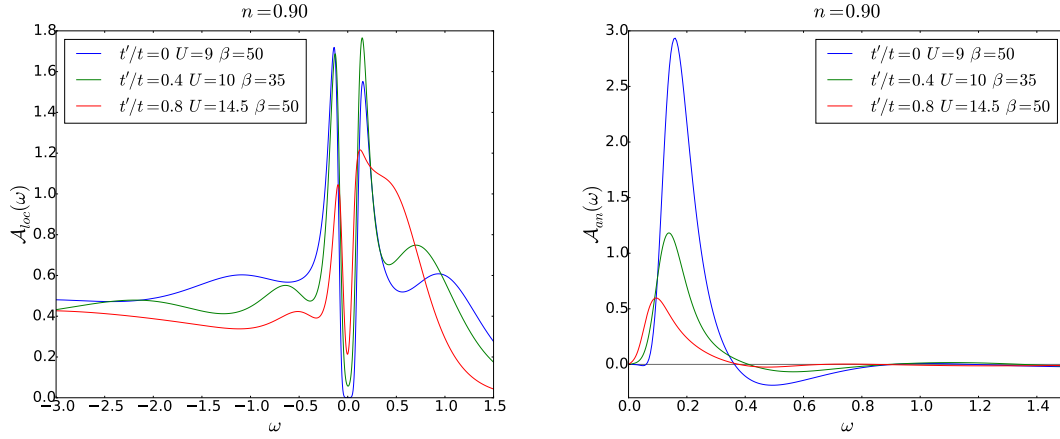


FIGURE 9.7 Gauche : Fonction spectrale locale pour trois frustrations magnétiques t'/t différentes. **Droite :** Fonction spectrale anormale pour trois frustrations magnétiques t'/t différentes. Les données sont toutes prises en plein milieu de leurs dômes supraconducteurs respectifs. Données sur les réseaux frustrés tirées de [236].

point le prolongement analytique a bien convergé. Pour qualifier cette convergence, on peut comparer le prolongement analytique obtenu pour le paramètre α optimal de la figure Fig.3.5, noté α_{opt} , avec les prolongements analytiques obtenus pour les deux valeurs du paramètre α bordant la largeur à mi-hauteur du pic de courbure issu de la figure Fig.3.5, notées α_- et α_+ (avec $\alpha_- < \alpha_+$). Cette comparaison est présentée dans la figure Fig.9.8. La convergence est globalement très bonne en toute circonstance. En effet, on peut au plus extraire une erreur de l'ordre de 10^{-3} sur le *gap supraconducteur* Δ_{SC} , défini comme étant la moitié de la distance entre les deux pics à basse énergie de la densité d'états locale, alors que ce *gap supraconducteur* est de l'ordre de 10^{-1} .

9.1.4 Gap supraconducteur et rapport Δ_{SC}/T_c

La dépendance en T , δ , et V du *gap supraconducteur* Δ_{SC} extrait de la densité d'états locale à travers les dômes supraconducteurs à $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$ est présentée dans la figure Fig.9.9. Aux vues des plages de couleurs des panneaux de gauche de la figure Fig.9.9, Δ_{SC} garde globalement la même dépendance en T et δ pour toute valeur de V , augmentant lorsque le dopage aux trous diminue. Deux

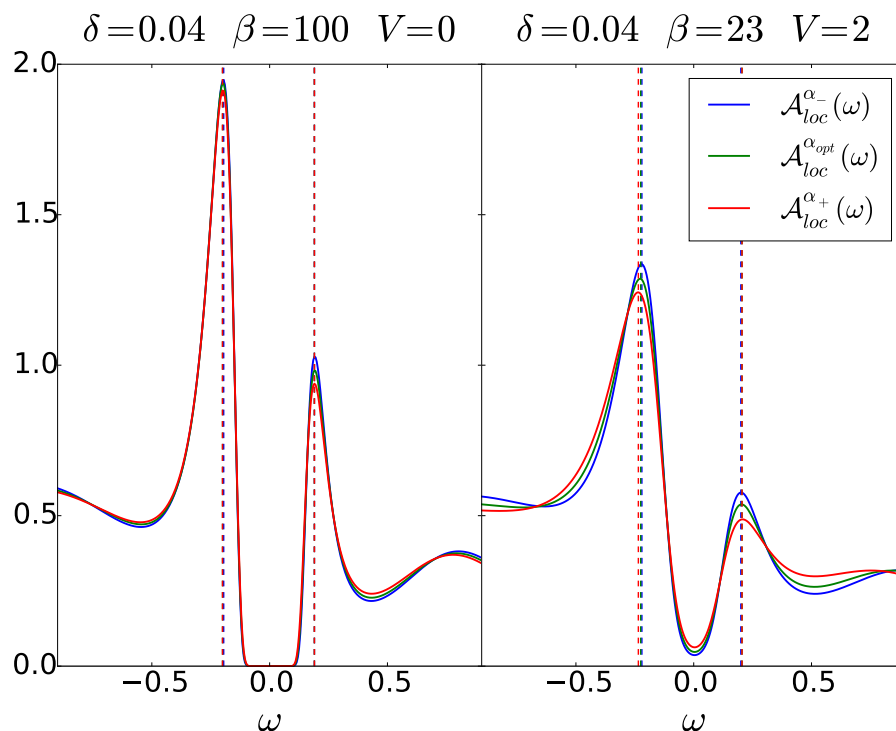


FIGURE 9.8 Convergence du prolongement analytique extrayant la densité d'états locale pour un très bon cas (à gauche) et un cas moins bon (à droite). Les traits tiretés correspondent à la position des pics de basse énergie dans la densité d'états locale. Pour le cas à $V = 0$, on a $\alpha_- = 114$, $\alpha_{opt} = 256$, et $\alpha_+ = 455$. Pour le cas à $V = 2$, on a $\alpha_- = 74.2$, $\alpha_{opt} = 263$, et $\alpha_+ = 624$.

régimes de dopage aux trous se dessinent : un régime à faible dopage ($\delta < 0.06$) où le gap supraconducteur sature à une certaine valeur, et un régime à fort dopage ($\delta > 0.06$) où le gap diminue progressivement lorsque le dopage aux trous augmente.

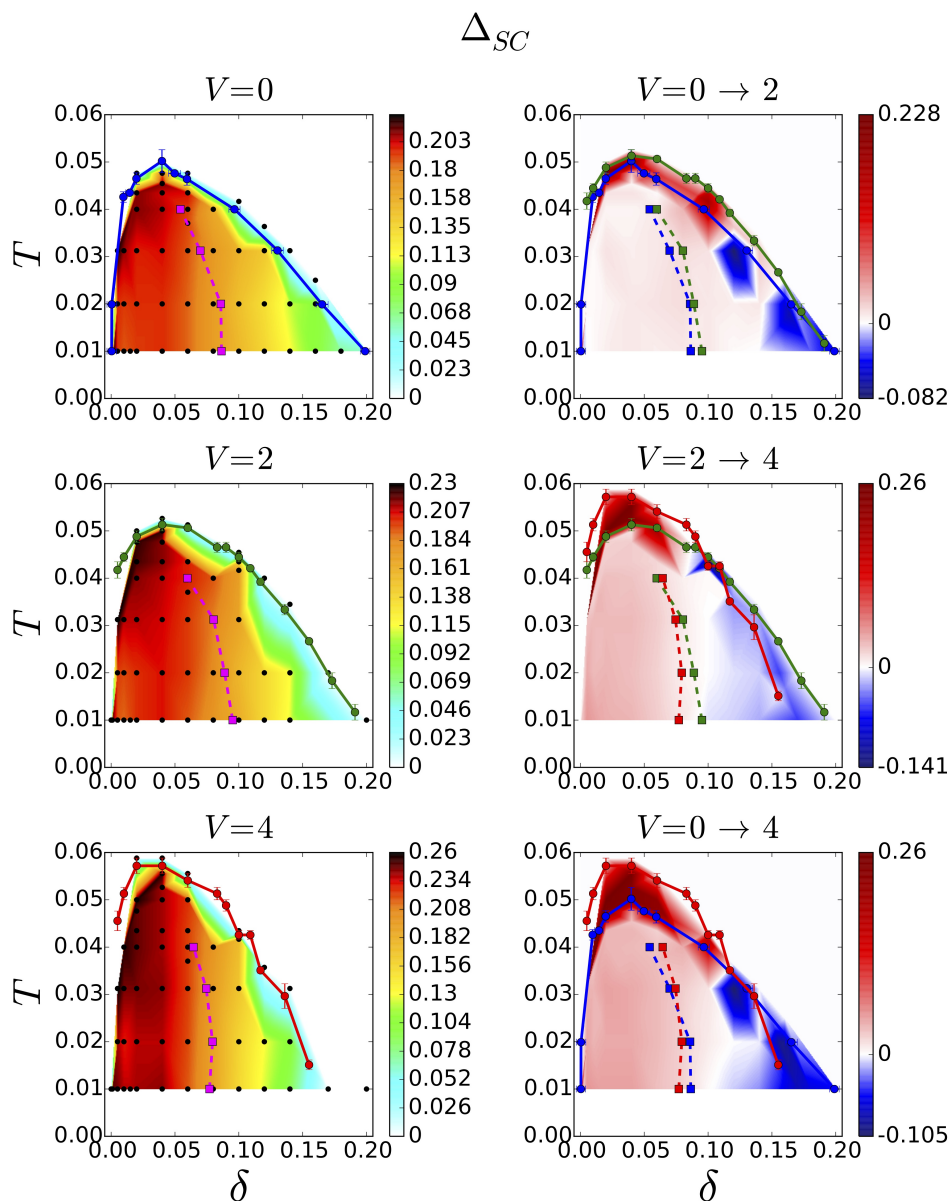


FIGURE 9.9 Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur du gap supraconducteur. **Droite :** Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation du gap supraconducteur entre différentes valeurs de V . Lignes tiretées : dopage où le paramètre d'ordre est maximal pour une température donnée.

On remarque que le gap augmente légèrement avec la température à faible dopage. Cette dépendance du gap en température n'est pas vraiment attendue, on s'attend en effet à ce que le gap diminue en fonction de la température pour éventuellement s'annuler à la température critique. La figure Fig.9.10 présente le gap supraconducteur à 4% de dopage aux trous et à $V = 2$ en fonction de la température. Rien d'étrange ne semble avoir lieu mais nous pouvons tout simplement soupçonner que le prolongement analytique rencontre des difficultés à opérer à haute température. Par exemple, il serait possible que la présence des pics à haute fréquence vienne donner l'impression d'un gap supraconducteur plus grand à cause du moyennage inhérent au prolongement analytique. Dans tous les cas, ces difficultés n'ont aucune raison d'induire le même genre d'erreur sur toutes les quantités découlant du prolongement analytique et il semblerait que ces erreurs soient plus importantes dans l'évaluation du gap supraconducteur.

Quant à la dépendance en V , le maximum du gap supraconducteur augmente avec V mais la surface de la plage de saturation du gap supraconducteur en T et δ semble rester constante lorsque V augmente. Les panneaux de droite de la figure Fig.9.9 distinguent globalement les régimes de dopage aux trous mentionnés auparavant : le régime de faible dopage voit le gap augmenter en fonction de V tandis que le régime de fort dopage voit le gap diminuer en fonction de V .

Il est important de noter que la figure Fig.9.10 présente également la densité d'états locale au-dessus de la température critique T_c . On remarque que le pic de cohérence à énergie positive disparaît pour $T > T_c$, laissant derrière lui un *pseudogap* séparant l'ancien pic de cohérence à énergie négative d'un très large pic situé à $\omega \simeq 0.7$.

Du point de vue de la dynamique supraconductrice, la figure Fig.9.11 nous montre que le gap supraconducteur correspond très bien à la fréquence où se produit le maximum d'appariement (maximum de la fonction spectrale anormale) à $V = 0$. Ceci est également vrai à $V = 2$ et $V = 4$. On retrouve par ailleurs les deux régimes de dopage précédemment mentionnés. On peut alors voir la figure Fig.9.9 sous un nouveau jour : l'appariement à faible dopage se fait globalement à plus haute fréquence lorsque V augmente, ce qui paraît normal si l'appariement à basse fréquence se fait *via* J . La tendance s'inverse cependant à fort dopage, ce

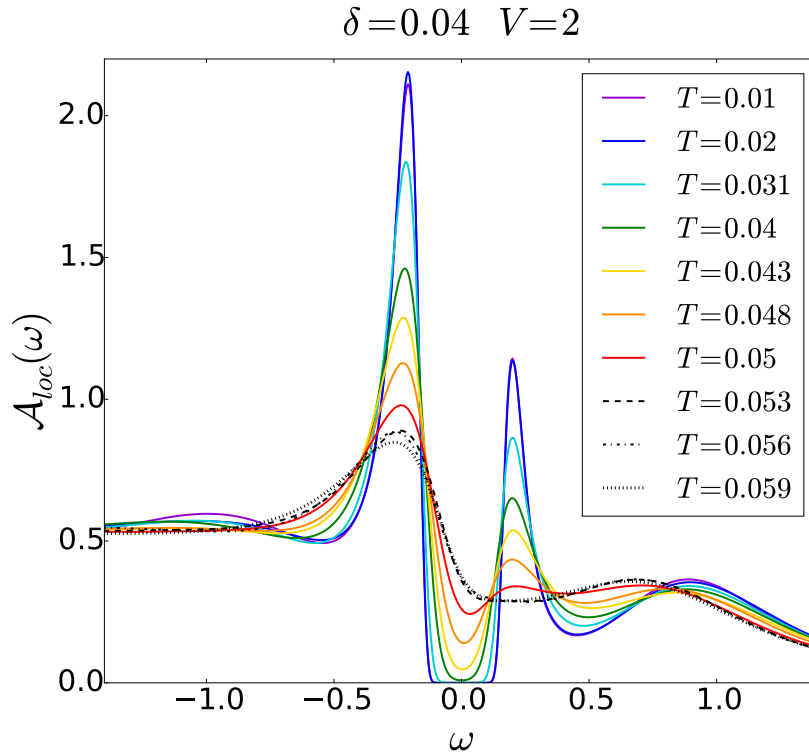


FIGURE 9.10 Évolution en température de la densité d'états locale à 4% de dopage et $V = 2$ en dessous de T_c (en couleur) et au-dessus de T_c (en noir).

qui est encore normal si la physique de J perd de sa pertinence. On peut également remarquer que l'appariement se fait sur une très courte plage de fréquences (d'une longueur proche de $W/16 = 0.5t \simeq J$ au plus), allant dans le sens d'une contribution retardée à l'appariement, comme précisé précédemment. Il se pourrait néanmoins qu'une source d'appariement provienne d'énergies de l'ordre de U , comme observé dans de précédents travaux [237, 238], mais le manque de fiabilité du prolongement analytique à haute énergie ne nous permet pas d'étudier correctement ce genre de source. Le fait que nous retombions directement sur la bonne valeur asymptotique pour le paramètre d'ordre cumulatif semble cependant indiquer qu'une telle source d'appariement serait dans tous les cas négligeable du point de vue du paramètre d'ordre cumulatif.

Quand on parle de gap supraconducteur, il est également très important de calculer le rapport $\Delta_{SC}^{T=0}/T_c$ pour le comparer aux théories de la supraconductivité

$$\beta=100 \quad V=0$$

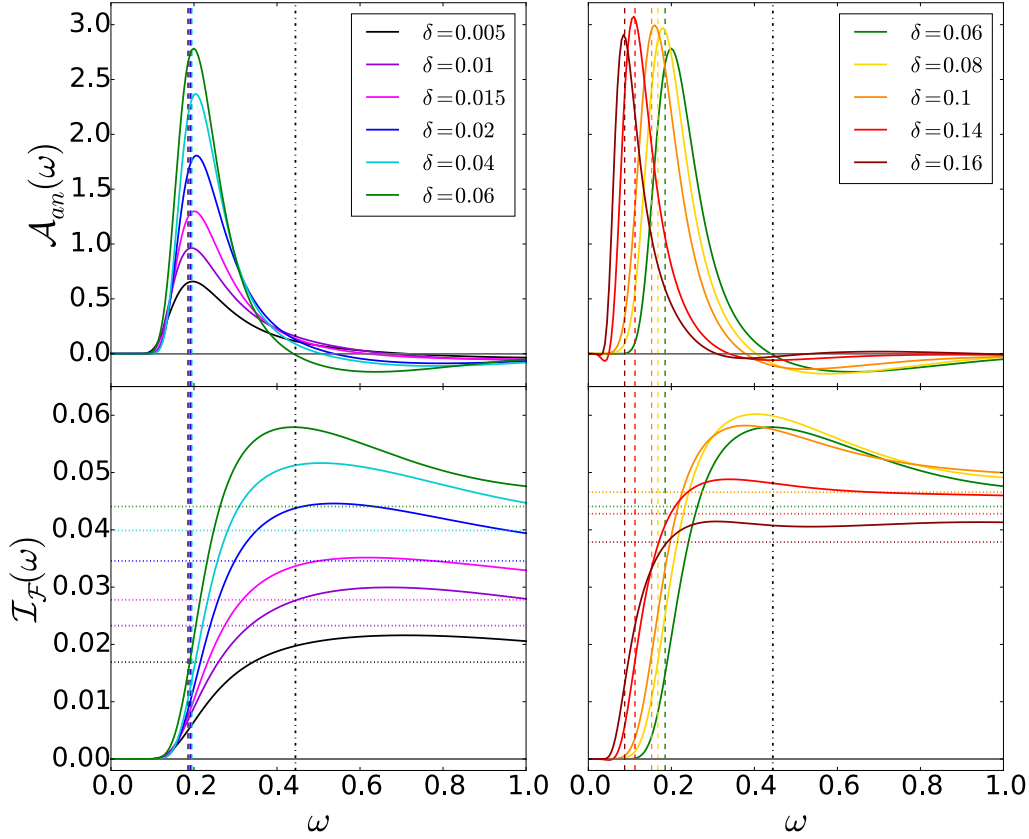


FIGURE 9.11 Évolution en dopage aux trous de la fonction spectrale anormale et du paramètre d'ordre cumulatif à $\beta = 100$ et $V = 0$. **Gauche** : Régime globalement sous-dopé. **Droite** : Régime globalement sur-dopé. Les lignes tiretées verticales représentent le gap supraconducteur, tandis que la ligne verticale noire en trait-point représente $J = 4t^2/U$ et que les lignes pointillées horizontales indiquent les différentes valeurs prises par le paramètre d'ordre supraconducteur.

conventionnelle. En effet, la théorie BCS prédit

$$\frac{\Delta_{BCS}^{T=0}}{k_B T_c} \simeq 1.76 \quad (s\text{-wave}) \qquad \frac{\Delta_{BCS}^{T=0}}{k_B T_c} \simeq 2.14 \quad (d\text{-wave}) \qquad (9.5)$$

tandis que la théorie d'Eliashberg prédit un rapport pouvant atteindre des valeurs plus élevées pour la supra s -wave, de l'ordre de 5 environ dans les supraconducteurs à très fort couplage électron-phonon [239]. La raison derrière cette augmentation

vient du fait que les phonons thermiques à température finie cassent des paires de Cooper et abaissent la température critique T_c sans affecter la physique à température nulle (où ils n'existent pas) et donc le gap $\Delta_{SC}^{T=0}$. La figure Fig.9.12 présente le rapport Δ_{SC}/T_c provenant de nos simulations, en utilisant le gap supraconducteur à $\beta = 100$ (soit $T = 0.01$), normalement très semblable au gap à température nulle. On obtient un résultat globalement deux fois plus grand que les théories conventionnelles et le rapport caractérisant le régime de dopages intermédiaires, marqué par une ligne tiretée noire, semble présenter une certaine universalité !

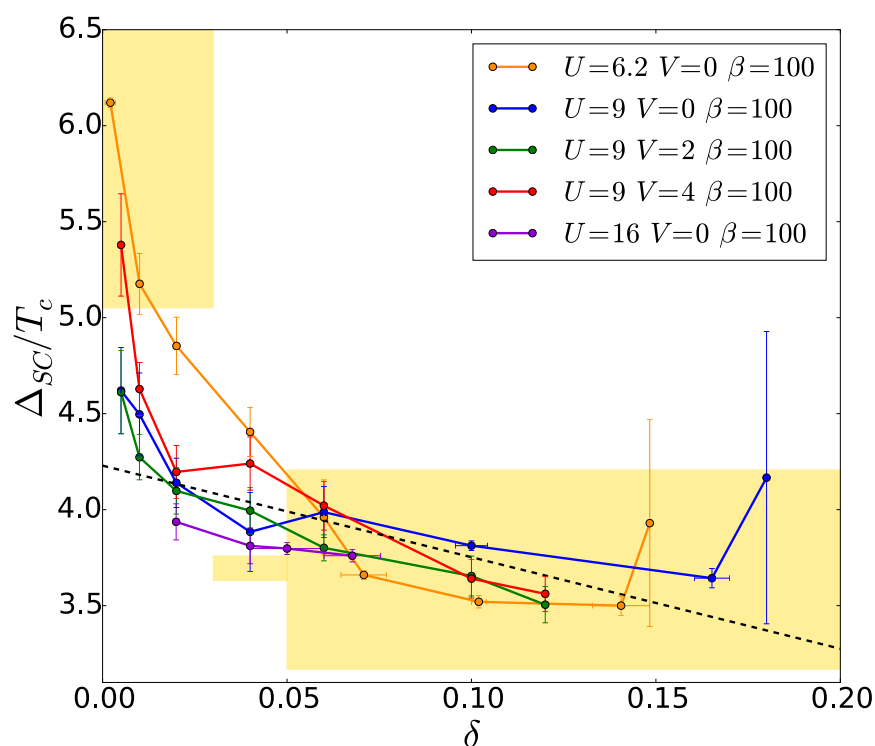


FIGURE 9.12 Rapport Δ_{SC}/T_c en fonction du dopage aux trous à $U = 9, V = 0, V = 2$, et $V = 4$, et à $U = 6.2$ et $U = 16$ à $V = 0$. Le gap supraconducteur est pris à $\beta = 100$. Les données expérimentales extraites du tableau Tab.9.1 ont été ajoutées sous la forme de plages de couleur jaune (en faisant correspondre les régimes sous, sur, et optimalement dopés), de même que la tendance théorique dans le régime de dopages intermédiaires de nos systèmes comparables à $V = 0$ et $V = 2$ (régression linéaire des deux ensembles de données), sous la forme d'un trait tireté.

Comparons avec l'expérience. Les résultats récents issus de mesures de *spectroscopie par photoémission résolue en angle de la densité d'états tomographique* pour

$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (communément appelé Bi2212) [234] sont présentés dans le tableau Tab.9.1. L'ordre de grandeur du rapport Δ_{SC}/T_c est non seulement bien plus grand que celui de la théorie BCS, mais aussi du même ordre de grandeur que nos données, comme le montre la figure Fig.9.12! Il se pourrait même que le rapport $\Delta_{SC}^{T \approx 0}/k_B T_c$ plus grand au plus fort dopage aux trous dans le tableau Tab.9.1 soit reproduit par nos données mais il serait nécessaire de réduire davantage les barres d'erreur pour en être certain.

	$\Delta_{SC}^{T \approx 0}$ (eV)	$\Delta_{SC}^{T \approx 0}/k_B T_c$
UD52K	0.033 ± 0.005	7.358 ± 0.111
UD70K	0.031 ± 0.005	5.134 ± 0.083
UD85K	0.039 ± 0.005	5.320 ± 0.068
Opt91K	0.029 ± 0.005	3.695 ± 0.064
OD75K	0.021 ± 0.005	3.246 ± 0.077
OD62K	0.022 ± 0.005	4.114 ± 0.093

TABLE 9.1 Tableau résumant les résultats issus de mesures de spectroscopie par photoémission résolue en angle de la densité d'états tomographique pour $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, tirés de [234]. Les échantillons sont nommés par leur régime de dopage aux trous ("UD" pour sous-dopé, "Opt" pour optimalement dopé, et "OD" pour sur-dopé) et la valeur de leur température critique. L'erreur de 0.005 pour le gap supraconducteur à très basse température traduit une éventuelle erreur sur la lecture du gap dans les graphiques de la référence [234].

9.1.5 Fréquence de brisure d'appariement

Nous venons d'analyser le gap supraconducteur, soit l'échelle d'énergie typique donnant le maximum d'appariement à basse fréquence dans la fonction spectrale anormale. Regardons maintenant la fréquence de brisure d'appariement ω_{SC}^b correspondant à la fréquence où la fonction spectrale anormale change de signe. Cette fréquence marque le début du régime des processus défavorables à la supraconductivité. La figure Fig.9.13 présente l'erreur induite sur cette quantité par la convergence imparfaite du prolongement analytique. L'erreur maximale sur la fréquence de brisure d'appariement est au plus de l'ordre de 10^{-2} pour des valeurs de fréquence de

l'ordre de 10^{-1} . L'erreur sur cette fréquence peut donc parfois être significative, ce qui n'empêche pas de trouver une tendance générale dans les panneaux de gauche de la figure Fig.9.14 (les panneaux de droite de la figure Fig.9.14 sont par contre probablement peu fiables). La fréquence de brisure d'appariement tend à augmenter lorsque le dopage aux trous diminue, et à diminuer avec V , traduisant sûrement une répulsion coulombienne prenant plus d'importance à haute fréquence.

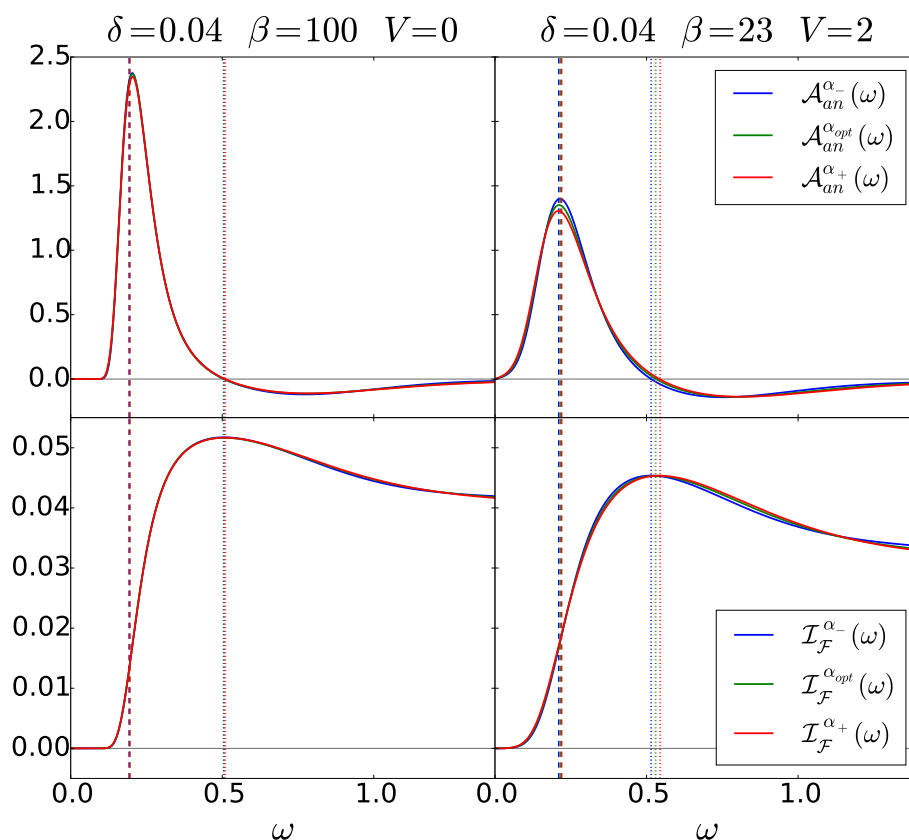


FIGURE 9.13 Convergence des prolongements analytiques extrayant la fonction spectrale anormale et le paramètre d'ordre cumulatif pour un très bon cas (à gauche) et un cas moins bon (à droite). Les traits tiretés correspondent au gap supraconducteur tandis que les traits pointillés correspondent à la fréquence de brisure d'appariement. Pour le cas à $V = 0$, on a $\alpha_- = 77.1$, $\alpha_{opt} = 183$, et $\alpha_+ = 365$ pour la fonction spectrale en $(0, \pi)$, et $\alpha_- = 45.8$, $\alpha_{opt} = 109$, et $\alpha_+ = 205$ pour la fonction spectrale auxiliaire. Pour le cas à $V = 2$, on a $\alpha_- = 74.1$, $\alpha_{opt} = 209$, et $\alpha_+ = 495$ pour la fonction spectrale en $(0, \pi)$, et $\alpha_- = 50$, $\alpha_{opt} = 126$, et $\alpha_+ = 251$ pour la fonction spectrale auxiliaire.

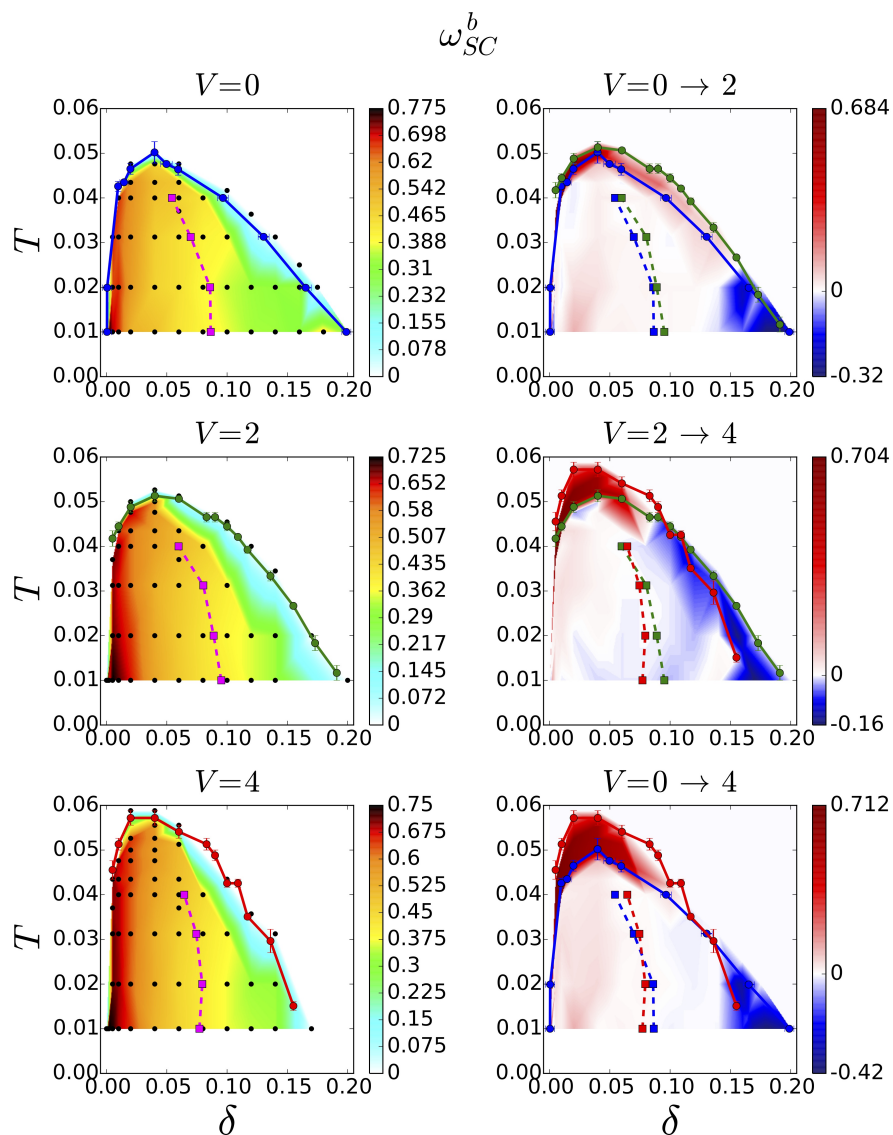


FIGURE 9.14 Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la fréquence de brisure d'appariement. **Droite :** Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation de la fréquence de brisure d'appariement entre différentes valeurs de V . Lignes tiretées : dopage où le paramètre d'ordre est maximal pour une température donnée.

9.1.6 Contributions positive et négative au paramètre d'ordre supraconducteur

Les dernières quantités qui vont nous intéresser sont les contributions positive et négative au paramètre d'ordre supraconducteur φ_{SC} provenant du paramètre d'ordre cumulatif $\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\omega)$, notées respectivement $\mathcal{C}_{SC}^+$ et $\mathcal{C}_{SC}^-$, et définies sous la forme

$$\boxed{\mathcal{C}_{SC}^+ = \mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\omega_{SC}^b) \simeq \int_0^{\omega_{SC}^b} d\omega \mathcal{A}_{an}(\omega) \geq 0} \quad (9.6)$$

et

$$\boxed{\mathcal{C}_{SC}^- = |\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(+\infty) - \mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\omega_{SC}^b)| \simeq \left| \int_{\omega_{SC}^b}^{+\infty} d\omega \mathcal{A}_{an}(\omega) \right| \geq 0} \quad (9.7)$$

avec

$$\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(+\infty) - \mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\omega_{SC}^b) \simeq \int_{\omega_{SC}^b}^{+\infty} d\omega \mathcal{A}_{an}(\omega) \leq 0. \quad (9.8)$$

Ces définitions s'appuient sur la propriété

$$\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(+\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \mathcal{A}_{an}(\omega) f(-\omega) = \varphi_{SC} \quad (9.9)$$

et sur le fait que la distribution de Fermi influe de façon significative sur le paramètre d'ordre cumulatif uniquement sur l'intervalle $[-2k_B T, 2k_B T]$, qui est parfaitement négligeable ici par rapport à la plage de fréquences $[0, \omega_{SC}^b]$ où se fait l'appariement. Par ailleurs, en notant Δ_{sing} le gap généré par l'ordre de singulets de spins à courte portée, on a quasiment toujours $2k_B T < \Delta_{sing}$, de sorte que la plage d'influence de la distribution de Fermi est très souvent incluse dans le gap généré par l'ordre de singulets de spins à courte portée. Cette distribution n'a donc aucun effet notable sur les contributions définies précédemment. On a alors

$$\boxed{\mathcal{C}_{SC}^+ - \mathcal{C}_{SC}^- = \varphi_{SC}}. \quad (9.10)$$

La figure Fig.9.15 présente l'évolution de la fonction spectrale anormale et du paramètre d'ordre cumulatif à 4% de dopage aux trous en fonction de la température pour différentes valeurs de V . On remarque que les contributions $\mathcal{C}_{SC}^+$ et $\mathcal{C}_{SC}^-$ dimi-

nuent lorsque la température augmente pour une valeur de V donnée. Ces deux quantités en compétition donnent finalement un paramètre d'ordre supraconducteur qui diminue avec la température, ce à quoi on s'attend.

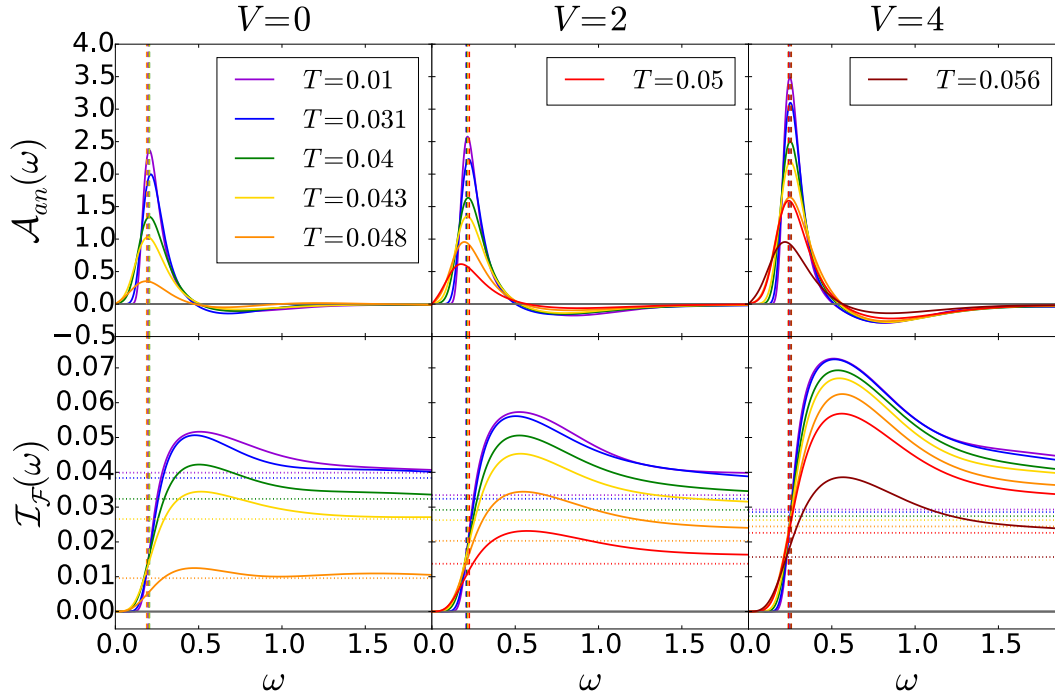


FIGURE 9.15 Évolution de la fonction spectrale anormale et du paramètre d'ordre cumulatif à 4% de dopage aux trous en fonction de la température pour différentes valeurs de V . Les lignes tiretées verticales représentent le gap supraconducteur tandis que les lignes pointillées horizontales indiquent les valeurs prises par le paramètre d'ordre supraconducteur. Les différentes couleurs correspondent aux mêmes températures pour tous les panneaux.

La figure Fig.9.16 présente une vue d'ensemble de la figure Fig.9.15 sur une plus large plage de fréquences. On y remarque que la valeur asymptotique correspondant au paramètre d'ordre est toujours bien respectée, quelle que soit la valeur de V . Le régime asymptotique est cependant atteint à de plus hautes énergies lorsque $V \neq 0$. On se rend également compte que la fonction spectrale anormale semble saturer à une valeur petite négative sur une certaine plage de fréquences, surtout à $V = 4$, ce qui donne naissance à un régime de décroissance linéaire pour le paramètre d'ordre cumulatif juste avant l'entrée dans le régime asymptotique.

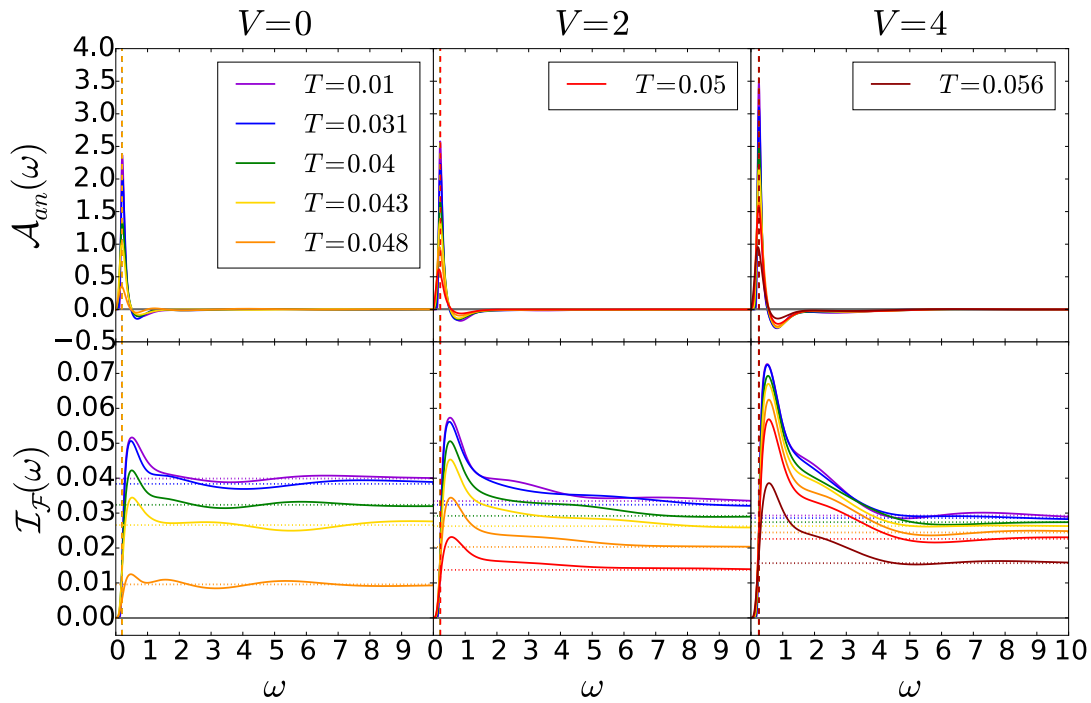


FIGURE 9.16 Vue d'ensemble de la figure Fig.9.15 sur une plus large plage de fréquences.

La chose la plus intéressante vient de l'évolution de ces quantités en fonction de V . On voit que les contributions $\mathcal{C}_{SC}^+$ et $\mathcal{C}_{SC}^-$ augmentent toutes les deux avec V . Mais quel est le résultat sur le paramètre d'ordre supraconducteur ? Il est loin d'être trivial : on s'aperçoit en fait que le paramètre d'ordre supraconducteur diminue lorsque V augmente à basse température et augmente avec V à haute température ! On peut aussi résumer la chose en regardant la disparité en température des valeurs prises par le paramètre d'ordre supraconducteur à répulsion V fixée. Cette disparité se réduit lorsque V augmente, traduisant le fait que la supraconductivité devient plus résistante à la température lorsque V augmente. Les figures Fig.9.17 et Fig.9.18 permettent de conclure sur ce qui se passe dans l'entière des dômes supraconducteurs à $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$.

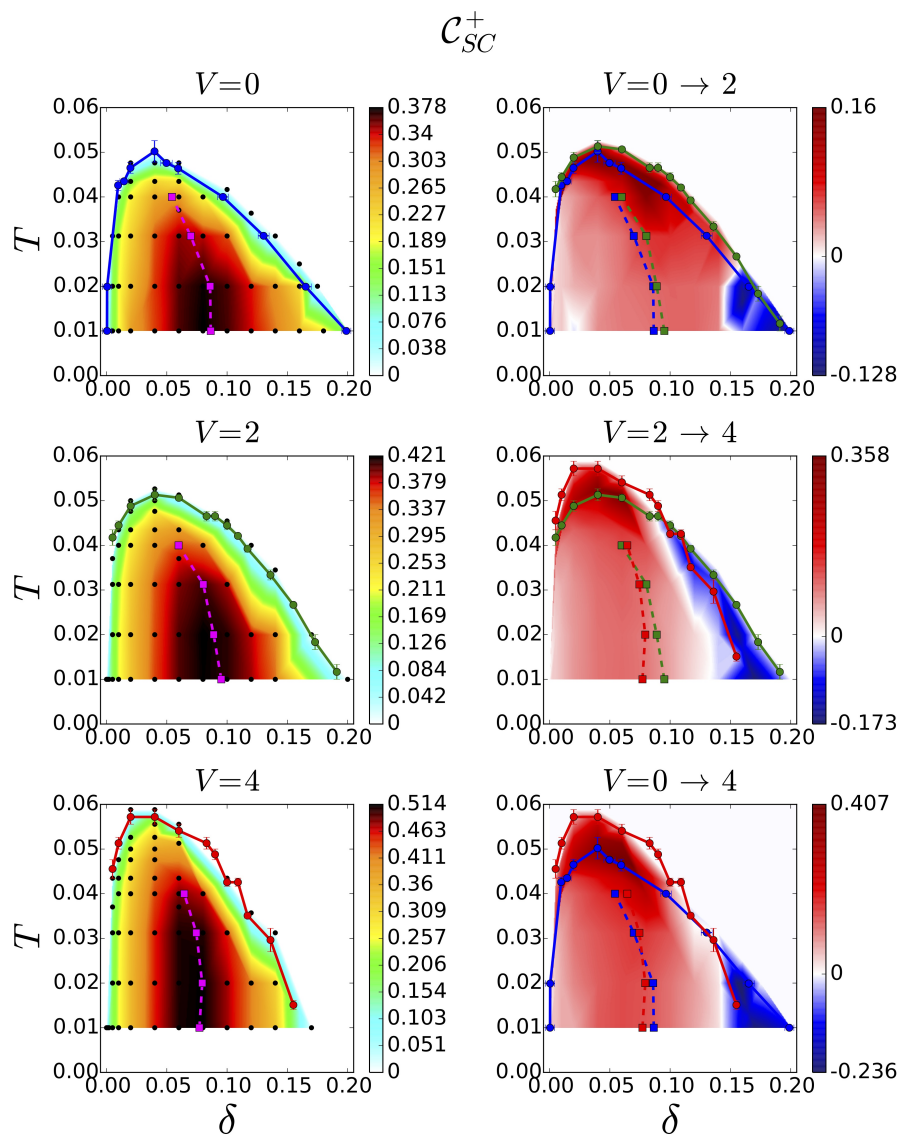


FIGURE 9.17 Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la contribution positive au paramètre d'ordre supraconducteur. **Droite :** Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation de la contribution positive au paramètre d'ordre supraconducteur entre différentes valeurs de V . Lignes tiretées : dopage où le paramètre d'ordre est maximal pour une température donnée.

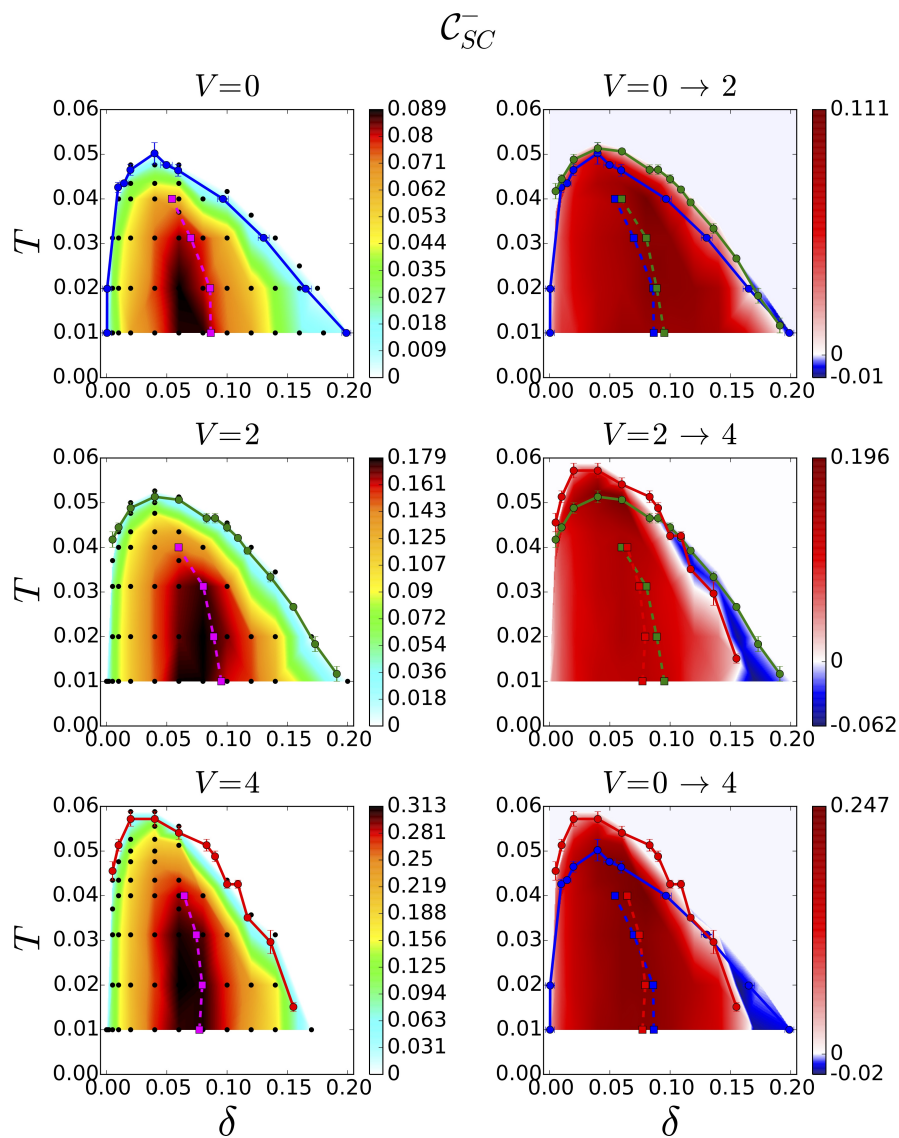


FIGURE 9.18 Gauche : Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la contribution négative au paramètre d'ordre supraconducteur. **Droite :** Évolution du système entre différentes valeurs de V . Les plages de couleurs représentent la variation de la contribution négative au paramètre d'ordre supraconducteur entre différentes valeurs de V . Lignes tiretées : dopage où le paramètre d'ordre est maximal pour une température donnée.

Les panneaux de gauche des figures Fig.9.17 et Fig.9.18 montrent que les contributions $\mathcal{C}_{SC}^+$ et $\mathcal{C}_{SC}^-$ gardent la même dépendance en T et δ en fonction de V et qu'elles sont globalement maximales à un dopage aux trous légèrement plus faible que le dopage donnant le maximum du paramètre d'ordre supraconducteur à basse température (ligne magenta sur les panneaux de gauche des figures Fig.9.17 et Fig.9.18). Les deux contributions étant en compétition, ce n'est qu'en trouvant un compromis à dopage plus élevé que le paramètre d'ordre est maximisé. Quant aux panneaux de droite des figures Fig.9.17 et Fig.9.18, ils indiquent clairement deux choses :

- la contribution positive $\mathcal{C}_{SC}^+$ augmente avec V à faible dopage et chute à fort dopage lorsque V augmente ;
- la contribution négative $\mathcal{C}_{SC}^-$ ne fait qu'augmenter uniformément lorsque V augmente (les parties bleues ne viennent que de la différence des températures critiques ici).

La raison derrière cela est la suivante : V renforce J à faible dopage, ce qui accroît la force de l'appariement du moment que J reste pertinent, soit à faible dopage aux trous. À fort dopage, la contribution positive diminue car l'influence de J diminue et ne soutient plus l'appariement. En parallèle, V renforce toujours la répulsion coulombienne à haute fréquence, ce qui se traduit par une augmentation générale de la contribution négative avec V , pour tout dopage et toute température ! Ces résultats expliquent la dynamique supraconductrice se cachant derrière les figures Fig.9.1 et Fig.9.4 montrant l'évolution de la température critique et du paramètre d'ordre supraconducteur en fonction de V .

On peut quantifier autrement la contribution négative à l'appariement en nous intéressant à la partie réelle de la self-energy anormale, comme expliquée dans les sections Sec.7.6 et Sec.8.4. Cette dernière est présentée à 4% de dopage aux trous et à $\beta = 100$ dans la figure Fig.9.19 pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$. On aperçoit très bien une *contribution négative à fréquence infinie* apparaître en présence de V et croître en valeur absolue à mesure que V augmente ! Par ailleurs, les figures Fig.9.20 et Fig.9.21 présentent les dépendances de cette contribution en dopage à $\beta = 100$ et en température à 4% de dopage aux trous, respectivement. La contribution est nulle à $V = 0$ mais devient finie à V fini et croît (en valeur absolue) à mesure que V augmente. Pour ce qui est de sa dépendance en dopage, la contribution augmente à faible dopage, atteint un maximum vers 10% de dopage, puis chute à fort dopage. Quant à sa dépendance en température, la contribution semble saturer à basse

température, et chute progressivement à haute température. Ces dépendances sont qualitativement très semblables (en valeur absolue) à celles observées dans la figure Fig.9.18 pour la contribution négative au paramètre d'ordre supraconducteur $\mathcal{C}_{SC}^-$.

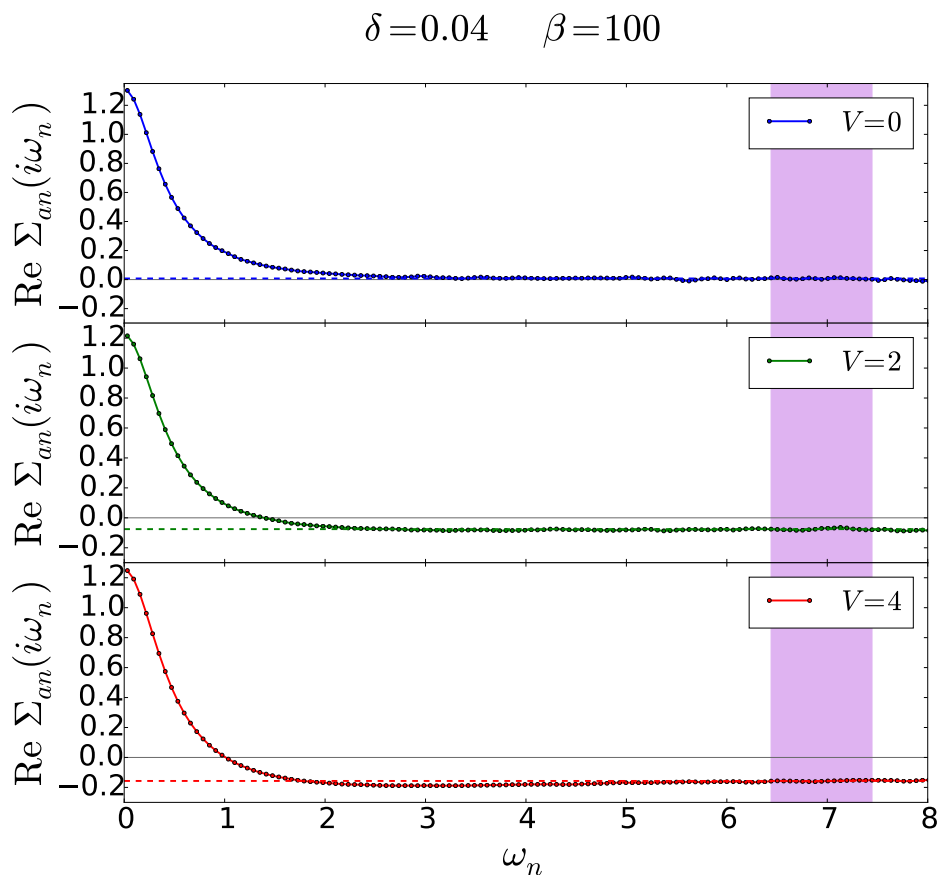


FIGURE 9.19 Partie réelle de la self-energy anormale en $\vec{k} = (\pi, 0)$ à 4% de dopage aux trous et $\beta = 100$ pour $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$. Lignes tiretées : contributions à haute fréquence obtenues en moyennant la partie réelle des self-energies anormales en $\vec{k} = (\pi, 0)$ sur la plage de fréquences violette.

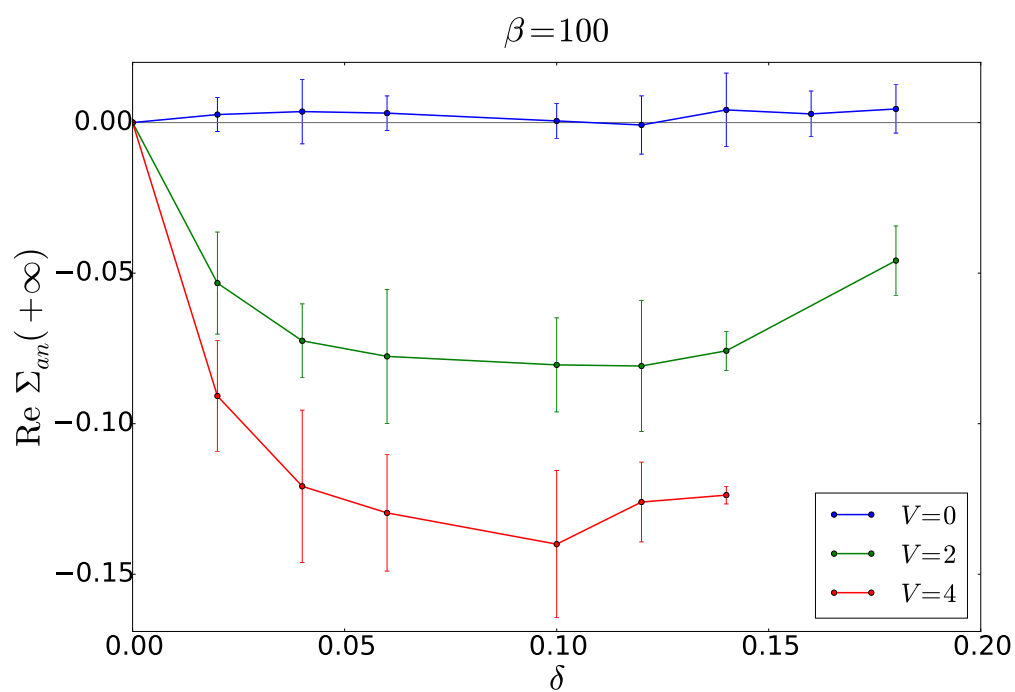


FIGURE 9.20 Contribution à fréquence infinie dans la partie réelle de la self-energy anormale en fonction du dopage aux trous à $\beta = 100$ pour différentes valeurs de V .

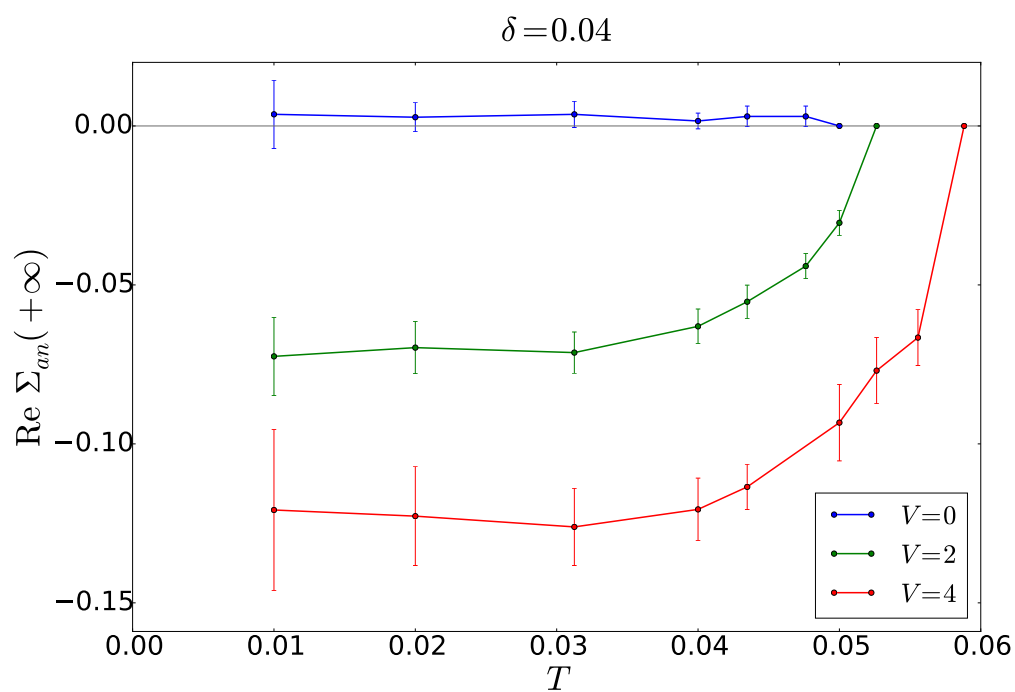


FIGURE 9.21 Contribution à fréquence infinie dans la partie réelle de la self-energy anormale en fonction de la température à 4% de dopage aux trous pour différentes valeurs de V .

9.2 Un système poussé vers l'ordre de charge

Revenons à la zone orangée de la figure Fig.9.1 et à l'éventuelle transition du premier ordre à $V = 4$ de la figure Fig.9.2. Sans étudier plus en profondeur cette éventuelle transition, il est néanmoins possible de se rendre compte que le système à $V = 4$ possède, du point de vue des *excitations de charge*, une nature bien différente de celle des systèmes à $V = 0$ et $V = 2$. Pour s'en convaincre, on peut regarder la *double occupation* présentée en fonction de V pour différents dopages aux trous dans la figure Fig.9.22.

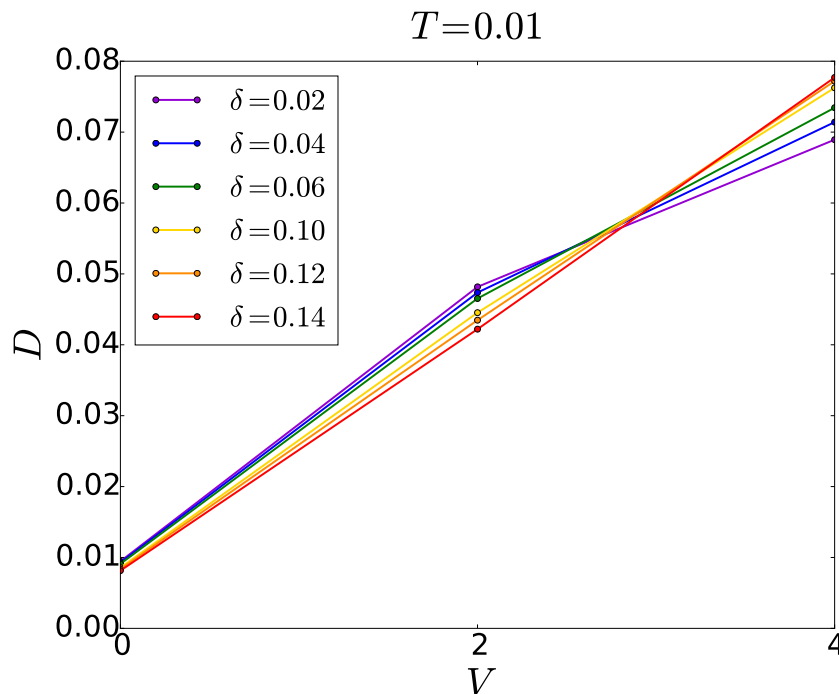


FIGURE 9.22 Double occupation en fonction de la répulsion aux premiers voisins V pour différents dopages aux trous à $T = 0.01$. Du point de vue de la charge, le système à $V = 4$ diffère notablement des systèmes à $V = 0$ et $V = 2$ car sa double occupation augmente avec le dopage aux trous. La double occupation dépend très faiblement de la température et les barres d'erreur sont plus petites que la taille des points.

Comme mentionné précédemment, la double occupation est la probabilité de doublement occuper un site donné dans le réseau cristallin. Dans la limite non interagissante, les états $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, et $|\uparrow\downarrow\rangle$ sont équivalents pour tout site et on

obtient donc la valeur $D = n^2/4$ (soit $1/4$ pour un système demi-rempli). Lorsque l'interaction U devient finie, l'état doublement occupé est défavorisé du point de vue énergétique et la double occupation chute sous cette valeur de $n^2/4$, ce qui est bien visible à $U = 9$ dans la figure Fig.9.22 par exemple. On voit aussi que la double occupation diminue lorsque le dopage aux trous augmente, ce qui est *a priori* normal car il y a globalement moins d'électrons pour occuper doublement un site. Bien que la double occupation possède une valeur bien plus grande à $V = 2$, celle-ci continue de diminuer lorsque le dopage aux trous augmente. Un changement qualitatif se produit à $V = 4$: tout en restant sous sa limite non interagissante pour tout dopage, la double occupation augmente lorsque le dopage aux trous augmente ! Ce même comportement est observé à toute température, comme le montre la figure Fig.9.23. Comment comprendre cela ?

En fait, si V est suffisamment grand par rapport à U (avec $V < U/2$), il peut devenir très avantageux d'un point de vue énergétique d'occuper doublement des sites, comme le montre la figure Fig.9.24. Cet effet tend à former de fortes corrélations de charge à courte portée, poussant ainsi clairement le système à $V = 4$ vers un ordre de charge commensurable à courte portée, comme celui mis en valeur dans la figure Fig.9.24. Par ailleurs, on peut encore se demander pourquoi la double occupation à $V = 4$ augmente lorsque l'on retire des électrons au système dans la figure Fig.9.22. Une explication cohérente serait de dire que lorsque l'on retire des électrons, la grandeur de V favorise tellement les états doublement occupés que les électrons retirés finissent par être ceux des états simplement occupés. La proportion de sites doublement occupés par rapport à l'ensemble du système augmente alors lorsque le dopage aux trous augmente !

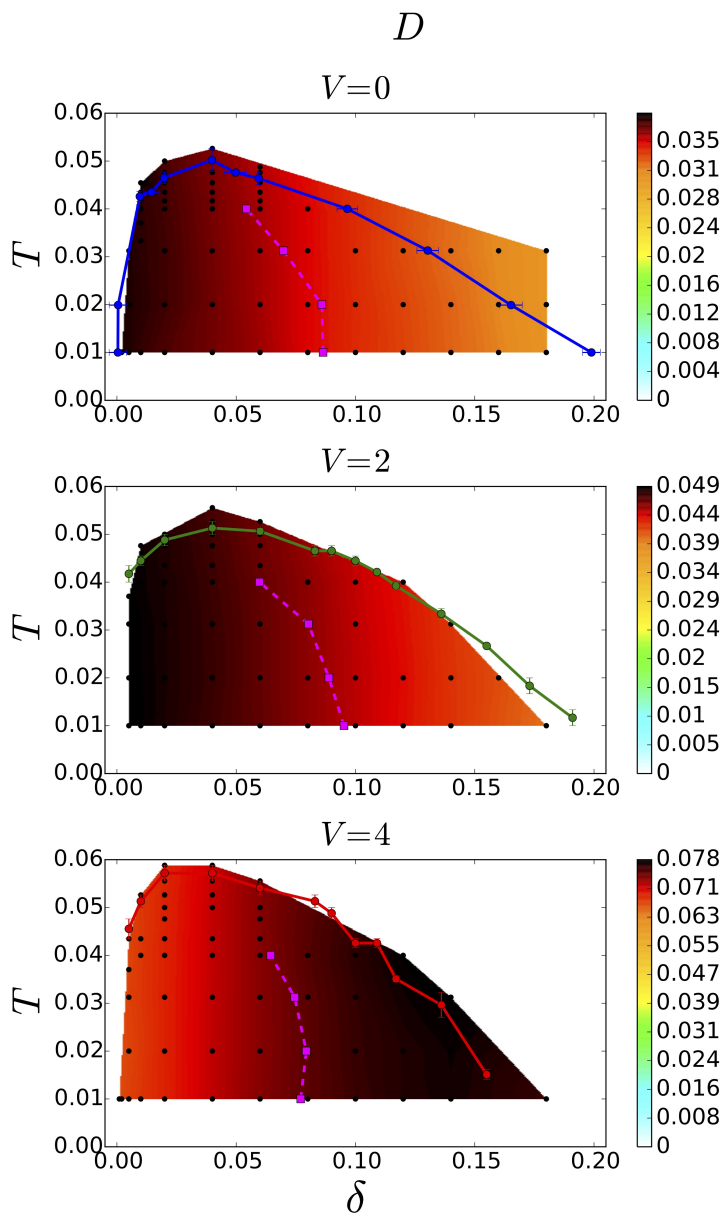


FIGURE 9.23 Dômes supraconducteurs pour différentes valeurs de V où les plages de couleurs représentent la valeur de la double occupation. Par souci de clarté, on impose la valeur $D = 0$ en dehors de l’enveloppe convexe de l’ensemble des points noirs correspondant aux données. Lignes tiretées : dopage où le paramètre d’ordre est maximal pour une température donnée.

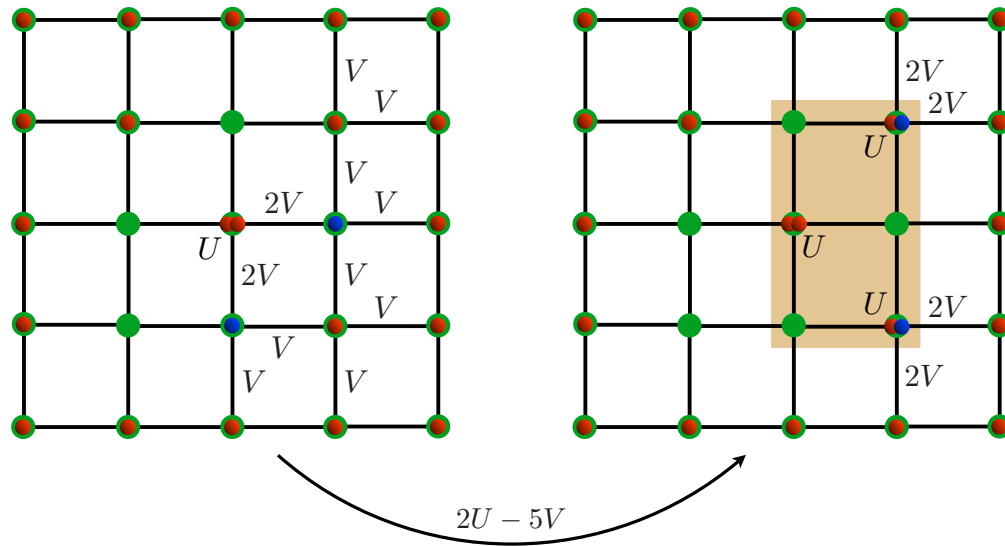


FIGURE 9.24 Si V est suffisamment grand par rapport à U (avec $V < U/2$), il peut devenir très avantageux d'un point de vue énergétique d'occuper doublement des sites, comme le montre ces deux configurations où seuls les deux électrons bleus ont bougé. Cet effet tend à former de fortes corrélations de charge à courte portée (d'où l'ordre de charge à courte portée en orange).

Une autre manière de constater le changement de nature du système à $V = 4$ est de calculer son *énergie de condensation* E_{cond}^{SC} [240, 241] en fonction de V . Le calcul de cette énergie de condensation est détaillé dans les annexes Ann.E et Ann.F. La figure Fig.9.25 présente justement l'énergie de condensation à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous en fonction de V . On y aperçoit un changement très mineur dans la différence en énergie cinétique ΔE_{cin} entre l'état supraconducteur et l'état normal en fonction de V mais un changement majeur dans la différence en énergie potentielle ΔE_{pot} entre l'état supraconducteur et l'état normal à $V = 4$.

Dans le cadre d'une physique aussi favorable à la double occupation, une supraconductivité de symétrie s étendue, $s + d$, ou encore $s + id$ pourrait très bien émerger. Cependant, ces symétries n'ont été que très peu étudiées pour l'instant. Néanmoins, les quelques simulations faites sur la symétrie s étendue dans le cadre de cette thèse montrent qu'il n'existe pas de telle symétrie supraconductrice à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous pour toute valeur de V dans le modèle de Hubbard étendu sur un amas de 4 sites. Il faut pour cela utiliser les bonnes mises à jour pour les

simulations Monte Carlo (voir la sous-section Sous-Sec.G.1.4). Sans ces mises à jour à quatre points [53], la supraconductivité de type s étendu semble aussi stable que la supraconductivité de type d à 4% de dopage aux trous, bien que sa température critique soit inférieure à $T = 1/50$.

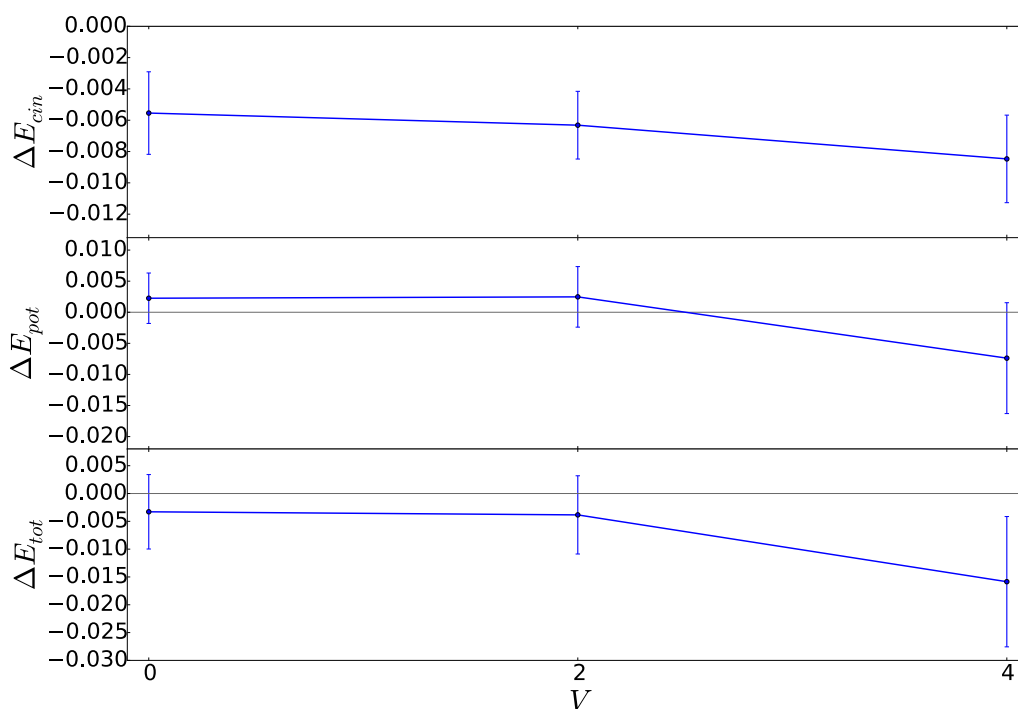


FIGURE 9.25 Différences en énergie cinétique (ΔE_{cin}), en énergie potentielle (ΔE_{pot}) et en énergie totale (soit l'énergie de condensation $E_{cond}^{SC} = \Delta E_{tot}$) entre l'état supraconducteur et l'état normal à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous en fonction de V .

9.3 Rôle de l'antiferromagnétisme à longue portée et lien avec la discussion des crossovers

La théorie de champ moyen dynamique cellulaire décrite dans la section Sec.3.4 ne peut inclure les corrélations à longue portée qu'en brisant explicitement des symétries dans le bain seulement. C'est ce que nous avons fait pour la supraconductivité, mais pas pour l'antiferromagnétisme. On peut ainsi légitimement se poser la question suivante : le fait de ne pas tenir compte des corrélations antiferromagnétiques à longue portée ne remet-il pas en cause tous les travaux de ce chapitre portant sur un mécanisme d'appariement d'origine magnétique ? Pour répondre à cette question, il est nécessaire de faire le pont entre les deux sujets principaux de cette thèse, diamétralement opposés en apparence : le régime de crossovers au-dessus de la transition de Mott à demi-remplissage et la physique du dôme supraconducteur des isolants de Mott dopés aux trous.

Le chapitre Chap.5 nous apprend que le point critique de la transition de Mott se déplace dans le diagramme $T-U$ en fonction de la méthode numérique employée car chaque méthode tient compte des corrélations antiferromagnétiques différemment. Cependant, les différents types de crossovers observés sont qualitativement les mêmes pour tous les amas ayant des nombres de sites de même parité, donc quelle que soit la façon dont on tient compte des corrélations antiferromagnétiques. *A priori*, la même chose peut être affirmée pour la transition de Sordi à dopage fini et l'ensemble des crossovers qui la surplombent [82,83]. Or, cette transition de Sordi et les crossovers qui lui sont associés semblent gouverner les propriétés du dôme supraconducteur. On peut donc très bien s'attendre à ce que le dôme supraconducteur se déplace lorsqu'on considère des amas plus grands, sans pour autant que la physique de ce dôme soit fondamentalement changée !

Résumé

La répulsion coulombienne aux premiers voisins V a des effets antagonistes non triviaux sur la dynamique supraconductrice à $U = 9$ et $t' = 0$. D'un côté, la répulsion V encourage l'appariement à basse fréquence car elle renforce les fluctuations de spin antiferromagnétiques supportant l'appariement supraconducteur à travers $J = 4t^2/(U - V)$. Cependant, la physique liée à J devient moins pertinente à mesure que le dopage aux trous augmente et l'effet bénéfique de V sur l'appariement s'estompe alors. D'un autre côté, V accroît la répulsion coulombienne à haute fréquence et ce, quel que soit le remplissage ou la température du système. La compétition entre ces deux effets mène à deux conséquences directes. Tout d'abord, le paramètre d'ordre supraconducteur φ_{SC} , bien qu'étant généralement plus faible lorsque V augmente, résiste bien mieux à la température à faible dopage mais s'évanouit plus rapidement à fort dopage. Enfin, la température critique T_c augmente avec V à faible dopage mais se voit réduite lorsque V augmente à fort dopage. Le mécanisme d'appariement que nous obtenons est retardé, à cause de la très courte plage de fréquences, $[0, W/16] \equiv [0, J]$, sur laquelle se fait l'appariement supraconducteur pour cette valeur de U . Par ailleurs, les valeurs du rapport Δ_{SC}/T_c que nous obtenons sont significativement plus grandes que les valeurs prédites par la théorie BCS, mais sont en très bel accord avec l'expérience et présentent une certaine universalité, notamment dans le régime de dopages intermédiaires.

En parallèle, V a un effet profond sur les excitations de charge du système. En effet, si V est suffisamment grand par rapport à U (avec $V < U/2$), il devient plus avantageux d'un point de vue énergétique d'occuper doublement des sites du réseau en créant un ordre de charge commensurable à courte portée. Cela se confirme à travers la double occupation qui augmente avec le dopage aux trous pour $V = 4$. Finalement, dans un système où la double occupation est favorisée (sans pour autant permettre de réel ordre de charge), l'émergence d'une supraconductivité de symétrie s étendue, $s + d$, ou $s + id$ est à envisager. Une étude préliminaire montre l'absence de symétrie s étendue à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous pour toute valeur de V .

Conclusion

La supraconductivité non conventionnelle reste de nos jours une des énigmes les plus fascinantes du domaine de la matière condensée, même après presque quatre décennies de recherches expérimentales et théoriques intensives. Cette supraconductivité se distingue en effet par les liens profonds qu'elle développe avec la physique de Mott, contrairement à la supraconductivité conventionnelle qui est directement liée à un état métallique. À ce propos, l'isolant de Mott représente déjà en lui-même un problème fabuleux car il met parfaitement en avant le concept d'émergence et l'effet hautement non trivial des fortes interactions électroniques, globalement négligé jusque dans les années 30. Bien sûr, ce problème se complexifie encore davantage lorsqu'on réalise dans les années 80 que le dopage chimique permet de créer d'excellents supraconducteurs à partir d'isolants de Mott. Ainsi, la compréhension de la supraconductivité non conventionnelle repose sur celles de la physique de Mott et du lien entre cette physique et le mécanisme d'appariement supraconducteur.

La première partie de cette thèse s'est intéressée exclusivement à approfondir notre compréhension de la physique de Mott à demi-remplissage et haute température. L'intérêt pour ce régime de température naît du fait qu'il est bien plus universel que le régime à basse température où repose la transition de Mott. À haute température, c'est en effet un ensemble de crossovers qui prend place, soit un ensemble de changements progressifs dans les propriétés du matériau étudié. De façon similaire au crossover entre un liquide et un gaz dans la phase supercritique d'un fluide, un système demi-rempli peut passer progressivement d'un état métallique à un état isolant lorsque l'interaction coulombienne purement locale du modèle de Hubbard, U , est augmentée. La plupart de ces crossovers ne survivent malheureusement pas à

haute température. Cependant, le crossover séparant le mauvais isolant de l'isolant de Mott, appelé crossover de Mott et caractérisé par une ouverture prononcée du gap de Mott, demeure à toute température. Il donne alors l'occasion de s'intéresser à la température à partir de laquelle toutes les techniques numériques que nous utilisons donnent des résultats similaires quant à l'ouverture du gap de Mott. En général, cette température correspond à l'amplitude de saut aux premiers voisins dans le modèle de Hubbard, t , car elle correspond typiquement à une énergie thermique suffisante pour masquer les détails structuraux du système étudié. Ici, nous avons montré que les crossovers de Mott de la DMFT sur réseau carré, de la CDMFT 2×2 et de la CDMFT avec un amas triangulaire isotrope se confondent vers $T \equiv 0.45 t$, soit à une température plus de deux fois plus basse que la température attendue. Par ailleurs, cette observation nous permet d'aller plus loin pour répondre à la critique que la transition de Mott ne soit pas observable dans la plupart des systèmes non frustrés à cause de l'apparition d'un ordre magnétique ou orbital. En effet, même si la transition de Mott n'est pas observable, elle n'est pas "fausse" dans le sens où elle apparaît dans un état normal qui n'est pas stable à basse température mais qui évolue continuellement vers le bon état normal à haute température, où les crossovers se trouvent. Cette partie est discutée dans le chapitre Chap.5. Certaines pistes restent néanmoins ouvertes ici, notamment dans l'optique d'enrichir la physique étudiée et de se rapprocher de matériaux réels. La piste la plus prometteuse repose sûrement dans l'ajout de la répulsion coulombienne aux premiers voisins V dans le but d'observer ses effets sur la position du point critique de la transition de Mott, sur la survie des crossovers, et sur la température où les lignes de crossovers deviennent identiques, indépendamment de la méthode numérique employée.

Quant à la deuxième partie de cette thèse, elle s'est focalisée sur la possibilité d'accéder à la dynamique supraconductrice à température finie. En effet, le seul fait d'avoir accès à la dynamique supraconductrice à température finie était un défi en soi car la dynamique d'appariement repose principalement sur la fonction spectrale anormale $\mathcal{A}_{an}(\omega)$ qui, contrairement à des fonctions spectrales normales (issues de fonctions de Green construites à partir d'opérateurs conjugués hermitiques l'un de l'autre), change de signe sur $[0, +\infty]$ (ou sur $[-\infty, 0]$). Or, la méthode de prolongement analytique la plus efficace pour des données générées par les algorithmes Monte Carlo quantique, la méthode d'entropie maximale, est incapable

de traiter ce genre de fonction spectrale. Nous avons donc dû développer une façon de contourner ce problème. C'est ainsi qu'est née la méthode MaxEntAux qui définit une fonction de Green auxiliaire construite de sorte qu'elle possède un poids spectral positif et qu'elle s'exprime comme une somme de fonctions de Green normales et de fonctions de Green anormales. Il devient finalement possible d'extraire la fonction spectrale anormale à partir des poids spectraux auxiliaire et normaux. Nous avons par ailleurs généralisé cette méthode à toute symétrie d'appariement possible et à un nombre arbitraire de bandes, avec ou sans symétrie sous inversion spatiale ou sous renversement du temps. Cette partie est discutée dans le chapitre Chap.7.

Enfin, la dernière partie de cette thèse s'est concentrée sur l'étude de la dynamique supraconductrice à température finie, et plus particulièrement sur les effets de la répulsion coulombienne aux premiers voisins V sur la supraconductivité des isolants de Mott dopés aux trous à forte interaction $U = 9 > U_c$. Les simulations CDMFT 2×2 ont pris en compte les cas à $V = 0$, $V = 2$, et $V = 4$, sans frustration magnétique ($t' = 0$). L'objectif principal consistait à obtenir plus d'informations sur le mécanisme d'appariement qui engendrerait la supraconductivité dans les cuprates, sachant que deux mécanismes étaient alors envisageables. Le premier est un appariement *quasi* instantané à haute fréquence issu du modèle $t - J$ où les électrons forment des paires directement par l'intermédiaire de $J = 4t^2/(U - V)$. Le deuxième est un appariement retardé à basse fréquence issu de l'échange de fluctuations de spin antiferromagnétiques. Il s'avère alors que V joue deux rôles antagonistes dans la dynamique d'appariement supraconductrice : il renforce l'appariement retardé à travers J à basse fréquence mais renforce également la répulsion coulombienne à haute fréquence. Comme l'effet bénéfique de V s'estompe à mesure que le dopage aux trous augmente (car J perd de sa pertinence), alors que son effet briseur de paires demeure intact à tout dopage, on se retrouve globalement avec une température critique plus haute à faible dopage et plus basse à fort dopage. Ce résultat est d'autant plus non trivial que le paramètre d'ordre à basse température s'affaiblit lorsque V croît. L'effet briseur de paires de V est également visible sous la forme d'une contribution finie négative à fréquence infinie dans la partie réelle de la self-energy anormale lorsque $V \neq 0$. Cependant, la très courte plage de fréquences sur laquelle se fait l'appariement dans la fonction spectrale anormale (de l'ordre de $[0, W/16] \equiv [0, J]$ à $U = 9$) semble indiquer un mécanisme d'appariement retardé.

En parallèle, les valeurs du rapport Δ_{SC}/T_c que nous obtenons sont significativement plus grandes que les valeurs prédites par la théorie BCS, mais sont en très bel accord avec l'expérience et présentent une certaine universalité, notamment dans le régime de dopages intermédiaires. Enfin, bien qu'étant deux répulsions coulombiennes, U et V entrent en compétition du côté des excitations de charge. En effet, si V est suffisamment grand par rapport à U (avec $V < U/2$), il devient possible d'abaisser l'énergie du système en occupant doublement des sites du réseau cristallin tout en cherchant à créer un ordre de charge commensurable. Cette partie est discutée dans le chapitre Chap.9.

Ce dernier projet a clairement ouvert un très vaste champ de recherche qui peut être complété par bien des manières. Une des pistes les plus prometteuses repose sur l'étude de l'effet des amplitudes de saut t' et t'' sur la température critique T_c , même si le problème de signe représente d'ores et déjà un obstacle rendant cette étude difficile. On pourrait aussi étudier en fonction de V les propriétés de l'état normal où le crossover prolongeant la transition de Sordani à dopage fini semble étroitement dicter la forme du dôme supraconducteur. Il serait également bon de s'intéresser à l'évolution de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle du système au sein de ce dôme (d'autres symétries supraconductrices peuvent être envisagées lorsque $V \neq 0$). Par ailleurs, la périodisation des données (soit leur extension à l'ensemble des vecteurs d'onde de la première zone de Brillouin) permettrait d'étudier la dépendance angulaire des self-energies normale et anormale, ainsi que celle du gap supraconducteur. Finalement, des efforts conséquents devraient permettre d'autoriser pleinement l'étude simultanée de l'antiferromagnétisme, de l'ordre de charge commensurable, et de la supraconductivité. La difficulté principale viendrait du fait que cette étude laisse peu de symétries à utiliser pour simplifier les calculs, ce qui les ralentirait. Quoi qu'il en soit, l'étude de la dynamique supraconductrice à température finie, alliée à l'ajout de la répulsion coulombienne aux premiers voisins V , nous apporte déjà des informations inédites quant à la nature du mécanisme d'appariement supraconducteur et nous promet sûrement encore de très nombreuses surprises !

Annexe A

Moments d'une fonction de Green normale

A.1 Dérivation générale

Le comportement asymptotique à haute fréquence d'une fonction de Green est caractérisé par l'ensemble de ses moments. Pour s'en rendre compte, on peut écrire

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(\vec{K}, i\omega_n) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\vec{K}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \\ &= \frac{1}{i\omega_n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\vec{K}, \omega)}{1 - \frac{\omega}{i\omega_n}} \\ &= \frac{1}{i\omega_n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{K}, \omega) \sum_{m=0}^{+\infty} \left(\frac{\omega}{i\omega_n} \right)^m, \quad (\text{A.1})\end{aligned}$$

soit

$$\boxed{\mathcal{G}(\vec{K}, i\omega_n) = \sum_{m=1}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^{m-1} \mathcal{A}(\vec{K}, \omega) \right] \left(\frac{1}{i\omega_n} \right)^m} \quad (\text{A.2})$$

où

$$\boxed{\mathcal{M}_{\vec{K}}(m) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^{m-1} \mathcal{A}(\vec{K}, \omega)} \quad (\text{A.3})$$

est le $m^{\text{ième}}$ moment de la fonction de Green $\mathcal{G}(\vec{K}, i\omega_n)$. On remarque alors en particulier que

$$\boxed{\mathcal{M}_{\vec{K}}(1) = 1} \quad (\text{A.4})$$

pour toute fonction de Green normale $\mathcal{G}(\vec{K}, i\omega_n)$ de poids spectral normalisé à 1. Quand est-il des autres moments ?

En réintroduisant le spin, on peut utiliser la version normale de l'équation Eq.(7.7),

$$\mathcal{A}_\sigma(\vec{K}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(t), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}, \quad (\text{A.5})$$

dans la définition des moments Eq.(A.3) pour obtenir

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(m) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^{m-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(t), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \frac{1}{(-i)^{m-1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega)^{m-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(t), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \left\langle \left\{ \frac{1}{(-i)^{m-1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega)^{m-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(t), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \left\langle \left\{ \frac{1}{(-i)^{m-1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega)^{m-1} \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(\omega), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \left\langle \left\{ \frac{1}{(-i)^{m-1}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega)^{m-1} \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(\omega) e^{-i\omega t} \right]_{t=0}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \left\langle \left\{ \frac{1}{(-i)^{m-1}} \left[\frac{d^{m-1}}{dt^{m-1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \hat{c}_{\vec{K}\sigma}(\omega) \right]_{t=0}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \left\langle \left\{ \frac{1}{(-i)^{m-1}} \frac{d^{m-1} \hat{c}_{\vec{K}\sigma}}{dt^{m-1}}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

On peut finalement utiliser le fait que

$$\frac{d^m \hat{c}_{\vec{K}\sigma}}{dt^m} = i^m [\hat{\mathcal{H}}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}]_m = (-i)^m [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}]_m \quad (\text{A.7})$$

où on a utilisé la notation du commutateur multiple

$$[\hat{a}, \hat{b}]_0 = \hat{a} \quad [\hat{a}, \hat{b}]_1 = [\hat{a}, \hat{b}] \quad [\hat{a}, \hat{b}]_2 = [[\hat{a}, \hat{b}], \hat{b}] \quad (\text{A.8})$$

pour écrire

$$\mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(m) = \left\langle \left\{ \left[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}} \right]_{m-1}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}. \quad (\text{A.9})$$

Nous allons maintenant être en mesure de calculer explicitement ces moments dans le cadre du modèle de Hubbard étendu. Cependant, il est clair d'après l'équation Eq.(A.9) que nous allons devoir écrire le hamiltonien de Hubbard étendu dans l'espace réciproque pour pouvoir calculer aisément l'ensemble des commutateurs et anticommutateurs nécessaires.

A.2 Réécriture du hamiltonien de Hubbard étendu

Partons du hamiltonien de Hubbard étendu général $\hat{\mathcal{H}}$ présentant un hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{int}$ qui contient toutes les interactions à deux corps :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j \quad (\text{A.10})$$

où $\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu$, et V_{ij} représente le terme d'interaction entre les sites i et j . On a

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} V_{ij} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{j\sigma'} \\ &= \frac{1}{2N^2} \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} V_{ij} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3, \vec{k}_4} e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_i} e^{i(\vec{k}_4 - \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_j} \hat{c}_{\vec{k}_1\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_2\sigma} \hat{c}_{\vec{k}_3\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_4\sigma'} . \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

où N est le nombre de sites dans le réseau cristallin et $\vec{r}_i$ désigne la position du site i . Sachant que toute interaction à deux corps V_{ij} ne dépend que de la position relative des sites i et j , on écrit $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \vec{\delta}$. La somme sur i et j devient alors une somme sur

i et $\vec{\delta}$ et on considère $V_{ij} \equiv V_{\vec{\delta}}$. D'où

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j &= \frac{1}{2N^2} \sum_{i,\vec{\delta},\sigma,\sigma'} V_{\vec{\delta}} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1+\vec{k}_4-\vec{k}_3) \cdot \vec{r}_i} e^{i(\vec{k}_4-\vec{k}_3) \cdot \vec{\delta}} \hat{c}_{\vec{k}_1\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_2\sigma} \hat{c}_{\vec{k}_3\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_4\sigma'} \\
&= \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4} \delta(\underbrace{\vec{k}_2-\vec{k}_1}_{\vec{q}} + \underbrace{\vec{k}_4-\vec{k}_3}_{-\vec{q}}) \sum_{\vec{\delta},\sigma,\sigma'} V_{\vec{\delta}} e^{i(\vec{k}_4-\vec{k}_3) \cdot \vec{\delta}} \hat{c}_{\vec{k}_1\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_2\sigma} \hat{c}_{\vec{k}_3\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_4\sigma'} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'} \left[\frac{1}{2} \sum_{\vec{\delta}} V_{\vec{\delta}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\delta}} \right] \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}\sigma'} \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

en notant $\vec{k}_1 = \vec{k}$ et $\vec{k}_3 = \vec{k}'$. On pose alors

$$\boxed{V(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{\delta}} V_{\vec{\delta}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\delta}}} \quad (\text{A.13})$$

et on introduit l'opérateur densité

$$\boxed{\hat{n}_\sigma(\vec{q}) = \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}} \quad (\text{A.14})$$

pour avoir

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q},\sigma,\sigma'} V(\vec{q}) \hat{n}_\sigma(\vec{q}) \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \quad (\text{A.15})$$

et

$$\boxed{\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\vec{k},\sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q},\sigma,\sigma'} V(\vec{q}) \hat{n}_\sigma(\vec{q}) \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q})} \quad (\text{A.16})$$

Dans le cadre du modèle de Hubbard étendu traditionnel

$$\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu} = \sum_{\vec{k},\sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j, \quad (\text{A.17})$$

on a pour un réseau carré

$$V(\vec{q}) = \frac{U}{2} + V[\cos(q_x) + \cos(q_y)] \quad (\text{A.18})$$

car ce sont les vecteurs $\vec{\delta}_1 = \pm \vec{u}_x, \pm \vec{u}_y$ (où $\vec{u}_\alpha$ est le vecteur unitaire suivant la direction α) qui y relient le site i à ses premiers voisins.

Cette forme va grandement simplifier le calcul des commutateurs et anticommutateurs nécessaires dans la définition des moments Eq.(A.9). Il ne nous reste plus qu'à passer en revue certaines propriétés de l'opérateur densité $\hat{n}_\sigma(\vec{q})$ avant de calculer ces moments.

A.3 Propriétés de l'opérateur densité

On peut tout d'abord relier l'opérateur densité $\hat{n}_\sigma(\vec{q})$ défini à l'équation Eq.(A.14) à l'occupation n_σ de la population de spin σ dans le réseau cristallin :

$$n_\sigma = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \frac{1}{N} \langle \hat{n}_\sigma(\vec{q} = \vec{0}) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} . \quad (\text{A.19})$$

On a bien évidemment $n_{\pm\sigma} = n/2$ lorsqu'aucune population de spin n'est avantagée.

Calculons maintenant quelques commutateurs qui seront utiles pour les prochains calculs. Pour ce faire, nous utiliserons la propriété suivante :

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\} \quad (\text{A.20})$$

pour des opérateurs $\hat{A}$, $\hat{B}$, et $\hat{C}$. On a ainsi

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q})] &= \sum_{\vec{k}} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma'}] \\ &= \sum_{\vec{k}} \underbrace{\{\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger\}}_{\delta(\vec{K}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma'} - \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \underbrace{\{\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma'}\}}_0 \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

et

$$[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q})] = \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} . \quad (\text{A.22})$$

De même,

$$\begin{aligned}
 [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q})] &= \sum_{\vec{k}} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma'}] \\
 &= \sum_{\vec{k}} \underbrace{\{\hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger\}}_0 \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma'} - \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \underbrace{\{\hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma'}\}}_{\delta(\vec{K}-\vec{k}-\vec{q})\delta_{\sigma\sigma'}}}
 \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

et

$$\boxed{[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q})] = -\hat{c}_{\vec{K}-\vec{q}\sigma}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'}}. \quad (\text{A.24})$$

En utilisant le fait que

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}, \quad (\text{A.25})$$

on a enfin

$$\begin{aligned}
 [\hat{n}_\sigma(\vec{q}), \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}')] &= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} [\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'+\vec{q}'\sigma'}] \\
 &= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left(\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger [\hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'+\vec{q}'\sigma'}] + [\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'+\vec{q}'\sigma'}] \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} \right) \\
 &= \sum_{\vec{k}} \left(\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger [\hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}')] + [\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}')] \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} \right). \quad (\text{A.26})
 \end{aligned}$$

D'où

$$[\hat{n}_\sigma(\vec{q}), \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}')] = \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\vec{k}} \left(\hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}'\sigma} - \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}'\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} \right) \quad (\text{A.27})$$

ou encore

$$\boxed{[\hat{n}_\sigma(\vec{q}), \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}')] = 0} \quad (\text{A.28})$$

en changeant l'indexage d'une des sommes sur les vecteurs d'onde.

A.4 Calcul du deuxième moment dans le cadre du modèle de Hubbard étendu ★

Sachant que le premier moment de la fonction de Green normale est égal à la normalisation du poids spectral associé (voir Eq.(A.4)), calculons le moment

$$\mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(2) = \left\langle \left\{ \left[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu} \right], \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \quad (\text{A.29})$$

tiré de l'équation Eq.(A.9) à partir du hamiltonien de Hubbard étendu Eq.(A.16)

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{\vec{k},\sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q},\sigma,\sigma'} V(\vec{q}) \hat{n}_\sigma(\vec{q}) \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \quad (\text{A.30})$$

avec

$$V(\vec{q}) = \frac{U}{2} + V[\cos(q_x) + \cos(q_y)]. \quad (\text{A.31})$$

Nous utiliserons au cours de ces calculs l'ensemble des propriétés rencontrées dans la section Sec.A.3.

Calcul de $[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_0]$

On a

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_0] &= \sum_{\vec{k},\sigma'} \xi_{\vec{k}} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}] \\ &= \sum_{\vec{k},\sigma'} \xi_{\vec{k}} \left(\underbrace{\{\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger\}}_{\delta(\vec{K}-\vec{k}) \delta_{\sigma\sigma'}} \hat{c}_{\vec{k}\sigma'} - \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \underbrace{\{\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}\}}_0 \right) \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

en utilisant l'astuce Eq.(A.20). D'où

$$\boxed{[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_0] = \xi_{\vec{K}} \hat{c}_{\vec{K}\sigma} = (\varepsilon_{\vec{K}} - \mu) \hat{c}_{\vec{K}\sigma}}. \quad (\text{A.33})$$

Calcul de $[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{int}]$

Pour ce calcul, utilisons la relation

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{A.34})$$

pour écrire

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{int}] &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma', \sigma''} V(\vec{q}) [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}) \hat{n}_{\sigma''}(-\vec{q})] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma', \sigma''} V(\vec{q}) \left([\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q})] \hat{n}_{\sigma''}(-\vec{q}) + \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}) [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{n}_{\sigma''}(-\vec{q})] \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma', \sigma''} V(\vec{q}) \left(\delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma''}(-\vec{q}) + \delta_{\sigma\sigma''} \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}-\vec{q}\sigma} \right) \quad (\text{A.35}) \end{aligned}$$

On peut alors manipuler l'indexage des sommes sur les spins et profiter de la parité de $V(\vec{q})$ pour simplifier cette expression :

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{int}] &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma', \sigma''} \left(\delta_{\sigma\sigma'} V(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma''}(-\vec{q}) + \delta_{\sigma\sigma''} V(-\vec{q}) \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \left(\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) + \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \right\} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}, \vec{k}, \sigma'} V(\vec{q}) \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \right\} \quad (\text{A.36}) \end{aligned}$$

Le calcul de cet anticommutateur n'est malheureusement pas si aisé. La relation

$$\{\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\} = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{A.37})$$

donne

$$\begin{aligned}
& \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \right\} \\
&= \underbrace{\left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \right\}}_{\delta(\vec{K}+\vec{q}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'}} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} - \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \left[\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \right] \\
&= \delta(\vec{K}+\vec{q}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\vec{K}\sigma} - 2\hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \tag{A.38}
\end{aligned}$$

où on a utilisé les propriétés d'anticommutation des opérateurs fermioniques pour écrire

$$\begin{aligned}
\left[\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \right] &= \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} - \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \\
&= \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} - \left(-\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \right) . \tag{A.39}
\end{aligned}$$

De même, on a

$$-2\hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} = 2\left(\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger - \delta(\vec{K}+\vec{q}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'} \right) \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} . \tag{A.40}$$

D'où

$$\begin{aligned}
& \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \right\} \\
&= \delta(\vec{K}+\vec{q}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\vec{K}\sigma} + 2\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \\
&\quad - 2\delta(\vec{K}+\vec{q}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} \\
&= 2\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{c}_{\vec{k}\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}\sigma'} - \delta(\vec{K}+\vec{q}-\vec{k})\delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{\vec{K}\sigma} \tag{A.41}
\end{aligned}$$

et

$$\left[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{int} \right] = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) - \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} V(\vec{q}) \right] \hat{c}_{\vec{K}\sigma} . \tag{A.42}$$

Calculons la somme sur les vecteurs d'onde de l'interaction $V(\vec{q})$. Pour ce faire, il suffit d'utiliser le fait que $\vec{q}$ s'écrit

$$\vec{q} = (q_x, q_y) = \left(\frac{2\pi n_x}{N}, \frac{2\pi n_y}{N} \right) \quad \text{avec} \quad (n_x, n_y) \in \left[\left[-\frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1 \right] \right]^2 \tag{A.43}$$

d'après les conditions aux bords périodiques, et la propriété des racines N -ième de

l'unité

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi n}{N}} = 0. \quad (\text{A.44})$$

En effet, on a ainsi d'après la relation Eq.(A.31) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} V(\vec{q}) &= \frac{U}{2} + \frac{V}{N} \sum_{q_x, q_y} [\cos(q_x) + \cos(q_y)] \\ &= \frac{U}{2} + \frac{V}{2N} \sum_{q_x, q_y} (e^{iq_x} + e^{-iq_x} + e^{iq_y} + e^{-iq_y}) \\ &= \frac{U}{2} + \frac{V}{2N} \sum_{n_x, n_y} \left(e^{i\frac{2\pi n_x}{N}} + e^{-i\frac{2\pi n_x}{N}} + e^{i\frac{2\pi n_y}{N}} + e^{-i\frac{2\pi n_y}{N}} \right) \\ &= \frac{U}{2} + \frac{V}{N} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} \left(e^{i\frac{2\pi n}{N}} + e^{-i\frac{2\pi n}{N}} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

On peut alors écrire

$$\sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}-1} e^{i\frac{2\pi n}{N}} = \sum_{m=n+\frac{N}{2}}^{N-1} e^{i\frac{2\pi m}{N}} e^{-i\pi} = - \sum_{m=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi m}{N}} = 0 \quad (\text{A.46})$$

d'après la propriété des racines N -ième de l'unité Eq.(A.44). L'autre somme de l'équation Eq.(A.45) est également nulle car elle est simplement le complexe conjugué de la somme qui la précède. En prenant ces résultats dans l'équation Eq.(A.45), on obtient finalement

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} V(\vec{q}) = \frac{U}{2} \quad (\text{A.47})$$

et

$$\left[\hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{\mathcal{H}}_{int} \right] = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) - \frac{U}{2} \hat{c}_{\vec{K}\sigma} \quad (\text{A.48})$$

en revenant à l'équation Eq.(A.42).

Résultat pour $\mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(2)$

En reprenant les commutateurs Eq.(A.33) et Eq.(A.48), et en les injectant dans la définition du deuxième moment Eq.(A.29), on a

$$\begin{aligned}
& \mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(2) \\
&= (\varepsilon_{\vec{K}} - \mu) \underbrace{\left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle}_{1}^{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&\quad + \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&\quad - \frac{U}{2} \underbrace{\left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}\sigma}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle}_{1}^{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&= (\varepsilon_{\vec{K}} - \mu) - \frac{U}{2} + \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}}. \quad (\text{A.49})
\end{aligned}$$

L'astuce

$$\{\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\} = \hat{A}\{\hat{B}, \hat{C}\} - [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (\text{A.50})$$

nous donne alors

$$\begin{aligned}
& \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \\
&= \underbrace{\left\{ \left[\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \right] \right\}}_{\hat{c}_{\vec{K}\sigma} \delta_{\sigma\sigma'}} + \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \\
&= \delta_{\sigma\sigma'} + \left\{ \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \\
&= \delta_{\sigma\sigma'} + \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \underbrace{\left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}, \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\}}_{\delta(\vec{q})} - \underbrace{\left[\hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right]}_{\hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \delta_{\sigma\sigma'}} \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \\
&= \left(1 - \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right) \delta_{\sigma\sigma'} + \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}) \delta(\vec{q}). \quad (\text{A.51})
\end{aligned}$$

On a ainsi

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}, \sigma'} V(\vec{q}) \left\langle \left\{ \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \hat{n}_{\sigma'}(-\vec{q}), \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&= \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} V(\vec{q}) - \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} V(\vec{q}) \left\langle \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&\quad + \frac{2}{N} V(\vec{q}=\vec{0}) \sum_{\sigma'} \left\langle \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}=\vec{0}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&= U - \frac{U}{N} \sum_{\vec{q}} \left\langle \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&\quad - \frac{2V}{N} \sum_{\vec{q}} [\cos(q_x) + \cos(q_y)] \left\langle \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&\quad + \frac{U+4V}{N} \left\langle \sum_{\sigma'} \hat{n}_{\sigma'}(\vec{q}=\vec{0}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\
&= U - U n_\sigma + (U+4V)n \\
&\quad - \frac{2V}{N} \sum_{\vec{q}} [\cos(q_x) + \cos(q_y)] \left\langle \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \tag{A.52}
\end{aligned}$$

d'après les relations Eq.(A.19), Eq.(A.31), et Eq.(A.47). En remarquant que $n = n_\sigma + n_{-\sigma}$ et en injectant ce résultat dans l'équation Eq.(A.49), on a finalement

$$\boxed{\mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(2) = (\varepsilon_{\vec{K}} - \mu) + U n_{-\sigma} + 4V n - \frac{2V}{N} \sum_{\vec{q}} [\cos(q_x) + \cos(q_y)] \left\langle \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}}} \tag{A.53}$$

On a ici utilisé la convention habituelle concernant le potentiel chimique : prendre $\mu - U/2$ comme nouveau potentiel chimique μ (voir la section Sec.2.8). On peut noter que le cas demi-rempli où $n = 1$ et $\mu = U/2 + 4V$ donne

$$\mathcal{M}_{\vec{K}\sigma}(2) \underset{n=1}{=} \varepsilon_{\vec{K}} - \frac{2V}{N} \sum_{\vec{q}} [\cos(q_x) + \cos(q_y)] \left\langle \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{K}+\vec{q}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \tag{A.54}$$

Annexe B

Caractérisation du crossover de Mott



B.1 Contexte général

Cherchons à caractériser le crossover entre un mauvais isolant et isolant de Mott en cherchant un critère pour l'ouverture du gap de Mott. Le gap de Mott se distingue d'un gap de bande par le fait que la densité d'états se réarrange lorsque le potentiel chimique varie. Il n'y a donc pas de bande rigide. Néanmoins, lorsque le potentiel chimique se trouve dans le gap, on peut supposer que la densité d'états est rigide et on écrit l'occupation d'un site comme

$$n = 2 \iint \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\vec{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A^{loc}(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1}. \quad (\text{B.1})$$

Le facteur 2 vient du spin, $A(\vec{k}, \omega)$ est la fonction spectrale, $\beta \equiv 1/T$ est l'inverse de la température, et $A^{loc}(\omega)$ est la densité d'états locale définie par

$$A^{loc}(\omega) = 2 \iint \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} A(\vec{k}, \omega). \quad (\text{B.2})$$

Si le gap de Mott s'ouvre entre deux énergies, μ_- et μ_+ (avec $\mu_- < \mu < \mu_+$), la densité d'états locale est nulle dans cet intervalle et on obtient

$$n = \int_{-\infty}^{\mu_-} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A^{loc}(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} + \int_{\mu_+}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A^{loc}(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1}. \quad (\text{B.3})$$

Notons que l'énergie de gap est alors $E_g = \mu_+ - \mu_-$. On peut ensuite considérer deux régimes de température. À température nulle, la bande de Hubbard inférieure est pleine et le système est demi-rempli, d'où

$$n = \int_{-\infty}^{\mu_-} \frac{d\omega}{2\pi} A_{T=0}^{loc}(\omega) = 1. \quad (\text{B.4})$$

Maintenant, si $T \ll E_g$, on peut considérer que

$$\int_{-\infty}^{\mu_-} \frac{d\omega}{2\pi} A^{loc}(\omega) \simeq 1 \quad (\text{B.5})$$

et écrire

$$\begin{aligned} n \simeq 1 + \int_{-\infty}^{\mu_-} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} - 1 \right] A^{loc}(\omega) \\ + \int_{\mu_+}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A^{loc}(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Ainsi, on a

$$n \simeq 1 + \int_{-\infty}^{\mu_-} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A^{loc}(\omega)}{e^{-\beta(\omega-\mu)} + 1} + \int_{\mu_+}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A^{loc}(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1}. \quad (\text{B.7})$$

En se rappelant que $\omega - \mu < 0$ dans la première intégrale et que $\omega - \mu > 0$ dans la seconde intégrale, de telles basses températures donnent

$$\begin{aligned}
 n &\simeq 1 + \int_{-\infty}^{\mu_-} \frac{d\omega}{2\pi} A^{loc}(\omega) e^{\beta(\omega-\mu)} \\
 &\quad + \int_{\mu_+}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A^{loc}(\omega) e^{-\beta(\omega-\mu)} \\
 &\simeq 1 + \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} A^{loc}(\omega + \mu_-) e^{\beta(\omega+\mu_--\mu)} \\
 &\quad + \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A^{loc}(\omega + \mu_+) e^{-\beta(\omega+\mu_+-\mu)} .
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

On peut finalement considérer que la densité d'états locale à basse température varie peu sur un intervalle d'énergie $k_B T$ autour de $\mu_{\pm}$ (ce qui est très raisonnable étant donné que $k_B T \ll \mu_{\pm}$ à basse température) et on obtient

$$\begin{aligned}
 n &\simeq 1 + A^{loc}(\mu_-) e^{\beta(\mu_--\mu)} \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} e^{\beta\omega} \\
 &\quad + A^{loc}(\mu_+) e^{-\beta(\mu_+-\mu)} \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-\beta\omega} \\
 &\simeq 1 + \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-\beta\omega} [A^{loc}(\mu_+) e^{-\beta(\mu_+-\mu)} \\
 &\quad - A^{loc}(\mu_-) e^{\beta(\mu_--\mu)}] .
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

On a donc

$$n \simeq 1 + \frac{T}{2\pi} [A^{loc}(\mu_+) e^{-\beta(\mu_+-\mu)} - A^{loc}(\mu_-) e^{\beta(\mu_--\mu)}] . \tag{B.10}$$

On peut également alléger la notation en introduisant $N(\omega) = A^{loc}(\omega)/2\pi$, ce qui donne

$$\boxed{n \simeq 1 + T [N(\mu_+) e^{-\beta(\mu_+-\mu)} - N(\mu_-) e^{\beta(\mu_--\mu)}]} . \tag{B.11}$$

B.2 Cas des systèmes symétriques particule-trou

Dans un système symétrique particule-trou, on a $\mu_{\pm} = \pm U/2 = \pm E_g/2$ et la densité d'états est paire en fréquences. D'où

$$\begin{aligned} n &\simeq 1 + 2T N\left(\frac{E_g}{2}\right) e^{-\beta \frac{E_g}{2}} \sinh\left(\beta \left[\mu - \frac{U}{2}\right]\right) \\ &\simeq 1 + C(T) \sinh\left(\beta \left[\mu - \frac{U}{2}\right]\right) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

où

$$C(T) = 2T N\left(\frac{E_g}{2}\right) e^{-\beta \frac{E_g}{2}} \quad (\text{B.13})$$

et où on a introduit la convention de nos programmes informatiques qui consiste à prendre $\mu - U/2$ au lieu de μ pour le potentiel chimique. L'ajustement de la relation Eq.(B.12) permet d'extraire $C(T)$. On peut ensuite ajuster

$$\ln\left(\frac{\beta C(T)}{2}\right) = -\frac{E_g}{2} \beta + \ln\left(N\left(\frac{E_g}{2}\right)\right) \quad (\text{B.14})$$

pour trouver l'énergie de gap E_g . Plus important encore, ce dernier ajustement est bon seulement tant que le gap est suffisamment ouvert pour une température donnée telle que $E_g \gg T$, ce qui tiendra uniquement à basse température, particulièrement à une température légèrement plus basse que la température d'ouverture du gap. Pour trouver le crossover de Mott, il suffit de trouver la température au-dessus de laquelle l'ajustement n'est plus bon : cela signifiera que le gap est sur le point de se fermer, ce qui peut être vu comme une caractéristique du crossover de Mott.

B.3 Cas des systèmes non symétriques particule-trou

Dans un système non symétrique particule-trou, trouver le crossover de Mott n'est pas si simple. En effet, on doit s'attendre à une occupation n asymétrique autour du potentiel chimique à demi-remplissage $\mu_{\text{half-filling}}$ qui peut aussi fortement dépendre de la température, comme le montre la figure Fig.B.1 pour la CDMFT Triangle.

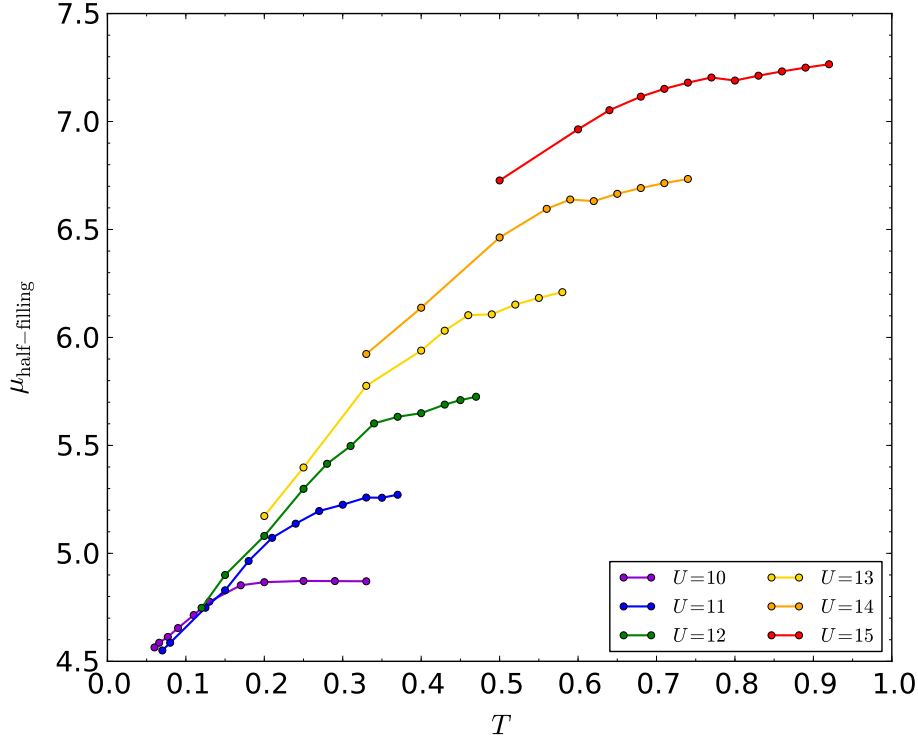


FIGURE B.1 Valeur du potentiel chimique à demi-remplissage obtenue avec la CDMFT Triangle pour une interaction U donnée en fonction de la température.

On n'a pas d'autre choix que de scinder l'équation Eq.(B.11) en deux en négligeant une exponentielle par rapport à l'autre, afin d'isoler les cas dopé aux électrons ($\mu > \mu_{\text{half-filling}}(T)$) et dopé aux trous ($\mu < \mu_{\text{half-filling}}(T)$). Il faut néanmoins se montrer prudent : le potentiel chimique ne peut pas être dans le milieu du gap car les deux exponentielles de l'équation Eq.(B.11) seraient égales, mais il ne peut également pas être proche des bords de bande μ_+ et μ_- car les états de bande commenceraient à être occupés thermodynamiquement et toute la structure de bande se réarrangerait. En gardant ça à l'esprit et en négligeant une exponentielle par rapport à une autre dans l'équation Eq.(B.11), on obtient

$$\begin{aligned} \pm(n-1) &\simeq T N(\mu_{\pm}) e^{\mp\beta\mu_{\pm}} e^{\pm\beta\mu} \\ &\simeq C_{\pm}(T) e^{\pm\beta\mu} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

où

$$C_{\pm}(T) = T N(\mu_{\pm}) e^{\mp\beta\mu_{\pm}}. \quad (\text{B.16})$$

On peut alors faire les mêmes ajustements utilisés dans les systèmes symétriques particule-trou pour trouver μ_+ et μ_- , et ensuite extraire $E_g = \mu_+ - \mu_-$. Encore une fois, il suffit de trouver la température au-dessus de laquelle les ajustements

$$\ln(\beta C_{\pm}(T)) = \mp \mu_{\pm} \beta + \ln N(\mu_{\pm}) \quad (\text{B.17})$$

ne tiennent plus pour trouver le crossover de Mott. Cependant, il se pourrait que deux crossovers distincts existent cette fois-ci, un pour chaque type de dopage.

Annexe C

Calcul de la fonction de gap dans la théorie d'Eliashberg

C.1 Incidence sur les fonctions spectrales normale et anormale locales

Introduisons les *matrices de Pauli*

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (\text{C.1})$$

On commence par exprimer la fonction de Green libre sous forme matricielle :

$$G_0(\vec{k}, i\omega_n) = [i\omega_n I_2 - \xi_{\vec{k}} \sigma^z]^{-1} . \quad (\text{C.2})$$

On définit alors la fonction de Green en interaction *via* l'équation de Dyson

$$G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = G_0^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n) . \quad (\text{C.3})$$

On peut montrer que le prolongement analytique de la self-energy, $\Sigma(\vec{k}, \omega)$, s'écrit comme

$$\Sigma(\vec{k}, \omega) = \omega(1 - Z(\vec{k}, \omega)) I_2 + \chi(\vec{k}, \omega) \sigma^z + \phi(\vec{k}, \omega) \sigma^x \quad (\text{C.4})$$

où Z , χ , et ϕ sont des fonctions paires de ω . $Z(\omega)$ est un poids de renormalisation de quasi-particule, $\chi(\omega)$ vient de l'interaction coulombienne, et $\phi(\omega)$ vient de la supraconductivité. On obtient ainsi

$$G(\vec{k}, \omega) = \frac{\omega Z(\vec{k}, \omega) I_2 + \bar{\xi}(\vec{k}, \omega) \sigma^z + \phi(\vec{k}, \omega) \sigma^x}{\omega^2 Z^2(\vec{k}, \omega) - \bar{\xi}^2(\vec{k}, \omega) - \phi^2(\vec{k}, \omega)} \quad (C.5)$$

où

$$\bar{\xi}(\vec{k}, \omega) = \xi_{\vec{k}} + \chi(\vec{k}, \omega). \quad (C.6)$$

Quelques simplifications sont à faire. Tout d'abord, le terme $\chi(\vec{k}, \omega)$ varie peu en fréquence entre 0 et dix fois la fréquence de Debye ω_D et vient de l'interaction de Coulomb, demeurant inchangée lors de la transition supraconductrice. Il peut donc être inclus comme un simple décalage dans l'énergie $\xi_{\vec{k}}$, elle aussi demeurant inchangée lors de la transition supraconductrice. On va ensuite supposer que

$$Z(\vec{k}, \omega) \simeq Z(\vec{k}_F, \omega) \equiv Z(\omega), \quad (C.7)$$

$$\phi(\vec{k}, \omega) \simeq \phi(\vec{k}_F, \omega) \equiv \phi(\omega). \quad (C.8)$$

Cette approximation est bien justifiée dans la plupart des métaux et alliages où la physique est focalisée autour du niveau de Fermi. On a alors la fonction de Green matricielle

$$G(\vec{k}, \omega) \simeq \frac{\omega Z(\omega) I_2 + \xi_{\vec{k}} \sigma^z + \phi(\omega) \sigma^x}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi_{\vec{k}}^2 - \phi^2(\omega)} \quad (C.9)$$

et les fonctions spectrales normale et anormale en découplant :

$$\mathcal{A}_{norm}(\vec{k}, \omega) \simeq -2 \operatorname{Im} \left(\frac{\omega Z(\omega) + \xi_{\vec{k}}}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi_{\vec{k}}^2 - \phi^2(\omega)} \right) \quad (C.10)$$

et

$$\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) \simeq -2 \operatorname{Im} \left(\frac{\phi(\omega)}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi_{\vec{k}}^2 - \phi^2(\omega)} \right). \quad (C.11)$$

Nous allons maintenant chercher à obtenir les fonctions spectrales normale et anormale locales $\mathcal{A}_{loc}(\omega)$ et $\mathcal{A}_{an}(\omega)$ en intégrant sur $\vec{k}$ les fonctions spectrales que nous venons d'exprimer. Cette intégrale sur $\vec{k}$ va être directement transformée en

une intégrale sur $\xi_{\vec{k}}$ faisant intervenir la densité d'états au niveau de Fermi $N(0)$. Il s'agit d'une approximation similaire à celle des équations Eq.(C.7) et Eq.(C.8) (maintenant, $\xi_{\vec{k}} \simeq \xi_{\vec{k}_F} \equiv \xi$). On a

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{loc}(\omega) &= -2N(0) \operatorname{Im} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\omega Z(\omega) + \xi}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi^2 - \phi^2(\omega)} \right) \\ &= -2N(0) \operatorname{Im} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\omega Z(\omega)}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi^2 - \phi^2(\omega)} \right),\end{aligned}\quad (\text{C.12})$$

$$\mathcal{A}_{an}(\omega) = -2N(0) \operatorname{Im} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\phi(\omega)}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi^2 - \phi^2(\omega)} \right) \quad (\text{C.13})$$

car on peut tout de suite remarquer que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{\xi}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi^2 - \phi^2(\omega)} = 0. \quad (\text{C.14})$$

Calculons donc la quantité

$$\mathcal{Q}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi^2 - \phi^2(\omega)} \quad (\text{C.15})$$

en posant

$$a^2 = \omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega) \quad (\text{C.16})$$

qui dépend implicitement de ω . On a

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{a^2 - \xi^2} \\ &= \frac{1}{2a} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left[\frac{1}{a - \xi} + \frac{1}{a + \xi} \right] \\ &= \frac{1}{2a} [-\ln(a - \xi) + \ln(a + \xi)]_{-\infty}^{+\infty} \\ &= \frac{1}{2a} \left[\ln \left(\frac{a + \xi}{a - \xi} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty}.\end{aligned}\quad (\text{C.17})$$

Notons désormais

$$a = \sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)} = x + iy \quad (\text{C.18})$$

qui dépend implicitement de ω et remarquons que l'on prend ici la racine carrée d'un nombre complexe dont l'argument est compris entre 0 et 2π . On continue le calcul de $\mathcal{Q}(\omega)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}(\omega) &= \frac{1}{2(x+iy)} \left[\ln \left(\frac{(x+\xi)+iy}{(x-\xi)+iy} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \frac{1}{2(x+iy)} \left[\ln \left(\frac{\sqrt{(x+\xi)^2+y^2}}{\sqrt{(x-\xi)^2+y^2}} \right) \right. \\
&\quad \left. \times e^{i \operatorname{Arctan}\left(\frac{y}{x+\xi}\right) - i \operatorname{Arctan}\left(\frac{y}{x-\xi}\right)} \right]_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \frac{1}{2(x+iy)} \left[\ln \left(\frac{\sqrt{(x+\xi)^2+y^2}}{\sqrt{(x-\xi)^2+y^2}} \right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \\
&\quad + \frac{i}{2(x+iy)} \left[\operatorname{Arctan}\left(\frac{y}{x+\xi}\right) - \operatorname{Arctan}\left(\frac{y}{x-\xi}\right) \right]_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \frac{-i\pi}{x+iy}. \tag{C.19}
\end{aligned}$$

D'où

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{\omega^2 Z^2(\omega) - \xi^2 - \phi^2(\omega)} = \frac{-i\pi}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}}. \tag{C.20}$$

Les équations Eq.(C.12) et Eq.(C.13) se simplifient alors en

$$\begin{aligned}
&\mathcal{A}_{loc}(\omega) \\
&= 2\pi N(0) \operatorname{Im} \left(i \frac{\omega Z(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) \\
&= 2\pi N(0) \operatorname{Im} \left(i \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\omega Z(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) + i \operatorname{Im} \left(\frac{\omega Z(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) \right] \right) \\
&= 2\pi N(0) \operatorname{Re} \left(\frac{\omega Z(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) \tag{C.21}
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
& \mathcal{A}_{an}(\omega) \\
&= 2\pi N(0) \operatorname{Im} \left(i \frac{\phi(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) \\
&= 2\pi N(0) \operatorname{Im} \left(i \left[\operatorname{Re} \left(\frac{\phi(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) + i \operatorname{Im} \left(\frac{\phi(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right) \right] \right) \\
&= 2\pi N(0) \operatorname{Re} \left(\frac{\phi(\omega)}{\sqrt{\omega^2 Z^2(\omega) - \phi^2(\omega)}} \right). \tag{C.22}
\end{aligned}$$

En définissant la *fonction de gap*

$$\boxed{\Delta(\omega) = \frac{\phi(\omega)}{Z(\omega)}}, \tag{C.23}$$

on obtient finalement

$$\boxed{\mathcal{A}_{loc}(\omega) = 2\pi N(0) \operatorname{Re} \left(\frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right)} \tag{C.24}$$

et

$$\boxed{\mathcal{A}_{an}(\omega) = 2\pi N(0) \operatorname{Re} \left(\frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}} \right)}. \tag{C.25}$$

C.2 Généralisation de la fonction de gap

On peut généraliser la définition de la fonction de gap en dehors de la théorie d'Eliashberg en partant de la matrice dans le formalisme de Nambu comportant l'inverse des différentes fonctions de Green en fréquence de Matsubara et en calculant son déterminant

$$\operatorname{Det} G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = \begin{vmatrix} i\omega_n - \xi_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n) & -\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n) \\ -\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n) & -[(-i\omega_n) - \xi_{-\vec{k}} - \Sigma(-\vec{k}, -i\omega_n)] \end{vmatrix} \tag{C.26}$$

où on a introduit la *self-energy anormale* $\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n)$. Dans un système invariant sous inversion spatiale, on peut simplifier cette expression :

$$\text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = \begin{vmatrix} i\omega_n - \xi_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n) & -\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n) \\ -\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n) & i\omega_n + \xi_{\vec{k}} + \Sigma(\vec{k}, -i\omega_n) \end{vmatrix}. \quad (\text{C.27})$$

En introduisant les parties paire (*even*) et impaire (*odd*) de la self-energy normale

$$\Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} \left[\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) + \Sigma(\vec{k}, -i\omega_n) \right], \quad (\text{C.28})$$

$$\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{2} \left[\Sigma(\vec{k}, i\omega_n) - \Sigma(\vec{k}, -i\omega_n) \right], \quad (\text{C.29})$$

on obtient

$$\Sigma(\vec{k}, \pm i\omega_n) = \Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n) \pm \Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n), \quad (\text{C.30})$$

et on a ainsi

$$i\omega_n - \xi_{\vec{k}} - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n) = \left(1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n} \right) i\omega_n - \xi_{\vec{k}} - \Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n), \quad (\text{C.31})$$

$$i\omega_n + \xi_{\vec{k}} + \Sigma(\vec{k}, -i\omega_n) = \left(1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n} \right) i\omega_n + \xi_{\vec{k}} + \Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n). \quad (\text{C.32})$$

On peut finalement écrire

$$\begin{aligned} & \text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) \\ &= \left| \left(1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n} \right) i\omega_n I_2 - \left[\xi_{\vec{k}} + \Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n) \right] \sigma^z - \Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n) \sigma^x \right| \\ &= - \left(1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n} \right)^2 \omega_n^2 - \left[\xi_{\vec{k}} + \Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n) \right]^2 - \Sigma_{an}^2(\vec{k}, i\omega_n) \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

en utilisant les différentes propriétés des matrices de Pauli. On peut alors écrire $\text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n)$ sous la forme :

$$\text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = - \left(1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n} \right)^2 \left(\omega_n^2 + \xi^2(\vec{k}, i\omega_n) + \Delta^2(\vec{k}, i\omega_n) \right) \quad (\text{C.34})$$

où

$$\bar{\xi}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{\xi_{\vec{k}} + \Sigma^e(\vec{k}, i\omega_n)}{1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n}} \quad (\text{C.35})$$

et

$$\Delta(i\omega_n) = \frac{\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n)}{1 - \frac{\Sigma^o(\vec{k}, i\omega_n)}{i\omega_n}}. \quad (\text{C.36})$$

Il est possible d'exprimer la fonction de gap $\Delta(\vec{k}, i\omega_n)$ en fonction des fonctions de Green $\mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n)$ et $\mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n)$ au lieu des self-energies. Pour ce faire, il suffit de remarquer que l'expression de $G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n)$ (dont on calcule le déterminant à l'équation Eq.(C.33)) nous donne

$$\mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \xi_{\vec{k}} + \Sigma(\vec{k}, -i\omega_n)}{\text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n)}, \quad (\text{C.37})$$

$$\mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{\Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n)}{\text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n)}. \quad (\text{C.38})$$

On a alors d'après l'équation Eq.(C.36) :

$$\begin{aligned} \Delta(\vec{k}, i\omega_n) &= \frac{2 i\omega_n \Sigma_{an}(\vec{k}, i\omega_n)}{2 i\omega_n - \Sigma(\vec{k}, i\omega_n) + \Sigma(\vec{k}, -i\omega_n)} \\ &= \frac{2 i\omega_n \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n)}{\mathcal{G}(\vec{k}, i\omega_n) - \mathcal{G}(\vec{k}, -i\omega_n)} \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

en utilisant la parité du déterminant $\text{Det } G^{-1}(\vec{k}, -i\omega_n) = \text{Det } G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n)$ (la fonction de gap est généralement paire en fréquences de Matsubara). On obtient ainsi la fonction de gap $\Delta(\vec{k}, \omega)$ par prolongement analytique :

$$\boxed{\Delta(\vec{k}, \omega) = \frac{2\omega \mathcal{F}(\vec{k}, \omega)}{\mathcal{G}(\vec{k}, \omega) - \mathcal{G}^*(\vec{k}, -\omega)}}. \quad (\text{C.40})$$

Le conjugué complexe provient ici du fait que le prolongement analytique donne :

$$\begin{aligned}
 \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \mathcal{G}(\vec{k}, -i\omega_n) &= \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\vec{k}, \omega')}{-i\omega_n - \omega'} \\
 &= \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\vec{k}, \omega')}{-(\omega + i\eta) - \omega'} \\
 &= \left(\int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\vec{k}, \omega')}{(-\omega) - \omega' + i\eta} \right)^* \\
 &= \mathcal{G}^*(\vec{k}, -\omega)
 \end{aligned} \tag{C.41}$$

si la symétrie sous renversement du temps n'est pas brisée et que la fonction spectrale $\mathcal{A}(\vec{k}, \omega')$ est donc réelle. Notons que l'apparente indétermination de la partie réelle de la fonction de gap à $\omega = 0$ peut être "réparée" par un simple prolongement par continuité.

Annexe D

Expression du paramètre d'ordre cumulatif à température finie ★

D.1 Calcul préliminaire

Commençons par calculer la *somme sur les fréquences de Matsubara* suivante :

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+}. \quad (\text{D.1})$$

Pourquoi calculer cette quantité ? En fait, on peut assez facilement montrer qu'en remplaçant la fonction de Green anormale par une fonction de Green normale, on obtiendrait la relation Eq.(2.98)

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \langle \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}(\vec{k}, \omega) f(\omega) \quad (\text{D.2})$$

qui ressemble à la limite à haute fréquence du paramètre d'ordre cumulatif à température nulle. En utilisant la représentation spectrale de la fonction de Green

anormale, on cherche ainsi à calculer

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} &= -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \right] e^{-i\omega_n 0^+} \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \omega} \right] \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega). \quad (\text{D.3}) \end{aligned}$$

Le *théorème des résidus* permet d'évaluer la somme entre crochets. L'astuce est de partir de la fonction

$$z \mapsto \beta \frac{1}{e^{-\beta z} + 1}. \quad (\text{D.4})$$

Cette fonction possède des pôles au niveau des fréquences de Matsubara fermioniques $z = i\omega_n$ car $e^{\beta i\omega_n} = -1$. On montre aisément que son résidu à ces pôles vaut 1 en posant $z = i\omega_n + \delta z$:

$$\delta z \left[\beta \frac{1}{e^{-\beta z} + 1} \right] = \frac{\beta \delta z}{1 - e^{-\beta \delta z}} \xrightarrow{\delta z \rightarrow 0} 1 \quad (\text{D.5})$$

car $e^{-\beta \delta z} \simeq 1 - \beta \delta z$ lorsque $\delta z \rightarrow 0$. On peut alors écrire

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \omega} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1} \frac{dz}{e^{-\beta z} + 1} \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega} \quad (\text{D.6})$$

où le contour orienté $\mathcal{C}_1$ est défini à la figure Fig.D.1 Gauche. En effet, le théorème des résidus nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1} \frac{dz}{e^{-\beta z} + 1} \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega} &= \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \text{Res} \left(z \mapsto \beta \frac{1}{e^{-\beta z} + 1} \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega}, i\omega_n \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \omega} \quad (\text{D.7}) \end{aligned}$$

où $\text{Res}(f, p)$ est le résidu de la fonction f au pôle p , avec

$$\text{Res} \left(z \mapsto \beta \frac{1}{e^{-\beta z} + 1}, i\omega_n \right) = 1. \quad (\text{D.8})$$

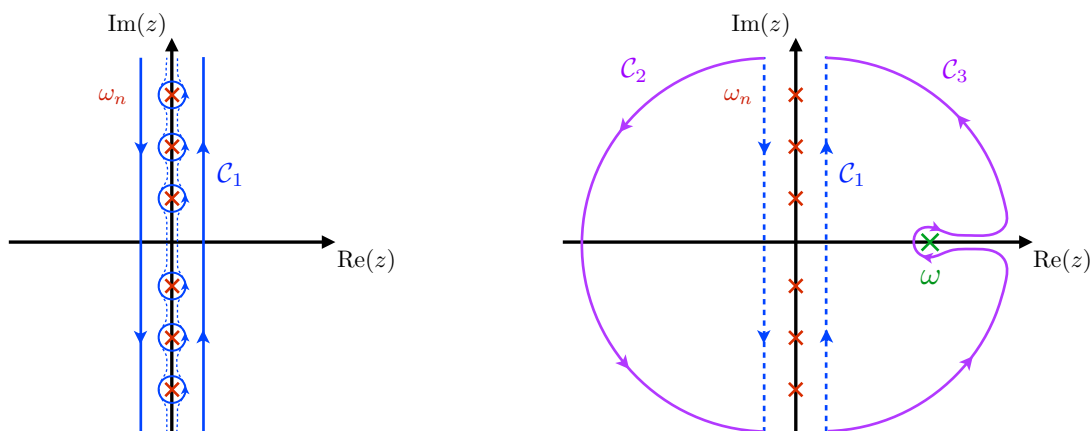


FIGURE D.1 Gauche : Le contour orienté C_1 (qui encercle dans le sens trigonométrique les pôles $z = i\omega_n$ en rouge) peut être progressivement déformé (contour tireté) pour devenir deux droites longeant l'axe imaginaire et se rejoignant en $\text{Im}(z) \rightarrow \pm\infty$. **Droite :** Le contour C_1 précédemment obtenu (en bleu) peut encore être déformé pour devenir le contour $C_2 + C_3$ (en violet) qui est constitué de deux demi-cercles dont on fait tendre le rayon vers l'infini tout en faisant attention à contourner infinitésimalement le pôle ω (en vert). Les deux contours se rejoignent toujours en $\text{Im}(z) \rightarrow \pm\infty$.

On peut déformer le contour orienté C_1 pour avoir le contour $C_2 + C_3$ défini à la figure Fig.D.1 Droite. Nous allons considérer le cas où $0 < \tau < \beta$ car nous finirons par prendre $\tau = 0^+$. Il n'y a pas de contribution des demi-cercles en $\text{Re}(z) \rightarrow \pm\infty$ car

$$e^{-z\tau} \xrightarrow{\text{Re}(z) \rightarrow +\infty} 0 \quad (\text{D.9})$$

et

$$\frac{e^{-z\tau}}{e^{-\beta z} + 1} = \frac{1}{e^{(\tau-\beta)z} + e^{z\tau}} \xrightarrow{\text{Re}(z) \rightarrow -\infty} 0. \quad (\text{D.10})$$

Les contributions provenant des branches longeant l'axe réel avant de rejoindre le pôle ω sur la figure Fig.D.1 Droite s'annulent entre elles parce que leurs orientations opposées et qu'elles sont infinitésimalement proches de l'axe réel $\text{Im}(z) = 0$. Seule la contribution provenant du contour orienté dans le sens horaire autour du pôle ω

survit. On obtient alors

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \omega} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3} \frac{dz}{e^{-\beta z} + 1} \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega} \\
 &= -\text{Res} \left(z \mapsto \frac{1}{e^{-\beta z} + 1} \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega}, \omega \right) \\
 &= -\frac{e^{-\omega\tau}}{e^{-\beta\omega} + 1}.
 \end{aligned} \tag{D.11}$$

Le signe $-$ devant le résidu provient de l'orientation horaire du contour $\mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3$ autour du pôle ω . En prenant $\tau = 0^+$, on a finalement

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \omega} = \frac{-1}{e^{-\beta\omega} + 1} = -f(-\omega) \tag{D.12}$$

où $f(\omega) = (1 + e^{\beta\omega})^{-1}$ est la distribution de Fermi-Dirac. L'équation Eq.(D.3) donne ainsi :

$$\boxed{-\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) f(-\omega)} \tag{D.13}$$

D.2 Lien avec le paramètre d'ordre cumulatif

Deux propriétés nous assurent que nous sommes sur la bonne voie pour trouver le paramètre d'ordre cumulatif à température finie. Tout d'abord, on peut remarquer que la limite à température nulle

$$\boxed{-\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} \xrightarrow{T \rightarrow 0} I_F(\vec{k}, +\infty) = \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega) = \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}}^{T=0}} \tag{D.14}$$

est en accord avec la limite à haute fréquence du paramètre d'ordre cumulatif à température nulle Eq.(7.12). Maintenant, vérifions que cette relation tient également à température finie. Nous pourrions montrer que la fonction de Green anormale à

température finie s'exprime dans la représentation de Lehmann comme

$$\mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,m'} e^{-\beta E_m} \frac{\langle m | \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} | m' \rangle \langle m' | \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} | m \rangle}{i\omega_n + E_m - E_{m'}} [1 + e^{-\beta(E_{m'} - E_m)}] . \quad (\text{D.15})$$

On a alors

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} \\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,m'} e^{-\beta E_m} \langle m | \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} | m' \rangle \langle m' | \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} | m \rangle [1 + e^{-\beta(E_{m'} - E_m)}] \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - (E_{m'} - E_m)} . \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

L'équation Eq.(D.12) nous donne enfin

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,m'} e^{-\beta E_m} \langle m | \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} | m' \rangle \langle m' | \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} | m \rangle \quad (\text{D.17})$$

ou encore

$$\boxed{-\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}(\vec{k}, i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^+} = \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}^{T \neq 0}} . \quad (\text{D.18})$$

On peut noter que ce résultat est aussi une conséquence directe de la définition de $\mathcal{F}(\vec{k}, \tau)$ pour $\tau = 0^+$.

Tous les calculs précédents nous permettent de définir le *paramètre d'ordre cumulatif à température finie* sous la forme

$$\boxed{\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) = \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathcal{A}_{an}(\vec{k}, \omega') f(-\omega')} . \quad (\text{D.19})$$

En effet, les équations Eq.(D.13), Eq.(D.14) et Eq.(D.18) nous assurent que :

$$\boxed{\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) \xrightarrow{T \rightarrow 0} I_F(\vec{k}, \omega)} , \quad (\text{D.20})$$

$$\boxed{\mathcal{I}_{\mathcal{F}}(\vec{k}, \omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow +\infty} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}^{T \neq 0}} . \quad (\text{D.21})$$

Annexe E

Expression de l'énergie de condensation pour la CDMFT

E.1 Expression de l'énergie cinétique

Dans le cadre de la CDMFT, le réseau cristallin est découpé en amas de taille égale. Un amas est ensuite isolé pour le coupler à un bain d'électrons non interagissants. Ce problème d'impureté quantique est décrit par le hamiltonien d'impureté d'Anderson pour la CDMFT Eq.(3.23).

Avant même d'isoler un amas en particulier, associons i et j aux sites d'un amas, et $\vec{r}$ et $\vec{r}'$ à la position de l'amas. L'énergie cinétique totale par site est alors donnée par

$$\begin{aligned} E_{cin} &= \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{i,j} \sum_{\vec{r},\vec{r}'} t_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') \langle \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{d}_{j\sigma}(\vec{r}') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \\ &= \frac{2}{N} \sum_{i,j} \sum_{\vec{r},\vec{r}'} t_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') \langle \hat{d}_i^{\dagger}(\vec{r}) \hat{d}_j(\vec{r}') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

en omettant simplement le spin. La symétrie de la matrice de saut permet de ne pas avoir à rajouter le conjugué hermitique de $t_{ij}(\vec{r} - \vec{r}')$. En utilisant la définition de la

fonction de Green, ceci devient

$$\begin{aligned}
 E_{cin} &= \frac{2}{N} \sum_{i,j} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} t_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') \left[\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \mathcal{G}_{ji}(\vec{r} - \vec{r}', i\omega_n) \right] \\
 &= \frac{2}{N\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} t_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') \mathcal{G}_{ji}(\vec{r} - \vec{r}', i\omega_n). \quad (E.2)
 \end{aligned}$$

La transformée de Fourier sur les positions d'amas donne

$$E_{cin} = \frac{2}{N\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \sum_{\vec{k}} t_{ij}(\vec{k}) \mathcal{G}_{ji}(\vec{k}, i\omega_n). \quad (E.3)$$

La définition de l'inverse de la fonction de Green réseau

$$\mathcal{G}_{ij}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = i\omega_n - t_{ij}(\vec{k}) + \mu - \Sigma_{ij}(i\omega_n) \quad (E.4)$$

permet alors d'écrire

$$\begin{aligned}
 E_{cin} &= \frac{2}{N\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \sum_{\vec{k}} \left[i\omega_n + \mu - \Sigma_{ij}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{ij}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) \right] \mathcal{G}_{ji}(\vec{k}, i\omega_n) \\
 &= \frac{2}{N\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \left[\sum_{i,j} \sum_{\vec{k}} \left[(i\omega_n + \mu - \Sigma_{ij}(i\omega_n)) \mathcal{G}_{ji}(\vec{k}, i\omega_n) \right] - \sum_i \sum_{\vec{k}} 1 \right] \quad (E.5)
 \end{aligned}$$

où on a utilisé le simple produit de matrice $\sum_j \mathcal{G}_{ij}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{ji}(\vec{k}, i\omega_n) = 1$.

Comme fait précédemment à l'équation Eq.(3.27), on définit la fonction de Green projetée sur l'amas par

$$\mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\vec{k}} \mathcal{G}_{ji}(\vec{k}, i\omega_n) \quad (E.6)$$

pour réécrire l'expression de l'énergie cinétique sous la forme

$$E_{cin} = \frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \left[\sum_{i,j} \left[(i\omega_n + \mu - \Sigma_{ij}(i\omega_n)) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) \right] - \sum_i 1 \right] \quad (E.7)$$

où on a utilisé le fait que $\sum_{\vec{k}} 1 = N/N_c$. La relation d'autocohérence de la CDMFT impose que la fonction de Green projetée sur l'amas soit égale à la fonction de Green de l'amas :

$$\mathcal{G}_{ij}^{amas-1}(i\omega_n) = i\omega_n - t_{ij}^{amas} + \mu - \Gamma_{ij}(i\omega_n) - \Sigma_{ij}(i\omega_n) \quad (\text{E.8})$$

où on a introduit le terme de saut intra-amas t_{ij}^{amas} et la fonction d'hybridation $\Gamma_{ij}(i\omega_n)$ prenant en compte l'effet moyen du bain électronique sur l'amas. D'où

$$\begin{aligned} & E_{cin} \\ &= \frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \left[\sum_{i,j} [(\mathcal{G}_{ij}^{amas-1}(i\omega_n) + t_{ij}^{amas} + \Gamma_{ij}(i\omega_n)) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n)] - \sum_i 1 \right] \\ &= \frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \Gamma_{ij}(i\omega_n) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) \\ &\quad + \frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} t_{ij}^{amas} \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n). \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

Nous montrerons dans la section Sec.F.1 que le premier terme est relié à l'ordre moyen du développement en puissances de la fonction d'hybridation au sein du solveur d'impureté par expansion en hybridation (CT-HYB), noté $\langle k \rangle$, via la relation

$$\boxed{\frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \Gamma_{ij}(i\omega_n) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) = -\frac{\langle k \rangle}{N_c\beta}}. \quad (\text{E.10})$$

Quant au deuxième terme, il peut être simplifié en prenant la transformée de Fourier sur les sites de l'amas pour donner

$$\begin{aligned} & \frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} t_{ij}^{amas} \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) \\ &= \frac{2}{N_c\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{\vec{K}} t_{\vec{K}}^{amas} \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) \\ &= \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} t_{\vec{K}}^{amas} \left[\frac{2}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

En effet, un calcul similaire à celui de l'annexe Ann.D montrerait que

$$\boxed{\frac{2}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) = n_{\vec{K}}^{amas}} \quad (\text{E.12})$$

où $n_{\vec{K}}^{amas}$ est l'occupation de l'orbitale $|\vec{K}\rangle$ au sein de l'amas (le facteur 2 prend en compte la sommation sur les spins). Nous avons montré à l'équation Eq.(2.98) que ce genre d'occupation était relié à la fonction spectrale normale en $\vec{K}$, notée $\mathcal{A}(\vec{K}, \omega)$. On a donc ici :

$$n_{\vec{K}}^{amas} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) f(\omega) \quad (\text{E.13})$$

où $\mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega)$ est la fonction spectrale normale en $\vec{K}$ sur l'amas. Ainsi :

$$\frac{2}{N_c \beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} t_{ij}^{amas} \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} t_{\vec{K}}^{amas} n_{\vec{K}}^{amas}, \quad (\text{E.14})$$

et on a finalement

$$\boxed{E_{cin} = -\frac{\langle k \rangle}{N_c \beta} + \frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} t_{\vec{K}}^{amas} n_{\vec{K}}^{amas}}. \quad (\text{E.15})$$

Nous montrerons dans les sections Sec.F.2 et Sec.F.3 comment calculer de façon pratique $t_{\vec{K}}^{amas}$ et $n_{\vec{K}}^{amas}$.

E.2 Expression de l'énergie potentielle avec répulsion coulombienne aux premiers voisins ★

L'énergie potentielle par site peut être écrite sous la forme générale

$$E_{pot} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \frac{V_{ij}}{2} \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard}^{étendu}} \quad (\text{E.16})$$

où V_{ij} représente le terme d'interaction coulombienne entre les sites i et j . En se limitant aux interactions U et V , on obtient

$$E_{pot} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \frac{U}{2} \delta_{ij} \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} + \frac{1}{N} \sum_{i,\delta} \frac{V}{2} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \quad (\text{E.17})$$

où $i + \delta$ représente la position des sites premiers voisins du site i .

Le terme proportionnel à U donne ainsi

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_{i,j} \frac{U}{2} \delta_{ij} \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{U}{2} \langle \hat{n}_i \hat{n}_i \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{U}{2} \langle (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow})(\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{U}{2} \langle 2 \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \\ &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{U}{2} \left[2 \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} + \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \right] \\ &= U \left[\frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \right] + \frac{U}{2} \left[\frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.18})$$

où on a utilisé le fait que $\hat{n}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma}$ pour des fermions. On reconnaît alors l'occupation

$$n = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \quad (\text{E.19})$$

et la double occupation

$$D = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} . \quad (\text{E.20})$$

Le deuxième terme de l'équation Eq.(E.18), $Un/2$, va être directement inclus dans le potentiel chimique incorporé dans l'énergie cinétique (voir la section Sec.2.8) et on

se retrouve donc simplement avec

$$\boxed{\frac{1}{N} \sum_{i,j} \frac{U}{2} \delta_{ij} \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} = UD} . \quad (\text{E.21})$$

Quant au terme proportionnel à V dans l'équation Eq.(E.17), il faut faire attention. En effet, dans le cadre de la CDMFT, il est nécessaire, comme dans la section Sec.8.2, de séparer les interactions intra-amas des interactions inter-amas en opérant une approximation de Hartree. En suivant le hamiltonien d'interaction inter-amas Eq.(8.14), on obtient

$$\frac{1}{N} \sum_{i,\delta} \frac{V}{2} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{Hubbard}^{étendu}} \simeq \frac{V}{2N_c} \sum_{i,\delta} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}} + 4Vn^2 \quad (\text{E.22})$$

où on a introduit le hamiltonien d'amas $\hat{\mathcal{H}}_{amas}$ du hamiltonien d'impureté d'Anderson $\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}$ pour la CDMFT Eq.(3.23). On peut noter que, contrairement à la partie intra-amas de l'énergie potentielle liée à V ,

$$\frac{V}{2N_c} \sum_{i,\delta} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}} , \quad (\text{E.23})$$

la partie inter-amas de cette énergie potentielle provient du hamiltonien d'interaction inter-amas Eq.(8.14) qui évitait déjà tout double comptage des interactions, de sorte que l'ajout d'un facteur multiplicatif de 1/2 est alors inutile pour cette partie.

Les quantités

$$\sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}} = 4D \quad \text{et} \quad \sum_{i,\delta} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}} \quad (\text{E.24})$$

étant mesurées par le programme que nous utilisons (voir la section Sec.G.2), il est très simple d'en extraire l'énergie potentielle totale

$$\boxed{E_{pot} = UD + 4Vn^2 + \frac{V}{2N_c} \sum_{i,\delta} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}} . \quad (\text{E.25})$$

E.3 Expression de l'énergie de condensation

L'énergie de condensation représente simplement la différence entre l'énergie totale de l'état supraconducteur et l'énergie totale de l'état normal, toutes deux mesurés aux mêmes température T , dopage δ , et interactions U et V . En notant

$$E_{tot}^N = E_{cin}^N + E_{pot}^N \quad (\text{E.26})$$

et

$$E_{tot}^{SC_\lambda} = E_{cin}^{SC_\lambda} + E_{pot}^{SC_\lambda} \quad (\text{E.27})$$

les énergies totales de l'état normal et de l'état supraconducteur de symétrie λ , respectivement, on obtient l'énergie de condensation $E_{cond}^{SC_\lambda}$ liée à cette supraconductivité *via*

$$\boxed{E_{cond}^{SC_\lambda} = E_{tot}^{SC_\lambda} - E_{tot}^N}. \quad (\text{E.28})$$

Annexe F

Détails de calcul concernant l'expression de l'énergie cinétique

F.1 Lien avec l'ordre de développement en puissances de la fonction d'hybridation

Démontrons la relation Eq.(E.10) liant la contribution de la fonction d'hybridation dans l'énergie cinétique à l'ordre moyen de développement en puissances de la fonction d'hybridation, $\langle k \rangle$. Pour ce faire, partons du hamiltonien d'impureté d'Anderson Eq.(3.23) pour la CDMFT :

$$\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas} = \underbrace{\sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{j\sigma}}_{\hat{\mathcal{H}}_{amas}} + U \underbrace{\sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}}_{\hat{\mathcal{H}}_{bain}} + \underbrace{\sum_\gamma \varepsilon_\gamma^{bain} \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{c}_\gamma}_{\hat{\mathcal{H}}_{bain}} + \underbrace{\sum_{i,\gamma,\sigma} \left(V_{i\gamma} \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_\gamma + V_{i\gamma}^* \hat{c}_\gamma^\dagger \hat{d}_{i\sigma} \right)}_{\hat{\mathcal{H}}_{hyb}} \quad (\text{F.1})$$

où on a réintroduit explicitement le degré de liberté de spin. Nous allons voir que $\langle k \rangle$ est relié à la valeur moyenne de $\hat{\mathcal{H}}_{hyb}$. La valeur moyenne $\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}}$ va typiquement dépendre de la moyenne

$$\left\langle \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_\gamma \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{c}_\gamma(\tau = 0^-) \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}}, \quad (\text{F.2})$$

et il devient donc très intuitif de travailler avec la fonction de Green suivante :

$$\boxed{\mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau) = - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \hat{c}_{\gamma}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}}} . \quad (\text{F.3})$$

où on a mis en évidence le fait que cette fonction de Green ne dépend pas du spin dans les cas qui nous intéressent ici. On a ainsi

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} &= \sum_{i,\gamma,\sigma} \left(V_{i\gamma} \langle \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\gamma} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} + V_{i\gamma}^* \langle \hat{c}_{\gamma}^{\dagger} \hat{d}_{i\sigma} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} \right) \\ &= \sum_{i,\gamma,\sigma} \left(V_{i\gamma} \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau = 0^-) + V_{i\gamma}^* \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb*}(\tau = 0^-) \right) . \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

On peut maintenant utiliser les équations du mouvement pour trouver une expression de $\mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau = 0^-)$. On a

$$\frac{\partial \hat{c}_{\gamma}}{\partial \tau} = [\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}, \hat{c}_{\gamma}] = [\hat{\mathcal{H}}_{bain} + \hat{\mathcal{H}}_{hyb}, \hat{c}_{\gamma}] = -\varepsilon_{\gamma}^{bain} \hat{c}_{\gamma} - \sum_i V_{i\gamma}^* \hat{d}_{i\sigma} , \quad (\text{F.5})$$

d'où

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}}{\partial \tau}(\tau) &= \frac{\partial}{\partial \tau} \left[-\theta(\tau) \langle \hat{c}_{\gamma}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} + \theta(-\tau) \langle \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\gamma}(\tau) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} \right] \\ &= -\delta(\tau) \langle \hat{c}_{\gamma}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} - \theta(\tau) \left\langle \frac{\partial \hat{c}_{\gamma}}{\partial \tau}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} \\ &\quad -\delta(\tau) \langle \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\gamma}(\tau) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} + \theta(-\tau) \left\langle \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \frac{\partial \hat{c}_{\gamma}}{\partial \tau}(\tau) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} \\ &= -\delta(\tau) \left\langle \left\{ \hat{c}_{\gamma}(\tau), \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \frac{\partial \hat{c}_{\gamma}}{\partial \tau}(\tau) \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} . \end{aligned} \quad (\text{F.6})$$

Le premier terme est nul car la seule contribution en temps vient de $\tau = 0$ à cause de la distribution de Dirac et il ne reste ainsi que le deuxième terme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}}{\partial \tau}(\tau) &= - \left\langle \hat{\mathcal{T}}_{\tau} \left[-\varepsilon_{\gamma}^{bain} \hat{c}_{\gamma}(\tau) - \sum_j V_{j\gamma}^* \hat{d}_{j\sigma}(\tau) \right] \hat{d}_{i\sigma}^{\dagger} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} \\ &= -\varepsilon_{\gamma}^{bain} \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau) - \sum_j V_{j\gamma}^* \mathcal{G}_{ji}^{amas}(\tau) . \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

Le passage aux fréquences de Matsubara permet d'avoir

$$-i\omega_n \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(i\omega_n) = -\varepsilon_{\gamma}^{bain} \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(i\omega_n) - \sum_j V_{j\gamma}^* \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n), \quad (\text{F.8})$$

d'où

$$\mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\gamma}^{bain}} \sum_j V_{j\gamma}^* \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) \quad (\text{F.9})$$

et

$$\mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau = 0^-) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\gamma}^{bain}} \sum_j V_{j\gamma}^* \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n). \quad (\text{F.10})$$

Revenons au terme typique dont dépendait $\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}}$ dans l'équation Eq.(F.4), en y injectant l'expression que nous venons de trouver :

$$\sum_{i,\gamma,\sigma} V_{i\gamma} \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau = 0^-) = \frac{2}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j,\gamma} \frac{V_{i\gamma} V_{j\gamma}^*}{i\omega_n - \varepsilon_{\gamma}^{bain}} \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n). \quad (\text{F.11})$$

On peut alors définir la fonction d'hybridation comme à l'équation Eq.(3.24) :

$$\Gamma_{ij}(i\omega_n) = \sum_{\gamma} \frac{V_{i\gamma} V_{j\gamma}^*}{i\omega_n - \varepsilon_{\gamma}^{bain}}, \quad (\text{F.12})$$

et obtenir, d'après l'équation Eq.(F.4), que la moyenne $\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}}$ est égale à la somme de

$$\sum_{i,\gamma,\sigma} V_{i\gamma} \mathcal{G}_{\gamma i}^{hyb}(\tau = 0^-) = \frac{2}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \Gamma_{ij}(i\omega_n) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) \quad (\text{F.13})$$

et de son complexe conjugué. Étant donné que la symétrie sous renversement du temps n'est pas brisée, toute quantité physique peut être prise réelle. En d'autres mots, on a

$$\boxed{\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} = \frac{4}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \Gamma_{ij}(i\omega_n) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n)}. \quad (\text{F.14})}$$

Par invariance sous translation dans le temps, on a

$$\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}}. \quad (\text{F.15})$$

En posant le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\mathcal{H}}_{amas} + \hat{\mathcal{H}}_{bain}$, le développement en puissances du hamiltonien d'hybridation dans la représentation d'interaction, similaire à celui de l'équation Eq.(3.43), donne le rapport $\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas}} / [\mathcal{Z}_0 / \mathcal{Z}_{AIM}^{amas}]$ sous la forme suivante :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(-1)^{2k+1}}{(2k+1)!} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_{2k+1} \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau) \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_{2k+1}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}. \quad (\text{F.16})$$

On a ici mis en valeur le fait que seule la moyenne d'un nombre pair de hamiltoniens d'hybridation peut être non nulle. Cela vient du fait que les moyennes du type $\langle \hat{d}_{i\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_\gamma(\tau') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}$ vont être parfaitement factorisées par $\hat{\mathcal{H}}_0$ pour donner $\langle \hat{d}_{i\sigma}^\dagger(\tau) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \langle \hat{c}_\gamma(\tau') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} = 0$. L'expression Eq.(F.16) peut alors être écrite comme

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(2k+2)(-1)^{2k+2}}{(2k+2)!} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_{2k+1} \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau) \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_{2k+1}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}. \quad (\text{F.17})$$

On peut maintenant réindicer la somme

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{(2k)(-1)^{2k}}{(2k)!} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_{2k-1} \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau) \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_1) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_{2k-1}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \quad (\text{F.18})$$

et "décaler" les indices des temps imaginaires

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{(2k)(-1)^{2k}}{(2k)!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \cdots \int_0^\beta d\tau_{2k} \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_1) \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_2) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_{2k}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \quad (\text{F.19})$$

pour faire clairement apparaître la moyenne de $2k$ (à un facteur $-\beta \mathcal{Z}_0 / \mathcal{Z}_{AIM}^{amas}$ près) :

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{2k}}{(2k)!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \cdots \int_0^\beta d\tau_{2k} \left\langle \hat{\mathcal{T}}_\tau (2k) \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_1) \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_2) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{hyb}(\tau_{2k}) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}. \quad (\text{F.20})$$

L'équation Eq.(F.15) donne ainsi

$$\boxed{\langle \hat{\mathcal{H}}_{hyb} \rangle \hat{\mathcal{H}}_{AIM}^{amas} = -\frac{2\langle k \rangle}{\beta}}, \quad (\text{F.21})$$

et la relation Eq.(F.14) permet enfin d'établir le fait que

$$\boxed{\frac{2}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \sum_{i,j} \Gamma_{ij}(i\omega_n) \mathcal{G}_{ji}^{amas}(i\omega_n) = -\frac{\langle k \rangle}{\beta}}, \quad (\text{F.22})$$

dont est très simplement dérivé le résultat Eq.(E.10).

F.2 Calcul de $t_{\vec{K}}^{amas}$

Partons de la définition de la transformée de Fourier du terme de saut intra-amas :

$$t_{\vec{K}}^{amas} = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j} e^{-i\vec{K} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} t_{ij}^{amas}. \quad (\text{F.23})$$

Si on garde le site i fixe et qu'on somme sur les sites j , on devra obtenir le même résultat quel que soit l'un des quatre sites i initialement choisi, par invariance sous rotation de l'amas. Prenons la numérotation suivante pour les sites de l'amas :

$$\begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 4 & 3 \end{array} . \quad (\text{F.24})$$

En utilisant le fait que

$$t_{11}^{amas} = 0 \quad t_{12}^{amas} = -t \quad t_{13}^{amas} = 0 \quad t_{14}^{amas} = -t, \quad (\text{F.25})$$

on a alors

$$t_{\vec{K}}^{amas} = \begin{cases} -2t & \text{si } \vec{K} = (0, 0) \\ 0 & \text{si } \vec{K} = (\pi, 0) \\ 0 & \text{si } \vec{K} = (0, \pi) \\ 2t & \text{si } \vec{K} = (\pi, \pi) \end{cases} \quad (\text{F.26})$$

et

$$\frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}} t_{\vec{K}}^{amas} n_{\vec{K}}^{amas} = -\frac{2t}{N_c} (n_{(0,0)}^{amas} - n_{(\pi,\pi)}^{amas}) . \quad (\text{F.27})$$

F.3 Calcul de $n_{\vec{K}}^{amas}$

Bien qu'il soit possible de mesurer directement l'occupation de l'orbitale $\vec{K}$,

$$n_{\vec{K}}^{amas} = \sum_{\sigma} \left\langle \hat{c}_{\vec{K}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{K}\sigma} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_{amas}} , \quad (\text{F.28})$$

à partir des simulations en Monte Carlo quantique. Nous allons ici traiter le cas où il faut vraiment l'évaluer à partir d'une fonction de Green. Nous avons défini l'occupation de l'orbitale $\vec{K}$ de l'amas sous la forme d'une somme sur les fréquences de Matsubara avec un facteur de convergence $e^{-i\omega_n 0^-}$ à l'équation Eq.(E.12). Cependant, cette définition pose deux problèmes dans le cas pratique de la physique numérique.

Tout d'abord, on ne peut pas avoir de limite 0^- parfaite au sein d'un programme et une erreur va donc survenir lors du choix d'un réel η fixé pour traduire cette limite. Ensuite, on demande rarement assez de fréquences de Matsubara pour que la somme sur les fréquences de Matsubara définissant $n_{\vec{K}}^{amas}$ prenne en compte correctement le comportement asymptotique de $\mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n)$, qui décroît seulement comme $1/i\omega_n$. Après avoir explicité un peu ce comportement asymptotique, nous verrons qu'il existe néanmoins des techniques pour supprimer ou amoindrir ces problèmes.

Comment se débarrasser du facteur de convergence

Commençons par écrire l'occupation par spin de l'orbitale $\vec{K}$:

$$n_{\vec{K}\sigma}^{amas} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) f(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (\text{F.29})$$

La normalisation de la fonction spectrale normale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) = 1 \quad (\text{F.30})$$

permet de réécrire la relation précédente sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} n_{\vec{K}\sigma}^{amas} &= \frac{1}{2} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) \left[\frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} - \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{1}{2} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) \left[f(\omega) - \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) [f(\omega) - (1 - f(\omega))] . \end{aligned} \quad (\text{F.31})$$

On peut alors aller plus loin en utilisant les sommes sur les fréquences de Matsubara

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n - \omega} = f(\omega) \quad \text{et} \quad \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \omega} = 1 - f(\omega) \quad (\text{F.32})$$

pour avoir

$$\begin{aligned} n_{\vec{K}\sigma}^{amas} &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[\frac{e^{-i\omega_n 0^-}}{i\omega_n - \omega} + \frac{e^{-i\omega_n 0^+}}{i\omega_n - \omega} \right] \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{A}^{amas}(\vec{K}, \omega) \left[\frac{1}{i\omega_n - \omega} + \frac{1}{-i\omega_n - \omega} \right] \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} [\mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(-i\omega_n)] \\ &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n 0^-} \text{Re } \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) . \end{aligned} \quad (\text{F.33})$$

grâce à la représentation spectrale de la fonction de Green de l'amas. Or, cette nouvelle somme sur les fréquences de Matsubara converge même sans l'aide du facteur de convergence. On peut donc tout simplement l'omettre. Par ailleurs, la décomposition de la représentation spectrale de la fonction de Green en partie réelle et partie imaginaire en absence de brisure de la symétrie sous renversement du temps permet de jouer sur la parité en $i\omega_n$ de la partie réelle pour simplifier davantage la relation précédente :

$$n_{\vec{K}\sigma}^{amas} = \frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \text{Re } \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n). \quad (\text{F.34})$$

L'occupation totale de l'orbitale $\vec{K}$ est obtenue en sommant tout simplement sur les spins :

$$n_{\vec{K}}^{amas} = \sum_{\sigma} n_{\vec{K}\sigma}^{amas} = 2 \left[\frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \text{Re } \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) \right]. \quad (\text{F.35})$$

Comment mieux prendre en compte le comportement asymptotique de $\mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n)$

L'astuce que nous allons utiliser ici est très simple mais également très efficace car elle attaque le problème du comportement asymptotique de $\mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n)$ sur deux fronts. En partant de la relation Eq.(F.35), on peut tout simplement ajouter et soustraire la partie réelle de la fonction de Green libre de l'amas, $\text{Re } \mathcal{G}_{0\vec{K}}^{amas}(i\omega_n)$, à la fonction de Green interagissante de l'amas. On obtient

$$\begin{aligned} n_{\vec{K}}^{amas} &= 2 \left[\frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \text{Re } \mathcal{G}_{0\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) \right] \\ &\quad + \frac{4}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} [\text{Re } \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) - \text{Re } \mathcal{G}_{0\vec{K}}^{amas}(i\omega_n)]. \end{aligned} \quad (\text{F.36})$$

Il s'avère que le premier terme de cette équation peut être calculé analytiquement car il correspond au cas libre de la relation Eq.(F.35). Ainsi :

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \text{Re } \mathcal{G}_{0\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) = f(t_{\vec{K}}^{amas}, \mu_0) = \frac{1}{e^{\beta(t_{\vec{K}}^{amas} - \mu_0)} + 1} \quad (\text{F.37})$$

où la distribution de Fermi-Dirac fait apparaître le potentiel chimique du système sans interaction μ_0 , défini *via* la condition sur l'occupation n de l'amas

$$\boxed{\frac{1}{N_c} \sum_{\vec{K}, \sigma} f(t_{\vec{K}}^{amas}, \mu_0) = \frac{2}{N_c} \sum_{\vec{K}} f(t_{\vec{K}}^{amas}, \mu_0) = n} . \quad (\text{F.38})$$

Quant au second terme, il s'agit de la somme sur les fréquences de Matsubara de la différence des fonctions de Green interagissante et libre de l'amas. Or, ces deux fonctions de Green possèdent des comportements asymptotiques semblables (voir l'annexe Ann.A) qui vont se neutraliser en bonne partie. On obtient finalement :

$$\boxed{n_{\vec{K}}^{amas} = 2 f(t_{\vec{K}}^{amas}, \mu_0) + \frac{4}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} [\text{Re } \mathcal{G}_{\vec{K}}^{amas}(i\omega_n) - \text{Re } \mathcal{G}_{0\vec{K}}^{amas}(i\omega_n)]} . \quad (\text{F.39})$$

Évaluation pratique de l'erreur sur le calcul de $n_{\vec{K}}$ pour l'expression Eq.(F.35) ★

En utilisant l'astuce de la partie réelle que nous venons de voir, la relation Eq.(F.35) se réécrit

$$n_{\vec{K}} = 1 - \frac{4}{\beta} \sum_{n=0}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega \mathcal{A}(\vec{K}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} \quad (\text{F.40})$$

Cependant, une simulation ne calcule les différentes quantités que pour un nombre fini de fréquences de Matsubara allant de ω_0 à ω_N . On a alors

$$n_{\vec{K}} = 1 - \frac{4}{\beta} \sum_{n=0}^N \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega \mathcal{A}(\vec{K}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} - \frac{4}{\beta} \sum_{n=N}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega \mathcal{A}(\vec{K}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} \quad (\text{F.41})$$

et la valeur absolue du dernier terme correspond à l'erreur $\mathcal{E}_{\vec{K}}(N)$ faite sur $n_{\vec{K}}$. On majore facilement cette erreur en écrivant

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\vec{K}}(N) &= \frac{4}{\beta} \left| \sum_{n=N}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\omega \mathcal{A}(\vec{K}, \omega)}{\omega_n^2 + \omega^2} \right| \\ &< \frac{4}{\beta} \left| \sum_{n=N}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega \mathcal{A}(\vec{K}, \omega) \right] \frac{1}{\omega_n^2} \right| \\ &< \frac{4|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{\beta} \sum_{n=N}^{+\infty} \frac{1}{\omega_n^2}.\end{aligned}\tag{F.42}$$

On peut alors réécrire cette borne supérieure sous la forme suivante :

$$\frac{4|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{\beta} \sum_{n=N}^{+\infty} \frac{1}{\omega_n^2} \simeq \frac{4|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{\beta} \int_{\omega_N}^{+\infty} \frac{d\omega}{\frac{2\pi}{\beta} \omega^2} = \frac{2|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{\pi\omega_N}\tag{F.43}$$

en utilisant le fait que deux fréquences de Matsubara consécutives sont séparées de $2\pi/\beta$. On obtient ainsi

$$\boxed{\mathcal{E}_{\vec{K}}(N) < \frac{2|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{\pi\omega_N}}.\tag{F.44}$$

On peut estimer l'ordre de grandeur de $\mathcal{E}_{\vec{K}}(N)$ en utilisant l'expression Eq.(A.53) pour $\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)$ et en prenant une valeur typique pour ω_N . Plaçons-nous à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous (soit $n = 0.96$), à $U = 9$ et $V = 0$ (il semble clair qu'avoir $V \neq 0$ ne fera qu'augmenter cette erreur *a priori*). On a typiquement $\omega_N \simeq 25$ et un potentiel chimique μ de l'ordre de la valeur maximale de l'énergie de dispersion (qui donne le deuxième moment le plus élevé pour une interaction U donnée), soit $4t \equiv 4$. L'équation Eq.(A.53) donne alors $\mathcal{M}_{\vec{K}}(2) \simeq Un/2$. D'où

$$\mathcal{E}_{\vec{K}}(N) < \frac{2|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{\pi\omega_N} \simeq \frac{Un}{\pi\omega_N} \simeq 0.11.\tag{F.45}$$

Cette erreur est très grande quand on connaît l'ordre typique de l'occupation $n_{\vec{K}}$, qui reste comprise entre 0 et 2.

Une façon plus pratique de calculer le nombre de fréquences $N_f = N + 1$ de Matsubara dont on aurait besoin pour obtenir une erreur donnée consiste à substituer

N_f dans l'expression pour l'erreur :

$$\boxed{\mathcal{E}_{\vec{K}}(N_f) < \frac{2\beta|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2)|}{(2N_f - 1)\pi^2}}. \quad (\text{F.46})$$

Prenons le vecteur $\vec{K} = (\pi, \pi)$ qui donne la valeur maximale de $\varepsilon_{\vec{K}}$ et une simulation à $\beta = 100$ et 4% de dopage aux trous (où on a $n_{(\pi, \pi)} \simeq 0.436$). On cherche par exemple à obtenir une erreur relative d'au plus $err\%$, soit

$$\frac{\mathcal{E}_{(\pi, \pi)}(N_f)}{n_{(\pi, \pi)}} < \frac{\beta U n}{(2N_f - 1)\pi^2 n_{(\pi, \pi)}} < \frac{err}{100}, \quad (\text{F.47})$$

ce qui donne la condition suivante sur N_f :

$$\mathbb{E} \left[\frac{1}{2} + \frac{100 \beta U n}{2 err \pi^2 n_{(\pi, \pi)}} \right] + 1 \leq N_f \quad (\text{F.48})$$

où $\mathbb{E}$ désigne la partie entière. Cette condition se résume à $N_f \geq 10\,040$ pour 1% d'erreur relative et à $N_f \geq 1005$ pour 10% d'erreur relative. Un tel niveau de précision est donc raisonnablement impossible dans nos simulations. C'est pour cela qu'il vaut mieux que l'occupation $n_{\vec{K}}$ soit directement calculée à l'aide des simulations Monte Carlo.

Maintenant, à quel point l'astuce de l'équation Eq.(F.39) permet-elle de réduire cette erreur? En nous plaçant encore dans un des pires cas de figure (celui traité précédemment) et en suivant l'équation Eq.(F.39), on a

$$\boxed{\mathcal{E}_{\vec{K}}(N) < \frac{2|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2) - \mathcal{M}_{\vec{K}0}(2)|}{\pi\omega_N} = \frac{2\beta|\mathcal{M}_{\vec{K}}(2) - \mathcal{M}_{\vec{K}0}(2)|}{(2N_f - 1)\pi^2}} \quad (\text{F.49})$$

où $\mathcal{M}_{\vec{K}0}(2) = \varepsilon_{\vec{K}} - \mu_0$ est le moment de la fonction de Green libre en $\vec{K}$. Il s'avère que le potentiel chimique non interagissant μ_0 à 4% de dopage aux trous et $\beta = 100$ est très proche de 0, d'où $\mathcal{M}_{\vec{K}0}(2) \simeq \varepsilon_{\vec{K}}$. Pour $\vec{K} = (\pi, \pi)$, on a ainsi $\mathcal{M}_{\vec{K}0}(2) \simeq 4t$, ce qui donne la condition suivante sur N_f :

$$\mathbb{E} \left[\frac{1}{2} + \frac{100 \beta |Un - 8t|}{2 err \pi^2 n_{(\pi, \pi)}} \right] + 1 \leq N_f. \quad (\text{F.50})$$

Cette condition se résume à $N_f \geq 745$ pour 1% d'erreur relative et à $N_f \geq 75$ pour 10% d'erreur relative. Autant dire que l'amélioration est très nette ! Il devient alors raisonnable de calculer $n_{\vec{K}}$ *via* les fonctions de Green pour gagner un peu de temps de simulation (la mesure directe de $n_{\vec{K}}$ dans les simulations de Monte Carlo rallonge bien sûr ces dernières).

Annexe G

Guide pour le lancement des simulations

L'ensemble des résultats obtenus dans cette thèse est le fruit du lancement de très nombreuses simulations et de l'écriture de nombreux codes d'analyse performants. Passons ici en revue quelques fichiers typiquement utilisés pour lancer les simulations ainsi que certains aspects pratiques concernant la CDMFT et le prolongement analytique.

G.1 Fichiers d'entrée

G.1.1 Fichier modèle

Le fichier modèle sert à mettre en place le contexte très général d'une simulation. Il fonctionne à partir de mots-clés qui renseignent le programme sur la nature de l'amas CDMFT considéré, les différentes quantités physiques qui vont être mesurées par le programme Monte Carlo, et les différents ordres (magnétiques ou supraconducteurs) qui sont envisagés au sein de la simulation.

On commence par préciser si on veut travailler dans l'état supraconducteur avec le formalisme de Nambu ou dans l'état normal. Cela revient à respectivement mettre ou omettre le terme

isNambu

Ensuite, il s'agit de définir l'amas sur lequel nous allons travailler. On donne la position des sites de l'amas dans une base de travail. Nous avons ici un réseau carré, ce qui donne

```
sites
(0,0,0)
(1,0,0)
(1,1,0)
(0,1,0)
```

On indique alors les symétries de l'amas étudié par rapport à la séquence des numéros des sites pour l'amas carré, 1 2 3 4 :

$$\begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 4 & 3 \end{array} \quad . \quad (G.1)$$

Ici, nous avons deux symétries miroir :

- celle transformant le site 1 en 2, le site 2 en 1, le site 3 en 4, et le site 4 en 3, soit 1 2 3 4 $\rightarrow$ 2 1 4 3 ;
- celle transformant le site 1 en 4, le site 2 en 3, le site 3 en 2, et le site 4 en 1, soit 1 2 3 4 $\rightarrow$ 4 3 2 1,

ce qui se traduit par

```
symmetry_generator
2 1 4 3
4 3 2 1
```

On définit désormais les vecteurs de base du super-réseau permettant de paver le réseau à partir de l'amas défini précédemment

```
superlattice
(2,0,0)
(0,2,0)
```

Ces vecteurs sont définis dans la même base de travail mentionnée auparavant. Dans cette même base, on définit également les vecteurs de base du réseau afin de déterminer le nombre de sites électroniques par cellule unité :

```
lattice
(1,0,0)
(0,1,0)
```

La base de travail utilisée doit être précisée par

```
basis
(1,0,0)
(0,1,0)
(0,0,1)
```

Cependant, cette définition importe uniquement à condition qu'on veuille représenter graphiquement le réseau et l'amas.

Maintenant que l'amas est parfaitement décrit, il s'agit de définir les différentes quantités à un corps telles que :

- l'amplitude de saut t ;
- les champs moyens V_{mf1} et V_{mf2} résultant du traitement Hartree de V , V_{mf1} et V_{mf2} correspondant respectivement aux opérateurs $\hat{O}_2$ et $\hat{O}_1$ de la section Sec.8.2 ;
- les occupations d'orbitale n_{00} , n_{Pi0} , n_{0Pi} , et n_{PiPi} , décrites en profondeur dans la section Sec.F.3.

one-body		V_{mf2} [1,0,0]	-0.5	diagonal
t (1,0,0)	-1	V_{mf2} [1,1,0]	0.5	diagonal
t (0,1,0)	-1	V_{mf2} [0,1,0]	-0.5	diagonal
V_{mf1} [0,0,0]	0.5	n_{00} (1,0,0)	0.125	
V_{mf1} [1,0,0]	0.5	n_{00} (0,1,0)	0.125	
V_{mf1} [1,1,0]	0.5	n_{00} (1,1,0)	0.125	
V_{mf1} [0,1,0]	0.5	n_{00} (1,-1,0)	0.125	
V_{mf2} [0,0,0]	0.5	n_{00} (0,0,0)	0.125	

nOPi (1,0,0) 0.125	nPi0 (1,-1,0) -0.125
nOPi (0,1,0) -0.125	nPi0 (0,0,0) 0.125
nOPi (1,1,0) -0.125	nPiPi (1,0,0) -0.125
nOPi (1,-1,0) -0.125	nPiPi (0,1,0) -0.125
nOPi (0,0,0) 0.125	nPiPi (1,1,0) 0.125
nPi0 (1,0,0) -0.125	nPiPi (1,-1,0) 0.125
nPi0 (0,1,0) 0.125	nPiPi (0,0,0) 0.125
nPi0 (1,1,0) -0.125	*

Expliquons la notation employée en prenant `t` et `Vmf1` (potentiel chimique local dû au traitement Hartree de V) comme exemples. Commençons par `t`, on spécifie un nom pour l'amplitude de saut, suivi d'une différence de positions entre parenthèses, puis du coefficient associé à ce terme dans le hamiltonien (qui est indépendant de la valeur du paramètre associé à `t`). Pour ce qui est de `Vmf1`, on spécifie encore un nom, suivi de la position du site de l'amas concerné entre crochets, puis du coefficient associé à ce terme dans le hamiltonien. Le terme `diagonal` indique que ce terme ne change pas d'une population de spins à une autre. Notons ici que les facteurs ± 0.125 employés pour les occupations d'orbitales génèrent les occupations d'orbitales *par spin* (l'occupation d'orbitales sommée sur les spins est obtenue avec des facteurs ± 0.25).

C'est maintenant au tour des interactions `U` et `V` d'être définies :

```
interaction
U (0,0,0) 1
V (1,0,0) 1
V (0,1,0) 1
*
```

Ici, on spécifie un nom pour l'amplitude de saut, suivi d'une différence de positions entre parenthèses, puis du coefficient associé à ce terme dans le hamiltonien.

On définit désormais les noms des termes indépendants dont nous aurons besoin pour décrire la fonction de Green matricielle de l'amas dans le formalisme de Nambu Eq.(6.44) (ils dépendent des symétries de l'amas vues auparavant) :

```

green_functions
00
0Pi
PiPi
phi00
phiPi0
phi0Pi
phiPiPi

```

Ici, les symétries de l'amas donnent directement les vecteurs d'onde $\vec{K}$ rencontrés à la fin de la section Sec.3.4 portant sur la CDMFT. Les termes anormaux commencent par "phi" (ceci n'est en rien une question de convention, mais juste une question de choix). On écrit alors explicitement la fonction de Green matricielle dans le formalisme de Nambu :

```

green_matrix
00      0      0      0      phi00  0      0      0
0      0Pi     0      0      0      phiPi0  0      0
0      0      0Pi     0      0      0      phi0Pi  0
0      0      0      PiPi  0      0      0      phiPiPi
phi00   0      0      0      -00*   0      0      0
0      phiPi0  0      0      0      -0Pi*  0      0
0      0      phi0Pi  0      0      0      -0Pi*  0
0      0      0      phiPiPi  0      0      0      -PiPi*

```

où "*" désigne le conjugué complexe. Différentes symétries d'appariement sont dès lors envisageables :

- une symétrie s si $\text{phi00} = \text{phiPi0} = \text{phi0Pi} = \text{phiPiPi}$;
- une symétrie s étendue si $\text{phiPi0} = \text{phi0Pi} \neq \text{phi00} \neq \text{phiPiPi}$;
- une symétrie d si $\text{phi00} = \text{phiPiPi} = 0$ et $\text{phiPi0} = -\text{phi0Pi}$;
- une symétrie $s + d$ si $\text{phi00} \neq \text{phiPi0} \neq \text{phi0Pi} \neq \text{phiPiPi}$.

Ces fonctions de Green n'imposent pas de supraconductivité, elles ne font que la permettre. Les zéros et les équivalences entre termes de même nom dans la matrice de Green contraignent la convergence de la CDMFT.

On finit en liant les champs moyens V_{mf1} et V_{mf2} à l'interaction V :

```
mean-field
V  Vmf1  2
V  Vmf2  -2
*
```

Cette portion de code associe à l'opérateur `Vmfi` (où $i = 1$ ou $i = 2$) le coefficient formé du produit de $\lambda_i = \pm 2$, de `V`, et de la valeur moyenne de l'opérateur `Vmfi` à la dernière itération, comme dans l'équation Eq.(8.11). Le terme `mean-field` indique que le coefficient de l'opérateur est redéfini à chaque itération.

G.1.2 Fichier de paramètres

Le fichier de paramètres rassemble les paramètres qui vont être injectés dans le programme de CDMFT. Il commence par des renseignements très généraux :

```
model          plaquetteC2vSc_V_nK.model
IS_NAME        IS2
ITERSTART      1
ITEREND        150
# START_FROM_HYB
START_FROM_SELF
USE_UPDATES
```

`model` et `IS_NAME` indiquent respectivement le nom du fichier modèle et du solveur d'impureté. `ITERSTART` et `ITEREND` correspondent respectivement à la première itération et à la dernière itération prises par le programme. Pour commencer à partir d'une certaine itération "`p`", il est forcément nécessaire de donner une certaine solution de départ. Cette solution peut être une fonction d'hybridation `Hyb"p+1".json` ou une self-energy `Self"p".json`. On précise le type de solution de départ *via* les termes `START_FROM_HYB` ou `START_FROM_SELF`. Mettre `ITERSTART` à 0 en ne précisant pas de `START_FROM_HYB` ou de `START_FROM_SELF` donne une self-energy nulle en entrée du programme. La présence du terme `USE_UPDATES` indique que l'on souhaite utiliser le fichier `Updates.json` incluant les mises à jour à 4 points pour la supraconductivité. Pour une étude de l'état normal, il suffit d'omettre cette ligne. Les fichiers

au format `.json` que nous venons de mentionner seront davantage décrits dans les prochaines sous-sections.

La portion de code ci-dessous explicite quant à elle les paramètres physiques que l'on impose au système et les quantités physiques que nous voulons directement mesurer au sein de la simulation Monte Carlo.

```
parameters
t      1.0
U      9m
V      4m
Vmf1   1.96m
Vmf2   0m
n00     0.0m
n0Pi    0.0m
nP0i    0.0m
nP0Pi   0.0m
*
```

Les valeurs de `t`, `U`, et `V` sont fixées. Les valeurs de `Vmf1` et `Vmf2` sont particulières car, comme vu précédemment, elles vont être mises à jour à chaque itération. Les occupations d'orbitales ne sont pas imposées dans le hamiltonien du système (car leurs coefficients sont nuls), mais elles vont être mesurées tout de même à chaque itération. En effet, le `m` suivant certains nombres indique que l'on souhaite mesurer directement la valeur moyenne des opérateurs associés à ces paramètres dans la simulation Monte Carlo. Elle permet ainsi de créer des fichiers d'observable en sortie du programme qui s'appellent par exemple `Observable_U.dat`, `Observable_V.dat`, *etc.* Nous en discuterons dans la section Sec.G.2.

Il est ensuite nécessaire de préciser les paramètres entrant dans l'exécution du programme Monte-Carlo.

```
# ALPS Monte Carlo parameters -----
SEED          41085
SWEEPS        70000000
THERMALIZATION 1
```

```

NMEAS          24
TIMESALPSMEAS  5000
CLEANUPDATE     100

```

`SEED` est le paramètre d'initialisation Du générateur de nombres pseudo-aléatoire de notre simulation Monte Carlo. `SWEEPS` est le nombre total de balayages Monte Carlo. Chacun de ces balayages génère une nouvelle configuration *via* l'algorithme de Metropolis-Hastings (voir section Sec.3.6) à chaque fois. `THERMALIZATION` correspond au nombre de balayages Monte Carlo qui sont faits avant la moindre mesure d'échantillon incluse dans les statistiques Monte Carlo. Ces échantillons sont ensuite pris tous les `NMEAS` balayages et envoyés à la librairie ALPS tous les `NMEAS`×`TIMESALPSMEAS` balayages. Le paramètre `CLEANUPDATE` spécifie que la comptabilisation des nouvelles configurations générées par les simulations Monte Carlo recommence à zéro tous les `CLEANUPDATE` balayages pour éviter la propagation d'erreurs.

La portion suivante du fichier donne les derniers paramètres physiques :

```

# necessary parameters -----
beta      100
mu        18.51
EGreen    25
EHyb      15
EObs      15
weightR    0.2
weightI    0
n          0.96
S          1.0

```

`beta` et `mu` indiquent respectivement la température inverse et le potentiel chimique du système. La valeur `beta` est imposée au système tandis que la valeur `mu` est seulement une proposition initiale pour la valeur du potentiel chimique. Les paramètres `EGreen`, `EHyb`, et `EObs` correspondent respectivement aux valeurs maximales des fréquences de Matsubara considérées dans les fonctions de Green, dans les fonctions d'hybridation, et dans les éventuelles fonctions de corrélation calculées par le programme. `weightR` et `weightI` mélangent la fonction d'hybridation d'une itération

avec celle de l'itération suivante, afin de stabiliser le processus de convergence *via*

$$\Gamma_{p+1}(i\omega_n) = (\text{weightR} + i \text{weightI}) \Gamma_p(i\omega_n) + [1 - (\text{weightR} + i \text{weightI})] \Gamma_{p+1}^{cal}(i\omega_n) \quad (\text{G.2})$$

où $\Gamma_{p+1}^{cal}(i\omega_n)$ est la fonction d'hybridation calculée durant l'itération $p + 1$ de la CDMFT en suivant la section Sec.3.4. n indique la valeur de l'occupation qui est imposée au système. S est le paramètre entrant dans l'évolution du potentiel chimique *via*

$$\mu_{p+1} = \mu_p - S(n_p - n) \quad (\text{G.3})$$

où μ_p et n_p désignent le potentiel chimique et l'occupation mesurée à l'itération p . Un paramètre S trop petit peut mener à une lenteur dans la convergence tandis qu'un paramètre S trop grand peut mener à des problèmes de stabilité dans le processus de convergence.

Le fichier s'achève avec les paramètres mathématiques entrant dans l'intégration sur $\vec{k}$ apparaissant sous forme de somme discrète dans la section Sec.3.4 portant sur la CDMFT :

```
# CDMFT integration Curhe parameters ----
EPSREL    1e-5
EPSABS    1e-8
MAXEVAL   500000
MINEVAL   100
```

Au sein du programme CDMFT, l'intégration se fait avec un pas adaptatif (suivant la méthode de Curhe), qui évolue au cours de différentes itérations pour assurer des erreurs relatives et absolues inférieures à `EPSREL` et `EPSABS`, respectivement. `MINEVAL` itérations sont faites d'office avant de vérifier les critères d'erreur sur `EPSREL` et `EPSABS`. Ces critères sont ensuite vérifiés à la fin de chaque itération jusqu'à ce qu'ils soient satisfaits ou qu'on dépasse `MAXEVAL` itérations.

G.1.3 Fichiers de fonction d'hybridation et de self-energy

Les fichiers de fonction d'hybridation et de self-energy de format `.json` rencontrés précédemment sont des fichiers "dictionnaire" qui s'organisent globalement comme une suite de portions de code de ce genre :

```
"OPi" : {
    "First Moment" : 2.0,
    "Second Moment" : 0.0,
    "beta" : 100.0,
    "imag" : [...],
    "real" : [...]
}
```

"phi00" correspond au terme de la fonction de Green matricielle associé dans le fichier modèle. "First Moment" et "Second Moment" donnent respectivement les valeurs du premier et second moments de la quantité concernée. On peut mettre ces moments à zéro pour la self-energy. On peut faire de même avec le deuxième moment de la fonction d'hybridation mais il faut absolument que le premier moment de la fonction d'hybridation soit le bon. "beta" donne la valeur de la température inverse du fichier de paramètres. Les listes "imag" et "real" donnent respectivement la liste des valeurs prises par la partie imaginaire et la partie réelle de la quantité concernée à chaque fréquence de Matsubara.

G.1.4 Fichier de mise à jour

Ce fichier doit s'appeler `Updates.json`. Il permet de prendre en compte des mises à jour supplémentaires afin de mieux explorer l'espace des configurations du système et de rendre les simulations Monte Carlo bien plus ergodiques. Ces nouvelles mises à jour deviennent en effet cruciales dans l'étude de la supraconductivité par exemple, comme le montrent de récents travaux [53]. L'ergodicité des simulations Monte Carlo est davantage traitée dans la section Sec.3.6.

Sa structure est explicitée ci-dessous pour une supraconductivité de type d

```

{
  "InsertEraseCSQ" : {
    "Weight" : 1.,
    "Moves" : [
      [1., "R0_Up"],
      [1., "R2_Up"],
      [1., "R1_Up"],
      [1., "R3_Up"],
      [1., "R0_Down"],
      [1., "R2_Down"],
      [1., "R1_Down"],
      [1., "R3_Down"]
    ]
  },
  "Flip" : {
    "Weight" : 4.,
    "Moves" : [
      [1., "R1_Down", "R1_Up", "R2_Down", "R2_Up"],
      [1., "R1_Up", "R1_Down", "R2_Up", "R2_Down"]
    ]
  }
}

```

et pour une supraconductivité de type s , s étendue, ou $s + d$:

```

{
  "InsertEraseCSQ" : {
    "Weight" : 1.,
    "Moves" : [
      [1., "R0_Up"],
      [1., "R2_Up"],
      [1., "R1_Up"],
      [1., "R3_Up"],
      [1., "R0_Down"],
      [1., "R2_Down"],
      [1., "R1_Down"],

```

```

        [1., "R3_Down"]
    ]
},
"Flip" : {
    "Weight" : 4.,
    "Moves" : [
        [1., "R0_Down", "R0_Up", "R1_Down", "R1_Up"],
        [1., "R0_Up", "R0_Down", "R1_Up", "R1_Down"],
        [1., "R0_Down", "R0_Up", "R2_Down", "R2_Up"],
        [1., "R0_Up", "R0_Down", "R2_Up", "R2_Down"],
        [1., "R0_Down", "R0_Up", "R3_Down", "R3_Up"],
        [1., "R0_Up", "R0_Down", "R3_Up", "R3_Down"],
        [1., "R1_Down", "R1_Up", "R2_Down", "R2_Up"],
        [1., "R1_Up", "R1_Down", "R2_Up", "R2_Down"],
        [1., "R1_Down", "R1_Up", "R3_Down", "R3_Up"],
        [1., "R1_Up", "R1_Down", "R3_Up", "R3_Down"],
        [1., "R2_Down", "R2_Up", "R3_Down", "R3_Up"],
        [1., "R2_Up", "R2_Down", "R3_Up", "R3_Down"]
    ]
}
}

```

Grosso modo, on désigne par **R0**, **R1**, **R2**, et **R3** les représentations irréductibles découlant des générateurs de symétrie pour l'amas étudié rencontrés dans le fichier modèle. Pour le cas considéré ici, elles sont simplement associées aux vecteurs $\vec{K}$ de la fin de la section Sec.3.4. L'étude de la supraconductivité requiert d'ajouter aux mises à jour "habituelles", appelées "InsertEraseCSQ" ici, des mises à jour de l'état de paires d'électrons, appelées "Flip", où une configuration donnée en remplace une autre. Par exemple, la ligne

```
[1., "R1_Up", "R1_Down", "R2_Up", "R2_Down"]
```

permet au programme de remplacer la paire d'électrons ("R1_Up", "R1_Down") par la paire ("R2_Up", "R2_Down"). Pour la supraconductivité de type d , il suffit de mêler les représentations **R1** et **R2** associées aux vecteurs $(\pi, 0)$ et $(0, \pi)$ où se développent ce

type de supraconductivité. Pour la supraconductivité de type s , s étendue, ou $s + d$, il est néanmoins nécessaire de considérer des mises à jour des états de paires correspondant aux quatre représentations irréductibles car ce type de supraconductivité peut se développer au niveau de n'importe quel vecteur $\vec{K}$.

G.2 Fichiers de sortie

Les fichiers de sortie sont des fichiers de format `.dat` ou `.json`. En plus des fichiers `Hyb"p".json` et `Self"p".json` décrits précédemment pour la fonction d'hybridation et la self-energy à l'itération p , des fichiers `Green"p".json` correspondant aux fonctions de Green à l'itération p sont également générés. Pour le reste, il s'agit de fichier de format `.dat` associés aux différentes grandeurs physiques mesurées dans le programme Monte Carlo.

Les fichiers `green"p".dat` sont redondants avec les fichiers `Green"p".json` car ils contiennent aussi les fonctions de Green. Sa structure est la suivante : la première colonne contient les valeurs des fréquences de Matsubara tandis que les autres colonnes contiennent les parties réelles et imaginaires des fonctions de Green. Quant aux autres fichiers de format `.dat`, ils sont organisés comme suit : la première colonne contient le numéro de l'itération, la deuxième colonne contient la valeur mesurée pour la quantité physique concernée à une itération donnée, et la troisième colonne contient l'erreur Monte Carlo sur la mesure. Voici une liste de certains de ces fichiers :

- `N.dat` pour l'occupation ;
- `mu.dat` pour le potentiel chimique ;
- `k.dat` pour l'ordre d'expansion de la fonction d'hybridation (avec un solveur d'impureté CT-HYB) ;
- `Sign.dat` pour la valeur du signe du problème de signe décrit dans la section Sec.3.6 ;
- `Observable_Vmf1.dat` pour la valeur de `Vmf1` ;
- `Observable_Vmf2.dat` pour la valeur de `Vmf2` ;
- `Observable_n00.dat` pour l'occupation par spin de l'orbitale $\vec{K} = (0, 0)$;
- `Observable_nPi0.dat` pour l'occupation par spin de l'orbitale $\vec{K} = (\pi, 0)$;
- `Observable_n0Pi.dat` pour l'occupation par spin de l'orbitale $\vec{K} = (0, \pi)$;

- `Observable_nPiPi.dat` pour l'occupation par spin de l'orbitale $\vec{K} = (\pi, \pi)$. Étant données les définitions des paramètres `U` et `V` que nous avons imposées dans le fichier modèle, les fichiers `Observable_U.dat` et `Observable_V.dat` répertorient les valeurs des quantités suivantes

$$\sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}} = 4D \quad \text{et} \quad \sum_{i,\delta} \langle \hat{n}_i \hat{n}_{i+\delta} \rangle_{\mathcal{H}_{amas}}, \quad (\text{G.4})$$

respectivement. Ici, D est la double occupation et $i + \delta$ signale la position des sites premiers voisins du site i . On extrait donc simplement la double occupation D du fichier `Observable_U.dat` tandis que le fichier `Observable_V.dat` est très utile lors du calcul de l'énergie potentielle du système Eq.(E.25).

Pour ce qui est du calcul de l'erreur statistique, notons qu'il vaut mieux prendre l'écart-type issu de la moyenne d'une quantité sur les dernières itérations que prendre la moyenne des erreurs Monte Carlo affichées dans les fichiers mentionnés précédemment.

G.3 Utiliser le supercalculateur Mammouth

La soumission d'une tâche sur le supercalculateur Mammouth du Centre de calcul scientifique de l'Université de Sherbrooke s'accompagne de différentes options. On peut soumettre ses tâches sur Mammouth série (Ms) ou Mammouth parallèle (Mp). Chaque cœur de calcul contient 8 processeurs sur Ms et 24 processeurs sur Mp. Cependant, bien que les cœurs de Mp communiquent bien plus rapidement entre eux que ceux de Ms, leurs processeurs sont plus lents que ceux des cœurs de Ms. Ce n'est donc qu'avec une parallélisation efficace du code que le travail sur Mp est avantageux.

Les simulations ayant donné les résultats de cette thèse ont été faites surtout sur Ms pour le projet des crossovers, et complètement sur Mp pour le projet sur la dynamique d'appariement. La plupart du temps, ce sont six cœurs de calculs qui ont été pris sur Mp par simulation, soit 144 processeurs, pour un temps total de calcul de l'ordre de 20 à 30 heures.

G.4 Prolongement analytique

Toute la documentation concernant l'utilisation du programme de prolongement analytique *OmegaMaxEnt* peut être trouvée sur la [page Wikimédia du Département de physique de l'Université de Sherbrooke sur *OmegaMaxEnt*](http://www.physique.usherbrooke.ca/MaxEnt/index.php/Main_Page). Le lien URL associé est

http://www.physique.usherbrooke.ca/MaxEnt/index.php/Main_Page

Les prolongements analytiques du dernier chapitre de cette thèse sont faits en utilisant environ 300 fréquences de Matsubara quelle que soit la température, sauf peut-être dans le régime haute température à $U = 9$ et $V = 0$. En effet, les données CTQMC à $U = 9$ et $V = 0$ viennent de Lorenzo Fratino, étudiant au doctorat au Royal Holloway (University of London) sous la direction de Giovanni Sordi. À haute température, les fonctions de Green de ses données ne contenaient parfois que 240 fréquences de Matsubara. Dans tous les cas, les prolongements analytiques prenaient environ 275 itérations pour atteindre la valeur optimale de α . Ceci équivaut à des prolongements analytiques d'une quinzaine de minutes.

On impose uniquement la norme de la fonction spectrale recherchée (1 pour une fonction spectrale normale, 2 pour une fonction spectrale auxiliaire). On met ainsi le moment maximal à 0 dans le fichier d'entrée pour éviter la prise en compte d'autres moments. Le modèle par défaut utilisé est une gaussienne normalisée à 1 et devenant parfaitement négligeable vers $\omega \simeq \pm 25$. Il est important que le modèle par défaut soit plus large que la plage de fréquences où la fonction spectrale recherchée est encore largement finie. On risque sinon une perte d'information sur la fonction spectrale à la fin du prolongement analytique. Enfin, la grille de fréquences réelles employée est la suivante :

```
grid parameters
(w_0 dw_0 w_1 dw_1 ... w_{N-1} dw_{N-1} w_N) :
-15 0.08 -3 0.02 -1 0.005 1 0.02 3 0.08 15
```


Bibliographie

- [1] M. C. Gutzwiller. *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*. [Phys. Rev. Lett. **10**\(5\), 159–162 \(1963\)](#). [cf. p.44]
- [2] J. Hubbard. *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*. [Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences **276**\(1365\), 238–257 \(1963\)](#). [cf. p.44]
- [3] J. Kanamori. *Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals*. [Progress of Theoretical Physics **30**\(3\), 275–289 \(1963\)](#). [cf. p.44]
- [4] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller et E. Teller. *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. [The Journal of Chemical Physics **21**\(6\), 1087–1092 \(1953\)](#). [cf. p.53, 74]
- [5] W. Krauth. *Four lectures on computational statistical physics*. [ArXiv e-prints \(2009\)](#). [cf. p.53]
- [6] R. P. Feynman. *Atomic Theory of the λ Transition in Helium*. [Phys. Rev. **91**, 1291–1301 \(1953\)](#). [cf. p.54]
- [7] D. Sénéchal. *An introduction to quantum cluster methods*. [ArXiv e-prints \(2008\)](#). [cf. p.55]
- [8] T. Giamarchi et C. Lhuillier. *Phase diagrams of the two-dimensional Hubbard and t - J models by a variational Monte Carlo method*. [Phys. Rev. B **43**\(16\), 12943–12951 \(1991\)](#). [cf. p.55]
- [9] A. Paramekanti, M. Randeria et N. Trivedi. *High- T_c superconductors: A variational theory of the superconducting state*. [Phys. Rev. B **70**\(5\), 054504 \(2004\)](#). [cf. p.55]
- [10] S. E. Barnes. *New method for the Anderson model*. [Journal of Physics F : Metal Physics **6**\(7\), 1375 \(1976\)](#). [cf. p.55]
- [11] P. Coleman. *New approach to the mixed-valence problem*. [Phys. Rev. B **29**, 3035–3044 \(1984\)](#). [cf. p.55]
- [12] G. Kotliar et A. E. Ruckenstein. *New Functional Integral Approach to Strongly Correlated Fermi Systems: The Gutzwiller Approximation as a Saddle Point*. [Phys. Rev. Lett. **57**, 1362–1365 \(1986\)](#). [cf. p.55]

- [13] S. Yoshida et K. Okamoto. *Phase Diagram of Spin-1/2 Alternating Ferromagnetic Chain with XY-Like Anisotropy*. [Journal of the Physical Society of Japan](#) **58**(12), 4367–4374 (1989). [cf. p.55]
- [14] C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy et Sanjoy Sarker. *Mean-field theory for the t - J model*. [Phys. Rev. B](#) **40**, 2610–2613 (1989). [cf. p.55]
- [15] D. Boies, F. A. Jackson et Tremblay A.-M. S. *Nagaoka Ferromagnetism As A Test of Slave-fermion and Slave-boson Approaches*. [International Journal of Modern Physics B](#) **9**, 1001 (1995). [cf. p.55]
- [16] W. O. Putikka, M. U. Luchini et T. M. Rice. *Aspects of the phase diagram of the two-dimensional t - J model*. [Phys. Rev. Lett.](#) **68**, 538–541 (1992). [cf. p.56]
- [17] S. R. White. *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. [Phys. Rev. Lett.](#) **69**, 2863–2866 (1992). [cf. p.56]
- [18] U. Schollwöck. *The density-matrix renormalization group*. [Reviews of Modern Physics](#) **77**(1), 259 (2005). [cf. p.56]
- [19] C. Bourbonnais. *The dimensionality crossover in quasi-1d conductors*. [Mol. Cryst. Liq. Cryst.](#) **119**, 11 (1985). [cf. p.56]
- [20] L. G. Caron et C. Bourbonnais. *Importance of one-dimensional correlations in the phase diagram of the $(\text{TMTTF})_2$ - $(\text{TMTSF})_2$ -X salts*. [Physica B+C](#) **143**(1-3), 453–455 (1986). [cf. p.56]
- [21] C. Bourbonnais. Dans *Les Houches 1991, Session LVI: Strongly interacting fermions and high T_c superconductivity*, B. Douçot et J. Zinn-Justin, chapitre 7, 307–367. Elsevier (1995). [cf. p.56]
- [22] R. Shankar. *Renormalization-group approach to interacting fermions*. [Rev. Mod. Phys.](#) **66**, 129–192 (1994). [cf. p.56]
- [23] A. Sedeki, D. Bergeron et C. Bourbonnais. *Extended quantum criticality of low-dimensional superconductors near a spin-density-wave instability*. [Phys. Rev. B](#) **85**, 165129 (2012). [cf. p.56]
- [24] W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp, V. Meden et K. Schönhammer. *Functional renormalization group approach to correlated fermion systems*. [Rev. Mod. Phys.](#) **84**, 299–352 (2012). [cf. p.56]
- [25] Y. M. Vilk et A.-M. S. Tremblay. *Non-Perturbative Many-Body Approach to the Hubbard Model and Single-Particle Pseudogap*. [J. Phys. I France](#) **7**(11), 1309–1368 (1997). [cf. p.57, 113]
- [26] S. Allen, A.-M. S. Tremblay et Y. M. Vilk. *Conserving Approximations vs. Two-Particle Self-Consistent Approach*. Dans *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, David Sénéchal, André-Marie Tremblay et Claude Bourbonnais, CRM Series in Mathematical Physics, 341–355. Springer New York (2004). [cf. p.57, 113]

- [27] A.-M. Tremblay. volume Springer Series de *Springer Series in Solid-State Sciences*, Vol. 171, chapitre 13. (2011). [cf. p.57]
- [28] A.-M. S. Tremblay, B. Kyung et D. Sénéchal. *Pseudogap and high-temperature superconductivity from weak to strong coupling. Towards a quantitative theory.* *Low Temp. Phys.* **32**(4-5), 424–451 (2006). [cf. p.57]
- [29] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino et R. L. Sugar. *Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I.* *Phys. Rev. D* **24**, 2278–2286 (1981). [cf. p.57]
- [30] A. Georges et G. Kotliar. *Hubbard model in infinite dimensions.* *Phys. Rev. B* **45**, 6479–6483 (1992). [cf. p.57, 58, 59]
- [31] M. Jarrell. *Hubbard model in infinite dimensions: A quantum Monte Carlo study.* *Phys. Rev. Lett.* **69**, 168–171 (1992). [cf. p.57]
- [32] W. Metzner et D. Vollhardt. *Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions.* *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324–327 (1989). [cf. p.58]
- [33] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth et M. J. Rozenberg. *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions.* *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13–25 (1996). [cf. p.58, 97]
- [34] D. Vollhardt. *Normal ^3He : an almost localized Fermi liquid.* *Rev. Mod. Phys.* **56**, 99–120 (1984). [cf. p.59]
- [35] T. Pruschke, M. Jarrell et J. K. Freericks. *Anomalous normal-state properties of high- T_c superconductors: intrinsic properties of strongly correlated electron systems?* *Advances in Physics* **44**(2), 187–210 (1995). [cf. p.59]
- [36] M. Imada, A. Fujimori et Y. Tokura. *Metal-insulator transitions.* *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039–1263 (1998). [cf. p.59, 96]
- [37] G. Kotliar et D. Vollhardt. *Strongly Correlated Materials: Insights From Dynamical Mean-Field Theory.* *Physics Today* **57**(3), 53–59 (2004). [cf. p.61, 93, 105]
- [38] A. Georges. *Thinking locally: Reflections on Dynamical Mean-Field Theory from a high-temperature/high-energy perspective.* *Annalen der Physik* **523**(8-9), 672–681 (2011). [cf. p.62, 97, 115]
- [39] H. Park, K. Haule et G. Kotliar. *Cluster Dynamical Mean Field Theory of the Mott Transition.* *Phys. Rev. Lett.* **101**(18), 186403 (2008). [cf. p.64, 117, 199]
- [40] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson et G. Biroli. *Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems.* *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001). [cf. p.64]
- [41] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke et M. H. Hettler. *Quantum cluster theories.* *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027–1080 (2005). [cf. p.64, 65, 68, 107]
- [42] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke et H. R. Krishnamurthy. *Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems.* *Phys. Rev. B* **58**, R7475–R7479 (1998). [cf. p.68]

- [43] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg et G. Kotliar. *Mott transition in the $d = \infty$ Hubbard model at zero temperature*. [Phys. Rev. Lett. **70**, 1666–1669 \(1993\)](#). [cf. p.70]
- [44] L.-F. Arsenault, P. Sémon et A.-M. S. Tremblay. *Benchmark of a modified iterated perturbation theory approach on the fcc lattice at strong coupling*. [Phys. Rev. B **86**, 085133 \(2012\)](#). [cf. p.70]
- [45] J. E. Hirsch et R. M. Fye. *Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals*. [Phys. Rev. Lett. **56**, 2521–2524 \(1986\)](#). [cf. p.70]
- [46] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer et P. Werner. *Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models*. [Rev. Mod. Phys. **83**, 349–404 \(2011\)](#). [cf. p.70]
- [47] A. N. Rubtsov, V. V. Savkin et A. I. Lichtenstein. *Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions*. [Phys. Rev. B **72**, 035122 \(2005\)](#). [cf. p.72]
- [48] P. Werner, A. Comanac, L. de' Medici, M. Troyer et A. J. Millis. *Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models*. [Phys. Rev. Lett. **97**\(7\), 076405 \(2006\)](#). [cf. p.72]
- [49] P. Werner et A. J. Millis. *Hybridization expansion impurity solver: General formulation and application to Kondo lattice and two-orbital models*. [Phys. Rev. B **74**\(15\), 155107 \(2006\)](#). [cf. p.72]
- [50] K. Haule. *Quantum Monte Carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base*. [Phys. Rev. B **75**\(15\), 155113 \(2007\)](#). [cf. p.72]
- [51] E. Gull, P. Werner, A. Millis et M. Troyer. *Performance analysis of continuous-time solvers for quantum impurity models*. [Phys. Rev. B **76**\(23\), 235123 \(2007\)](#). [cf. p.72]
- [52] W. K. Hastings. *Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications*. [Biometrika **57**\(1\), 97–109 \(1970\)](#). [cf. p.74]
- [53] P. Sémon, G. Sordi et A.-M. S. Tremblay. *Ergodicity of the hybridization-expansion Monte Carlo algorithm for broken-symmetry states*. [Phys. Rev. B **89**, 165113 \(2014\)](#). [cf. p.77, 242, 322]
- [54] M. Troyer et U.-J. Wiese. *Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations*. [Phys. Rev. Lett. **94**, 170201 \(2005\)](#). [cf. p.78]
- [55] P. Sémon et A.-M. S. Tremblay. *Importance of subleading corrections for the Mott critical point*. [Phys. Rev. B **85**, 201101 \(2012\)](#). [cf. p.78]
- [56] M. Jarrell et J. E. Gubernatis. *Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data*. [Physics Reports **269**\(3\), 133–195 \(1996\)](#). [cf. p.79, 81, 83]
- [57] K. S. D. Beach. *Identifying the maximum entropy method as a special limit of stochastic analytic continuation*. [ArXiv e-prints \(2004\)](#). [cf. p.79]

- [58] D. Bergeron et A.-M. S. Tremblay. *Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation*. [ArXiv e-prints](#) (2015). [cf. p.79, 86, 87, 117, 182]
- [59] 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), 179–192 (1977). [cf. p.79]
- [60] K. S. D. Beach, R. J. Gooding et F. Marsiglio. *Reliable Padé analytical continuation method based on a high-accuracy symbolic computation algorithm*. [Phys. Rev. B](#) **61**, 5147–5157 (2000). [cf. p.79]
- [61] Udo von Toussaint. *Bayesian inference in physics*. [Rev. Mod. Phys.](#) **83**(3), 943–999 (2011). [cf. p.80]
- [62] E. T. Jaynes. *Information Theory and Statistical Mechanics*. [Phys. Rev.](#) **106**, 620–630 (1957). [cf. p.83]
- [63] S. F. Gull et J. Skilling. *Maximum entropy method in image processing*. [Communications, Radar and Signal Processing, IEE Proceedings F](#) **131**(6), 646–659 (1984). [cf. p.83]
- [64] J. H. de Boer et E. J. W. Verwey. *Semi-conductors with partially and with completely filled 3d -lattice bands*. [Proceedings of the Physical Society](#) **49**(4S), 59 (1937). [cf. p.92, 103]
- [65] N. F. Mott et R. Peierls. *Discussion of the paper by de Boer and Verwey*. [Proceedings of the Physical Society](#) **49**(4S), 72 (1937). [cf. p.92]
- [66] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman et T. M. Rice. *Metal-Insulator Transitions in Pure and Doped V_2O_3* . [Phys. Rev. B](#) **7**, 1920–1931 (1973). [cf. p.95, 103]
- [67] F. Lemay. *Des propriétés de l'état normal du modèle de Hubbard bidimensionnel*. [Thèse de Doctorat](#), Université de Sherbrooke, (2000). [cf. p.97]
- [68] N. F. Mott. *Metal-Insulator Transition*. [Rev. Mod. Phys.](#) **40**, 677–683 (1968). [cf. p.98]
- [69] S. Lefebvre, P. Wzietek, S. Brown, C. Bourbonnais, D. Jérôme, C. Mézière, M. Fourmigué et P. Batail. *Mott Transition, Antiferromagnetism, and Unconventional Superconductivity in Layered Organic Superconductors*. [Phys. Rev. Lett.](#) **85**(25), 5420–5423 (2000). [cf. p.98, 99]
- [70] B. J. Powell et R. H. McKenzie. *Strong electronic correlations in superconducting organic charge transfer salts*. [Journal of Physics : Condensed Matter](#) **18**(45), R827 (2006). [cf. p.98, 99]
- [71] P. Phillips. *Colloquium: Identifying the propagating charge modes in doped Mott insulators*. [Rev. Mod. Phys.](#) **82**, 1719–1742 (2010). [cf. p.98]
- [72] A. Reymbaut, M. Boulay, L. Fratino, G. Sordi, P. Sémon et A.-M. S. Tremblay. *Crossovers "above" the Mott transition at half-filling: a new perspective*. Non-publié, (2016). [cf. p.103]

- [73] B. J. Powell et R. H. McKenzie. *Half-Filled Layered Organic Superconductors and the Resonating-Valence-Bond Theory of the Hubbard-Heisenberg Model*. [Phys. Rev. Lett. **94**, 047004 \(2005\)](#). [cf. p.103, 113]
- [74] M. Vekić et S. R. White. *Pseudogap formation in the half-filled Hubbard model*. [Phys. Rev. B **47**\(2\), 1160–1163 \(1993\)](#). [cf. p.104, 199]
- [75] L. Xu, P. Kumar, S. V. Buldyrev, S.-H. Chen, P. H. Poole, F. Sciortino et H. E. Stanley. *Relation between the Widom line and the dynamic crossover in systems with a liquid–liquid phase transition*. [Proc. Nat. Acad. Sci. USA **102**\(46\), 16558–16562 \(2005\)](#). [cf. p.104]
- [76] P. F. McMillan et H. E. Stanley. *Fluid phases: Going supercritical*. [Nat. Phys. **6**\(7\), 479–480 \(2010\)](#). [cf. p.104]
- [77] H. Terletska, J. Vučičević, D. Tanasković et V. Dobrosavljević. *Quantum Critical Transport near the Mott Transition*. [Phys. Rev. Lett. **107**, 026401 \(2011\)](#). [cf. p.104, 117]
- [78] J. Vučičević, H. Terletska, D. Tanasković et V. Dobrosavljević. *Finite-temperature crossover and the quantum Widom line near the Mott transition*. [Phys. Rev. B **88**, 075143 \(2013\)](#). [cf. p.104, 117]
- [79] G. Sordi, K. Haule et A. M. S. Tremblay. *Finite Doping Signatures of the Mott Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model*. [Phys. Rev. Lett. **104**\(22\), 226402 \(2010\)](#). [cf. p.105]
- [80] G. Sordi, K. Haule et A.-M. S. Tremblay. *Mott physics and first-order transition between two metals in the normal-state phase diagram of the two-dimensional Hubbard model*. [Phys. Rev. B **84**, 075161 \(2011\)](#). [cf. p.105]
- [81] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule et A.-M. S. Tremblay. *Pseudogap temperature as a Widom line in doped Mott insulators*. [Scientific Reports **2** \(2012\)](#). [cf. p.105, 117, 147, 218]
- [82] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule et A.-M. S. Tremblay. *c-axis resistivity, pseudogap, superconductivity, and Widom line in doped Mott insulators*. [Phys. Rev. B **87**, 041101 \(2013\)](#). [cf. p.105, 243]
- [83] G. Sordi, P. Sémon, K. Haule et A.-M. S. Tremblay. *Strong Coupling Superconductivity, Pseudogap, and Mott Transition*. [Phys. Rev. Lett. **108**, 216401 \(2012\)](#). [cf. p.105, 243]
- [84] N. Elstner, R. R. P. Singh et A. P. Young. *Finite temperature properties of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice*. [Phys. Rev. Lett. **71**, 1629–1632 \(1993\)](#). [cf. p.112]
- [85] N. Elstner, R. R. P. Singh et A. P. Young. *Spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the square and triangular lattices: A comparison of finite temperature properties*. [Journal of Applied Physics **75**\(10\), 5943–5945 \(1994\)](#). [cf. p.112]

- [86] B. J. Powell et R. H. McKenzie. *Quantum frustration in organic Mott insulators: from spin liquids to unconventional superconductors*. [Reports on Progress in Physics](#) **74**(5), 056501 (2011). [cf. p.112]
- [87] J. Merino, B. J. Powell et R. H. McKenzie. *Ferromagnetism, paramagnetism, and a Curie-Weiss metal in an electron-doped Hubbard model on a triangular lattice*. [Phys. Rev. B](#) **73**, 235107 (2006). [cf. p.113]
- [88] A.-M. Daré, L. Raymond, G. Albinet et A.-M. S. Tremblay. *Interaction-induced adiabatic cooling for antiferromagnetism in optical lattices*. [Phys. Rev. B](#) **76**, 064402 (2007). [cf. p.114]
- [89] T. Paiva, R. T. Scalettar, C. Huscroft et A. K. McMahan. *Signatures of spin and charge energy scales in the local moment and specific heat of the half-filled two-dimensional Hubbard model*. [Phys. Rev. B](#) **63**, 125116 (2001). [cf. p.115]
- [90] S. Moukouri et M. Jarrell. *Absence of a Slater Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model*. [Phys. Rev. Lett.](#) **87**, 167010 (2001). [cf. p.115]
- [91] B. Kyung, J. S. Landry, D. Poulin et A.-M. S. Tremblay. *Comment on "Absence of a Slater transition in the two-dimensional Hubbard model"*. [Phys. Rev. Lett.](#) **90**, 099702 – 1 (2003). [cf. p.115]
- [92] E. Gull, O. Parcollet, P. Werner et A. J. Millis. *Momentum-sector-selective metal-insulator transition in the eight-site dynamical mean-field approximation to the Hubbard model in two dimensions*. [Phys. Rev. B](#) **80**, 245102 (2009). [cf. p.116]
- [93] M. Balzer, B. Kyung, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay et M. Potthoff. *First-order Mott transition at zero temperature in two dimensions: Variational plaquette study*. [Euro. Phys. Lett.](#) **85**(1), 17002 (2009). [cf. p.117, 199]
- [94] T. Furukawa, K. Miyagawa, H. Taniguchi, R. Kato et K. Kanoda. *Quantum criticality of Mott transition in organic materials*. [Nat Phys](#) **11**(3), 221–224 (2015). Letter. [cf. p.117]
- [95] A. Moreo, S. Haas, A. W. Sandvik et E. Dagotto. *Quasiparticle dispersion of the t - J and Hubbard models*. [Phys. Rev. B](#) **51**, 12045–12048 (1995). [cf. p.118]
- [96] R. Preuss, W. Hanke et W. von der Linden. *Quasiparticle Dispersion of the 2D Hubbard Model: From an Insulator to a Metal*. [Phys. Rev. Lett.](#) **75**, 1344–1347 (1995). [cf. p.118]
- [97] B. Kyung, S. S. Kancharla, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay, M. Civelli et G. Kotliar. *Pseudogap induced by short-range spin correlations in a doped Mott insulator*. [Physical Review B](#) **73**(16), 165114 (2006). [cf. p.118]
- [98] Dirk van Delft et Peter Kes. *The Discovery of Superconductivity*. [Physics Today](#) **63**(3), 38 (2010). [cf. p.123]
- [99] W. Meissner et R. Ochsenfeld. *Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit*. [Naturwissenschaften](#) **21**(44), 787–788 (1933). [cf. p.123]

- [100] F. London et H. London. *The Electromagnetic Equations of the Supraconductor. Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **149**(866), 71–88 (1935). [cf. p.124]
- [101] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer. *Microscopic Theory of Superconductivity*. *Phys. Rev.* **106**, 162–164 (1957). [cf. p.124]
- [102] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer. *Theory of Superconductivity*. *Phys. Rev.* **108**, 1175–1204 (1957). [cf. p.124]
- [103] B. S. Deaver et W. M. Fairbank. *Experimental Evidence for Quantized Flux in Superconducting Cylinders*. *Phys. Rev. Lett.* **7**, 43–46 (1961). [cf. p.124]
- [104] R. Doll et M. Näbauer. *Experimental Proof of Magnetic Flux Quantization in a Superconducting Ring*. *Phys. Rev. Lett.* **7**, 51–52 (1961). [cf. p.124]
- [105] G. M. Eliashberg. *Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor*. *Sov. Phys. JETP* **11**, 696–702 (1960). [cf. p.124]
- [106] P. Morel et P. W. Anderson. *Calculation of the Superconducting State Parameters with Retarded Electron-Phonon Interaction*. *Phys. Rev.* **125**, 1263–1271 (1962). [cf. p.124]
- [107] A. B. Migdal. *Interaction between Electrons and Lattice Vibrations in a Normal Metal*. *Sov. Phys. JETP* **34**(6), 996 (1958). [cf. p.124]
- [108] F. Marsiglio et J.P. Carbotte. *Electron-Phonon Superconductivity*. Dans *Superconductivity*, K.H. Bennemann et John B. Ketterson, 73–162. Springer Berlin Heidelberg (2008). [cf. p.124, 134]
- [109] A. Y. Liu, I. I. Mazin et J. Kortus. *Beyond Eliashberg Superconductivity in MgB₂: Anharmonicity, Two-Phonon Scattering, and Multiple Gaps*. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 087005 (2001). [cf. p.125]
- [110] M. Iavarone, G. Karapetrov, A. E. Koshelev, W. K. Kwok, G. W. Crabtree, D. G. Hinks, W. N. Kang, Eun-Mi Choi, Hyun Jung Kim, Hyeong-Jin Kim et S. I. Lee. *Two-Band Superconductivity in MgB₂*. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 187002 (2002). [cf. p.125]
- [111] J. G. Bednorz et K. A. Müller. *Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**(2), 189–193 (1986). [cf. p.125]
- [112] G. F. Sun, K. W. Wong, B. R. Xu, Y. Xin et D. F. Lu. *T_c enhancement of HgBa₂Ca₂Cu₃O_{8+δ} by Tl substitution*. *Physics Letters A* **192**(1), 122 – 124 (1994). [cf. p.126]
- [113] L. Gao, Y. Y. Xue, F. Chen, Q. Xiong, R. L. Meng, D. Ramirez, C. W. Chu, J. H. Eggert et H. K. Mao. *Superconductivity up to 164 K in HgBa₂Ca_{m-1}Cu_mO_{2m+2+δ} (m =1, 2, and 3) under quasihydrostatic pressures*. *Phys. Rev. B* **50**, 4260–4263 (1994). [cf. p.126]

- [114] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano et H. Hosono. *Iron-Based Layered Superconductor* $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05 - 0.12$) with $T_c = 26$ K. [Journal of the American Chemical Society](#) **130**(11), 3296–3297 (2008). [cf. p.126]
- [115] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov et S. I. Shylin. *Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system*. [Nature](#) **525**(7567), 73–76 (2015). Letter. [cf. p.126]
- [116] A.-M.S. Tremblay. *BCS theory*. Dans *Notes de cours pour le Problème à N-corps*, André-Marie Tremblay. (2014). [cf. p.133]
- [117] J. Bardeen et D. Pines. *Electron-Phonon Interaction in Metals*. [Phys. Rev.](#) **99**, 1140–1150 (1955). [cf. p.134]
- [118] Y. Nambu. *Quasi-Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity*. [Phys. Rev.](#) **117**, 648–663 (1960). [cf. p.136]
- [119] D. J. Scalapino, J. R. Schrieffer et J. W. Wilkins. *Strong-Coupling Superconductivity. I*. [Phys. Rev.](#) **148**, 263–279 (1966). [cf. p.137, 172, 181, 182, 184]
- [120] J. M. Rowell, P. W. Anderson et D. E. Thomas. *Image of the Phonon Spectrum in the Tunneling Characteristic Between Superconductors*. [Phys. Rev. Lett.](#) **10**, 334–336 (1963). [cf. p.137]
- [121] J. R. Schrieffer, D. J. Scalapino et J. W. Wilkins. *Effective Tunneling Density of States in Superconductors*. [Phys. Rev. Lett.](#) **10**, 336–339 (1963). [cf. p.137]
- [122] W. L. McMillan et J. M. Rowell. *Lead Phonon Spectrum Calculated from Superconducting Density of States*. [Phys. Rev. Lett.](#) **14**(4), 108–112 (1965). [cf. p.137]
- [123] D. Poilblanc et D. J. Scalapino. *Calculation of $\Delta(\mathbf{k}, \omega)$ for a two-dimensional t - J cluster*. [Phys. Rev. B](#) **66**, 052513 (2002). [cf. p.137]
- [124] E. Gull et A. J. Millis. *Pairing glue in the two-dimensional Hubbard model*. [Phys. Rev. B](#) **90**, 041110 (2014). [cf. p.137, 175]
- [125] F. Wenger et S. Östlund. *d -wave pairing in tetragonal superconductors*. [Phys. Rev. B](#) **47**, 5977–5983 (1993). [cf. p.138]
- [126] C. C. Tsuei et J. R. Kirtley. *Pairing symmetry in cuprate superconductors*. [Rev. Mod. Phys.](#) **72**, 969–1016 (2000). [cf. p.138]
- [127] J. E. Hirsch et H. Q. Lin. *Pairing in the two-dimensional Hubbard model: A Monte Carlo study*. [Phys. Rev. B](#) **37**, 5070–5074 (1988). [cf. p.139]
- [128] Xi Chen, J. P. F. LeBlanc et Emanuel Gull. *Superconducting Fluctuations in the Normal State of the Two-Dimensional Hubbard Model*. [Phys. Rev. Lett.](#) **115**, 116402 (2015). [cf. p.139]
- [129] K. A. Musaelian, J. Betouras, A. V. Chubukov et R. Joynt. *Mixed-symmetry superconductivity in two-dimensional Fermi liquids*. [Phys. Rev. B](#) **53**, 3598–3603 (1996). [cf. p.140]

- [130] S. Diehl, T. Methfessel, U. Tutsch, H. Schubert, M. Lang, J. Müller, M. Huth, D. Guterding, M. Altmeyer, H. O. Jeschke, R. Valenti, M. Jourdan et H.-J. Elmers. *Evidence for mixed-symmetry superconductivity in a correlated organic metal*. [ArXiv e-prints](#) (2015). [cf. p.140]
- [131] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois et A.-M. S. Tremblay. *Competition between Antiferromagnetism and Superconductivity in High- T_c Cuprates*. [Phys. Rev. Lett.](#) **94**, 156404 (2005). [cf. p.141]
- [132] M. Capone et G. Kotliar. *Competition between d -wave superconductivity and antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model*. [Phys. Rev. B](#) **74**, 054513 (2006). [cf. p.141]
- [133] S. S. Kancharla, B. Kyung, D. Senechal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar et A.-M. S. Tremblay. *Anomalous superconductivity and its competition with antiferromagnetism in doped Mott insulators*. [Phys. Rev. B](#) **77**(18), 184516 (2008). [cf. p.141]
- [134] F. Laliberté. *Fluctuations supraconductrices comme source de l'effet Nernst dans un cuprate dopé aux électrons*. [Thèse de Doctorat](#), Université de Sherbrooke, (2013). [cf. p.143]
- [135] H. Alloul, T. Ohno et P. Mendels. ^{89}Y NMR evidence for a fermi-liquid behavior in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. [Phys. Rev. Lett.](#) **63**, 1700–1703 (1989). [cf. p.144]
- [136] E. M. Motoyama, G. Yu, I. M. Vishik, O. P. Vajk, P. K. Mang et M. Greven. *Spin correlations in the electron-doped high-transition-temperature superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$* . [Nature](#) **445**(7124), 186–189 (2007). [cf. p.144]
- [137] B. Kyung, V. Hankevych, A.-M. Daré et A.-M. S. Tremblay. *Pseudogap and Spin Fluctuations in the Normal State of the Electron-Doped Cuprates*. [Phys. Rev. Lett.](#) **93**, 147004 (2004). [cf. p.144]
- [138] D. Bergeron, D. Chowdhury, M. Punk, S. Sachdev et A.-M. S. Tremblay. *Breakdown of Fermi liquid behavior at the $(\pi, \pi) = 2k_F$ spin-density wave quantum-critical point: The case of electron-doped cuprates*. [Phys. Rev. B](#) **86**, 155123 (2012). [cf. p.144]
- [139] D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Hot Spots and Pseudogaps for Hole- and Electron-Doped High-Temperature Superconductors*. [Phys. Rev. Lett.](#) **92**, 126401 (2004). [cf. p.144]
- [140] C. Weber, K. Haule et G. Kotliar. *Strength of correlations in electron- and hole-doped cuprates*. [Nature Physics](#) **6**(8), 574–578 (2010). [cf. p.144]
- [141] N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf, J. Levallois, J.-B. Bonnemaison, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy et L. Taillefer. *Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high- T_c superconductor*. [Nature](#) **447**(7144), 565–568 (2007). [cf. p.144, 145]
- [142] S. E. Sebastian et C. Proust. *Quantum Oscillations in Hole-Doped Cuprates*. [Annual Review of Condensed Matter Physics](#) **6**(1), 411–430 (2015). [cf. p.144]

- [143] Gabriel Kotliar et Jialin Liu. *Superexchange mechanism and d-wave superconductivity*. *Phys. Rev. B* **38**, 5142(R) (1988). [cf. p.144, 161]
- [144] V. J. Emery et S. A. Kivelson. *Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density*. *Nature* **374**(6521), 434–437 (1995). [cf. p.145]
- [145] V. J. Emery et S. A. Kivelson. *Superconductivity in Bad Metals*. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3253–3256 (1995). [cf. p.145]
- [146] J. Chang, N. Doiron-Leyraud, O. Cyr-Choiniere, G. Grissonnanche, F. Laliberte, E. Hassinger, J-Ph Reid, R. Daou, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi et Louis Taillefer. *Decrease of upper critical field with underdoping in cuprate superconductors*. *Nat Phys* **8**(10), 751–756 (2012). [cf. p.146]
- [147] F. F. Tafti, F. Laliberté, M. Dion, J. Gaudet, P. Fournier et Louis Taillefer. *Nernst effect in the electron-doped cuprate superconductor $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: Superconducting fluctuations, upper critical field H_{c2} , and the origin of the T_c dome*. *Phys. Rev. B* **90**, 024519 (2014). [cf. p.146]
- [148] K.-Y. Yang, T. M. Rice et F.-C. Zhang. *Phenomenological theory of the pseudogap state*. *Phys. Rev. B* **73**, 174501 (2006). [cf. p.146, 153]
- [149] P. W. Anderson. *The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity*. *Science* **235**(4793), 1196–1198 (1987). [cf. p.146, 159, 161]
- [150] P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou et T. Hsu. *Resonating-Valence-Bond theory of phase transitions and superconductivity in La_2CuO_4 -based compounds*. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2790–2793 (1987). [cf. p.146, 161]
- [151] E. Schachinger et J. P. Carbotte. *Effect of pseudogap formation on the superconducting gap in underdoped cuprates*. *Phys. Rev. B* **81**, 214521 (2010). [cf. p.146, 153]
- [152] A. J. H. Borne, J. P. Carbotte et E. J. Nicol. *Signature of pseudogap formation in the density of states of underdoped cuprates*. *Phys. Rev. B* **82**, 024521 (2010). [cf. p.146, 153]
- [153] C. M. Varma. *Non-Fermi-liquid states and pairing instability of a general model of copper oxide metals*. *Phys. Rev. B* **55**, 14554–14580 (1997). [cf. p.146]
- [154] S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr et C. Nayak. *Hidden order in the cuprates*. *Phys. Rev. B* **63**, 094503 (2001). [cf. p.146]
- [155] C. M. Varma. *Pseudogap Phase and the Quantum-Critical Point in Copper-Oxide Metals*. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3538–3541 (1999). [cf. p.146]
- [156] M. E. Simon et C. M. Varma. *Detection and Implications of a Time-Reversal Breaking State in Underdoped Cuprates*. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 247003 (2002). [cf. p.146]
- [157] B. Fauqué, Y. Sidis, V. Hinkov, S. Pailhès, C. T. Lin, X. Chaud et P. Bourges. *Magnetic Order in the Pseudogap Phase of High- T_c Superconductors*. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 197001 (2006). [cf. p.146]

- [158] J. Xia, E. Schemm, G. Deutscher, S. A. Kivelson, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, W. Siemons, G. Koster, M. M. Fejer et A. Kapitulnik. *Polar Kerr-Effect Measurements of the High-Temperature $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ Superconductor: Evidence for Broken Symmetry near the Pseudogap Temperature*. [*Phys. Rev. Lett.* **100**, 127002](#) (2008). [cf. p.146]
- [159] Y. Li, V. Baledent, G. Yu, N. Barisic, K. Hradil, R. A. Mole, Y. Sidis, P. Steffens, X. Zhao, P. Bourges et M. Greven. *Hidden magnetic excitation in the pseudogap phase of a high- T_c superconductor*. [*Nature* **468**\(7321\), 283–285](#) (2010). [cf. p.146]
- [160] C. Varma. *High-temperature superconductivity: Mind the pseudogap*. [*Nature* **468**\(7321\), 184–185](#) (2010). [cf. p.146]
- [161] A. Shekhter, B. J. Ramshaw, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, F. F. Balakirev, R. D. McDonald, J. B. Betts, S. C. Riggs et A. Migliori. *Bounding the pseudogap with a line of phase transitions in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$* . [*Nature* **498**\(7452\), 75–77](#) (2013). [cf. p.146, 147]
- [162] J. Zaanen. *High-temperature superconductivity: The sound of a hidden order*. [*Nature* **498**\(7452\), 41–42](#) (2013). [cf. p.146]
- [163] J. E. Sonier, V. Pacradouni, S. A. Sabok-Sayr, W. N. Hardy, D. A. Bonn, R. Liang et H. A. Mook. *Detection of the Unusual Magnetic Orders in the Pseudogap Region of a High-Temperature Superconducting $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ Crystal by Muon-Spin Relaxation*. [*Phys. Rev. Lett.* **103**, 167002](#) (2009). [cf. p.146]
- [164] S. Strässle, B. Graneli, M. Mali, J. Roos et H. Keller. *Absence of Orbital Currents in Superconducting $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ Using a Zeeman-Perturbed Nuclear-Quadrupole-Resonance Technique*. [*Phys. Rev. Lett.* **106**, 097003](#) (2011). [cf. p.146]
- [165] R. Daou, J. Chang, D. LeBoeuf, O. Cyr-Choiniere, F. Laliberte, N. Doiron-Leyraud, B. J. Ramshaw, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy et L. Taillefer. *Broken rotational symmetry in the pseudogap phase of a high- T_c superconductor*. [*Nature* **463**\(7280\), 519–522](#) (2010). [cf. p.147]
- [166] O. Cyr-Choinière, G. Grissonnanche, S. Badoux, J. Day, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud et Louis Taillefer. *Two types of nematicity in the phase diagram of the cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$* . [*Phys. Rev. B* **92**, 224502](#) (2015). [cf. p.147, 148]
- [167] S. Okamoto, D. Sénéchal, M. Civelli et A.-M. S. Tremblay. *Dynamical electronic nematicity from Mott physics*. [*Phys. Rev. B* **82**, 180511](#) (2010). [cf. p.147]
- [168] O. Cyr-Choinière, D. LeBoeuf, S. Badoux, S. Dufour-Beauséjour, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Suppression of charge order by pressure in the cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$: Restoring the full superconducting dome*. [*ArXiv e-prints*](#) (2015). [cf. p.147, 148]
- [169] S. Blanco-Canosa, A. Frano, T. Loew, Y. Lu, J. Porras, G. Ghiringhelli, M. Minola, C. Mazzoli, L. Braicovich, E. Schierle, E. Weschke, M. Le Tacon et B. Kei-

- mer. *Momentum-Dependent Charge Correlations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ Superconductors Probed by Resonant X-Ray Scattering: Evidence for Three Competing Phases*. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 187001 (2013). [cf. p.147, 148, 150]
- [170] S. Sakai, M. Civelli et M. Imada. *Evidence for hidden fermion that triggers high-temperature superconductivity in cuprates*. *ArXiv e-prints* (2014). [cf. p.147]
- [171] S. Sakai, M. Civelli, Y. Nomura et M. Imada. *Hidden fermionic excitation in the superconductivity of the strongly attractive Hubbard model*. *Phys. Rev. B* **92**, 180503(R) (2015). [cf. p.147]
- [172] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura et S. Uchida. *Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors*. *Nature* **375**(6532), 561–563 (1995). [cf. p.148]
- [173] J. E. Hoffman, E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, H. Eisaki, S. Uchida et J. C. Davis. *A Four Unit Cell Periodic Pattern of Quasi-Particle States Surrounding Vortex Cores in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* . *Science* **295**(5554), 466–469 (2002). [cf. p.148]
- [174] D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Levallois, R. Daou, J.-B. Bonnemaïson, N. E. Hussey, L. Balicas, B. J. Ramshaw, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, S. Adachi, C. Proust et L. Taillefer. *Electron pockets in the Fermi surface of hole-doped high- T_c superconductors*. *Nature* **450**(7169), 533–536 (2007). [cf. p.148]
- [175] J. Chang, R. Daou, C. Proust, D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, F. Laliberté, B. Pingault, B. J. Ramshaw, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, H. Takagi, A. B. Antunes, I. Sheikin, K. Behnia et L. Taillefer. *Nernst and Seebeck Coefficients of the Cuprate Superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$: A Study of Fermi Surface Reconstruction*. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 057005 (2010). [cf. p.148]
- [176] N. Doiron-Leyraud, S. Lepault, O. Cyr-Choinière, B. Vignolle, G. Grissonnanche, F. Laliberté, J. Chang, N. Barišić, M. K. Chan, L. Ji, X. Zhao, Y. Li, M. Greven, C. Proust et L. Taillefer. *Hall, Seebeck, and Nernst Coefficients of Underdoped $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$: Fermi-Surface Reconstruction in an Archetypal Cuprate Superconductor*. *Phys. Rev. X* **3**, 021019 (2013). [cf. p.148]
- [177] S. Badoux, S. A. A. Afshar, B. Michon, A. Ouellet, S. Fortier, D. LeBoeuf, T. P. Croft, C. Lester, S. M. Hayden, H. Takagi, K. Yamada, D. Graf, N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Seebeck coefficient of underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ in high magnetic fields : Fermi-surface reconstruction by charge-density-wave order*. *ArXiv e-prints* (2015). [cf. p.148]
- [178] J. Chang, N. Doiron-Leyraud, F. Laliberté, R. Daou, D. LeBoeuf, B. J. Ramshaw, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, C. Proust, I. Sheikin, K. Behnia et L. Taillefer. *Nernst effect in the cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$: Broken rotational and translational symmetries*. *Phys. Rev. B* **84**, 014507 (2011). [cf. p.148]
- [179] G. Ghiringhelli, M. Le Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N. B. Brookes, G. M. De Luca, A. Frano, D. G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. Moretti Sala, D. C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle, R. Sutarto, G. A. Sawatzky, E. Weschke,

- B. Keimer et L. Braicovich. *Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in* (Y, Nd)Ba₂Cu₃O_{6+x}. *Science* **337**(6096), 821–825 (2012). [cf. p.148]
- [180] R. Comin et A. Damascelli. *Resonant x-ray scattering studies of charge order in cuprates*. *ArXiv e-prints* (2015). [cf. p.148, 149]
- [181] J. Chang, E. Blackburn, A. T. Holmes, N. B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, A. Watenphul, M. v Zimmermann, E. M. Forgan et S. M. Hayden. *Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in YBa₂Cu₃O_{6.67}*. *Nature Physics* **8**(12), 871–876 (2012). [cf. p.148]
- [182] G. Grissonnanche, O. Cyr-Choinière, F. Laliberté, S. René de Cotret, A. Juneau-Fecteau, S. Dufour-Beauséjour, M.-È. Delage, D. LeBoeuf, J. Chang, B. J. Ramshaw, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, S. Adachi, N. E. Hussey, B. Vignolle, C. Proust, M. Sutherland, S. Krämer, J.-H. Park, D. Graf, N. Doiron-Leyraud et Louis Taillefer. *Direct measurement of the upper critical field in cuprate superconductors*. *Nat Commun* **5** (2014). [cf. p.148]
- [183] J. M. Tranquada, J. D. Axe, N. Ichikawa, A. R. Moodenbaugh, Y. Nakamura et S. Uchida. *Coexistence of, and Competition between, Superconductivity and Charge-Stripe Order in La_{1.6-x}Nd_{0.4}Sr_xCuO₄*. *Phys. Rev. Lett.* **78**(2), 338–341 (1997). [cf. p.149]
- [184] K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, H. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, R. J. Birgeneau, M. Greven, M. A. Kastner et Y. J. Kim. *Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting-transition temperature in La_{2-x}Sr_xCuO₄*. *Phys. Rev. B* **57**, 6165–6172 (1998). [cf. p.149]
- [185] L. Taillefer. *Superconductivity and quantum criticality*. *La physique au Canada/Physics in Canada* **67**(0), 109–112 (2011). [cf. p.150]
- [186] N. Doiron-Leyraud et L. Taillefer. *Quantum critical point for stripe order: An organizing principle of cuprate superconductivity*. *Physica C : Superconductivity* **481**(0), 161–167 (2012). [cf. p.150]
- [187] S. Sachdev. *Where is the quantum critical point in the cuprate superconductors?* *physica status solidi (b)* **247**(3), 537–543 (2010). [cf. p.150]
- [188] S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberté, G. Grissonnanche, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Béard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer et C. Proust. *Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor*. *ArXiv e-prints* (2015). [cf. p.150, 151, 154]
- [189] J. L. Tallon, C. Bernhard, G. V. M. Williams et J. W. Loram. *Zn-induced T_c Reduction in High- T_c Superconductors: Scattering in the Presence of a Pseudogap*. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5294–5297 (1997). [cf. p.150, 151]

- [190] J. L. Tallon et J. W. Loram. *The doping dependence of T^* – what is the real high- T_c phase diagram?* [Physica C : Superconductivity](#) **349**(1–2), 53 – 68 (2001). [cf. p.150, 151, 154]
- [191] S. Blanco-Canosa, A. Frano, E. Schierle, J. Porras, T. Loew, M. Minola, M. Bluschke, E. Weschke, B. Keimer et M. Le Tacon. *Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$.* [Phys. Rev. B](#) **90**, 054513 (2014). [cf. p.150, 151]
- [192] M. Hücker, N. B. Christensen, A. T. Holmes, E. Blackburn, E. M. Forgan, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, O. Gutowski, M. v. Zimmermann, S. M. Hayden et J. Chang. *Competing charge, spin, and superconducting orders in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$.* [Phys. Rev. B](#) **90**, 054514 (2014). [cf. p.151]
- [193] D. Haug, V. Hinkov, Y. Sidis, P. Bourges, N. B. Christensen, A. Ivanov, T. Keller, C. T. Lin et B. Keimer. *Neutron scattering study of the magnetic phase diagram of underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$.* [New Journal of Physics](#) **12**(10), 105006 (2010). [cf. p.151]
- [194] T. Wu, H. Mayaffre, S. Kramer, M. Horvatic, C. Berthier, W. N. Hardy, R. Liang, D. A. Bonn et M.-H. Julien. *Magnetic-field-induced charge-stripe order in the high-temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$.* [Nature](#) **477**(7363), 191–194 (2011). [cf. p.151]
- [195] T. Wu, H. Mayaffre, S. Krämer, M. Horvatic, C. Berthier, P. L. Kuhns, A. P. Reyes, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn et M.-H. Julien. *Emergence of charge order from the vortex state of a high-temperature superconductor.* [Nat Commun](#) **4** (2013). Article. [cf. p.151]
- [196] D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, B. Vignolle, M. Sutherland, B. J. Ramshaw, J. Levallois, R. Daou, F. Laliberté, O. Cyr-Choinière, J. Chang, Y. J. Jo, L. Balicas, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, C. Proust et L. Taillefer. *Lifshitz critical point in the cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ from high-field Hall effect measurements.* [Phys. Rev. B](#) **83**, 054506 (2011). [cf. p.151]
- [197] Y. Ando, Y. Kurita, S. Komiya, S. Ono et K. Segawa. *Evolution of the Hall Coefficient and the Peculiar Electronic Structure of the Cuprate Superconductors.* [Phys. Rev. Lett.](#) **92**, 197001 (2004). [cf. p.153, 154]
- [198] J. G. Storey. *Hall effect and Fermi surface reconstruction via electron pockets in the high- T_c cuprates.* [ArXiv e-prints](#) (2015). [cf. p.153]
- [199] A. P. Mackenzie, S. R. Julian, D. C. Sinclair et C. T. Lin. *Normal-state magnetotransport in superconducting $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ to millikelvin temperatures.* [Phys. Rev. B](#) **53**, 5848–5855 (1996). [cf. p.154]
- [200] N. E. Hussey. *Phenomenology of the normal state in-plane transport properties of high- T_c cuprates.* [Journal of Physics : Condensed Matter](#) **20**(12), 123201 (2008). [cf. p.154]

- [201] K. Segawa et Y. Ando. *Intrinsic Hall response of the CuO₂ planes in a chain-plane composite system of YBa₂Cu₃O_y*. [Phys. Rev. B **69**, 104521](#) (2004). [cf. p.154]
- [202] C. T. Chen, F. Sette, Y. Ma, M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, W. M. C. Foulkes, M. Schulter, S-W. Cheong, A. S. Cooper, L. W. Rupp, B. Batlogg, Y. L. Soo, Z. H. Ming, A. Krol et Y. H. Kao. *Electronic states in La_{2-x}Sr_xCuO_{4+δ} probed by soft-x-ray absorption*. [Phys. Rev. Lett. **66**, 104–107](#) (1991). [cf. p.157]
- [203] C. Weber, C. Yee, K. Haule et G. Kotliar. *Scaling of the transition temperature of hole-doped cuprate superconductors with the charge-transfer energy*. [EPL \(Europhysics Letters\) **100**\(3\), 37001](#) (2012). [cf. p.158]
- [204] F. C. Zhang et T. M. Rice. *Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides*. [Phys. Rev. B **37**, 3759–3761](#) (1988). [cf. p.158]
- [205] A. J. Leggett. *A theoretical description of the new phases of liquid ³He*. [Rev. Mod. Phys. **47**, 331–414](#) (1975). [cf. p.159]
- [206] D. D. Osheroff. *Superfluidity in ³He: Discovery and understanding*. [Rev. Mod. Phys. **69**, 667–682](#) (1997). [cf. p.159]
- [207] D. M. Lee. *The extraordinary phases of liquid ³He*. [Rev. Mod. Phys. **69**, 645–666](#) (1997). [cf. p.159]
- [208] A. J. Leggett. *Nobel Lecture: Superfluid ³He: the early days as seen by a theorist*. [Rev. Mod. Phys. **76**, 999–1011](#) (2004). [cf. p.159]
- [209] M. T. Beal-Monod, C. Bourbonnais et V. J. Emery. *Possible superconductivity in nearly antiferromagnetic itinerant fermion systems*. [Phys. Rev. B **34**, 7716 – 20](#) (1986). [cf. p.159, 161]
- [210] D. J. Scalapino, E. Loh et J. E. Hirsch. *d-wave pairing near a spin-density-wave instability*. [Phys. Rev. B **34**, 8190–8192](#) (1986). [cf. p.159, 161]
- [211] K. Miyake, S. Schmitt-Rink et C. M. Varma. *Spin-fluctuation-mediated even-parity pairing in heavy-fermion superconductors*. [Phys. Rev. B **34**, 6554–6556](#) (1986). [cf. p.159]
- [212] P. W. Anderson. *Is there glue in cuprate superconductors?* [Science **316**\(5832\), 1705–1707](#) (2007). [cf. p.161, 162]
- [213] D. J. Scalapino. [E-letter response to Science **316**, 1705](#) (2007). [cf. p.161]
- [214] D. J. Scalapino. *A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors*. [Rev. Mod. Phys. **84**, 1383–1417](#) (2012). [cf. p.161]
- [215] J. P. Carbotte, E. Schachinger et D. N. Basov. *Coupling strength of charge carriers to spin fluctuations in high-temperature superconductors*. [Nature **401**\(6751\), 354](#) (1999). [cf. p.161]
- [216] M. Eschrig et M. R. Norman. *Effect of the magnetic resonance on the electronic spectra of high-*T_c* superconductors*. [Phys. Rev. B **67**, 144503](#) (2003). [cf. p.161]

- [217] M. R. Norman et A. V. Chubukov. *High-frequency behavior of the infrared conductivity of cuprates*. *Phys. Rev. B* **73**, 140501 (2006). [cf. p.161]
- [218] A. Reymbaut, D. Bergeron et A.-M. S. Tremblay. *Maximum entropy analytic continuation for spectral functions with nonpositive spectral weight*. *Phys. Rev. B* **92**, 060509(R) (2015). [cf. p.167]
- [219] B. Kyung, D. Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Pairing dynamics in strongly correlated superconductivity*. *Phys. Rev. B* **80**(20), 205109 (2009). [cf. p.171, 172, 187, 201]
- [220] M. Jarrell. *The Maximum Entropy Method: Analytic Continuation of QMC Data*. Dans *Correlated Electrons: From Models to Materials*, E. Pavarini, F. Koch, E. Anders et M. Jarrell, volume 3, chapitre 10. Verlag des Forschungszentrum (2012). [cf. p.175]
- [221] E. Gull et A. J. Millis. *Quasiparticle properties of the superconducting state of the two-dimensional Hubbard model*. *Phys. Rev. B* **91**, 085116 (2015). [cf. p.175]
- [222] T. Bzdušek. *Anomalous Spectral Function of a Superconductor*. *Mémoire de Maîtrise*, Comenius University in Bratislava, (2013). [cf. p.188]
- [223] T. Bzdušek et R. Hlubina. *What is the pairing glue in the cuprates? Insights from normal and anomalous propagators*. *Philosophical Magazine* **95**(5-6), 609–621 (2015). [cf. p.188]
- [224] B. Kyung et A.-M. S. Tremblay. Non-publié, (2007). [cf. p.189]
- [225] D. Sénéchal, A. G. R. Day, V. Bouliane et A.-M. S. Tremblay. *Resilience of d-wave superconductivity to nearest-neighbor repulsion*. *Phys. Rev. B* **87**, 075123 (2013). [cf. p.195, 200, 201, 202, 204, 207, 211]
- [226] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen et O. K. Andersen. *Band-Structure Trend in Hole-Doped Cuprates and Correlation with T_{cmax}* . *Phys. Rev. Lett.* **87**(4), 047003 (2001). [cf. p.195]
- [227] S. Onari, R. Arita, K. Kuroki et H. Aoki. *Phase diagram of the two-dimensional extended Hubbard model: Phase transitions between different pairing symmetries when charge and spin fluctuations coexist*. *Phys. Rev. B* **70**, 094523 (2004). [cf. p.200]
- [228] S. Raghu, E. Berg, A. V. Chubukov et S. A. Kivelson. *Effects of longer-range interactions on unconventional superconductivity*. *Phys. Rev. B* **85**, 024516 (2012). [cf. p.200]
- [229] Paul Sabatier. *Oscillations Quantiques et Magnéto-transport dans des Systèmes à Fortes Corrélations Électroniques*. Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, (2008). [cf. p.205]
- [230] Y. Ando et K. Segawa. *Magnetoresistance of Untwinned $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ Single Crystals in a Wide Range of Doping: Anomalous Hole-Doping Dependence of the Coherence Length*. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167005 (2002). [cf. p.205]

- [231] A. Reymbaut, M. Fellous Asiani, L. Fratino, M. Charlebois, G. Sordi et A.-M. S. Tremblay. *Antagonist effects of nearest-neighbor repulsion on the pairing dynamics of the extended Hubbard model*. Non-publié, (2016). [cf. p.211]
- [232] A. Reymbaut, M. Fellous Asiani, L. Fratino, M. Charlebois, G. Sordi et A.-M. S. Tremblay. *Gap to T_c ratio of high-temperature superconductors within the extended Hubbard model*. Non-publié, (2016). [cf. p.211]
- [233] S. M. Hayden, G. Aeppli, R. Osborn, A. D. Taylor, T. G. Perring, S-W. Cheong et Z. Fisk. *High-energy spin waves in La_2CuO_4* . [Phys. Rev. Lett. **67**, 3622–3625](#) (1991). [cf. p.211]
- [234] T. J. Reber, S. Parham, N. C. Plumb, Y. Cao, H. Li, Z. Sun, Q. Wang, H. Iwasawa, M. Arita, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. D. Gu, Y. Yoshida, H. Eisaki, G. B. Arnold et D. S. Dessau. *Pairing, pair-breaking, and their roles in setting the T_c of cuprate high temperature superconductors*. [ArXiv e-prints](#) (2015). [cf. p.217, 226]
- [235] J. Merino et O. Gunnarsson. *Pseudogap and singlet formation in organic and cuprate superconductors*. [Phys. Rev. B **89**, 245130](#) (2014). [cf. p.218]
- [236] C.-D. Hébert, P. Sémon et A.-M. S. Tremblay. *Superconducting dome in doped quasi-two-dimensional organic Mott insulators: A paradigm for strongly correlated superconductivity*. [Phys. Rev. B **92**, 195112](#) (2015). [cf. p.219]
- [237] T. A. Maier, D. Poilblanc et D. J. Scalapino. *Dynamics of the Pairing Interaction in the Hubbard and t - J Models of High-Temperature Superconductors*. [Physical Review Letters **100**\(23\), 237001](#) (2008). [cf. p.223]
- [238] M. Civelli. *Evolution of the Dynamical Pairing across the Phase Diagram of a Strongly Correlated High-Temperature Superconductor*. [Phys. Rev. Lett. **103**, 136402](#) (2009). [cf. p.223]
- [239] J. P. Carbotte. *Properties of boson-exchange superconductors*. [Rev. Mod. Phys. **62**, 1027–1157](#) (1990). [cf. p.224]
- [240] E. Gull et A. J. Millis. *Energetics of superconductivity in the two-dimensional Hubbard model*. [Phys. Rev. B **86**, 241106\(R\)](#) (2012). [cf. p.241]
- [241] L. Fratino, P. Sémon, G. Sordi et A.-M. S. Tremblay. *An organizing principle for two-dimensional strongly correlated superconductivity*. Non-publié, (2016). [cf. p.241]

