

RIGIDITÉ SUPERFLUIDE ET TEMPÉRATURE CRITIQUE EN
PRÉSENCE D'UNE AUTRE PHASE

par

OLIVIER SIMARD

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

Faculté des Sciences
Université de Sherbrooke

Sherbrooke, Québec, Canada– 6 mars 2019

Le 6 mars 2019

*le jury a accepté le mémoire de Monsieur Olivier Simard
dans sa version finale.*

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Eva Dupont-Ferrier
Membre externe
Département de physique

Professeur David Sénéchal
Président-rapporteur
Département de physique

On ne peut jamais s'acquitter envers ses parents.

— Aristote, *Éthique à Nicomaque* - IVe s. av. J.-C.

SOMMAIRE

Les cuprates constituent une classe de matériaux fortement corrélés. Cela signifie que dans ces matériaux, les électrons interagissent fortement entre eux. Dans ces composés, on trouve de la supraconductivité en dopant un isolant de Mott bidimensionnel situé à demi-remplissage. Les quantités de transport électronique sont anisotropes, c'est-à-dire qu'elles dépendent de la direction selon laquelle on les mesure. Lorsque l'on dope le plan CuO_2 en électrons, dans le régime sous-dopé, on observe dans certaines expériences que l'antiferromagnétisme (AFM) et la supraconductivité (SC) coexistent [5, 48, 57]. L'apparition de l'antiferromagnétisme coïncide avec la chute de la température critique T_c lorsqu'on approche la transition de Mott [57]. La quantité d'intérêt dans ces travaux est la rigidité superfluide ρ_s . Cette quantité caractérise la force de l'état supraconducteur et peut être proportionnelle à la T_c [12, 41, 73, 77] lorsqu'elle est petite, comme cela se produit près de la transition de Mott. On a donc calculé la rigidité superfluide dans le régime de coexistence AFM+SC ainsi que dans celui pur supraconducteur pour une variété de paramètres s'inscrivant dans le modèle de Hubbard bidimensionnel à une bande. Des calculs ont été effectués à température nulle et finie. À température nulle, on trouve que la coexistence de phase entre l'AFM et la SC réduit significativement la rigidité superfluide dans le régime sous-dopé en électrons. Cette réduction de ρ_s réduirait par le fait même la T_c . À température finie, aucune coexistence n'a encore été trouvée. Toutefois, des études de l'effet de la structure de bande électronique sur ρ_s , T_c et l'amplitude du paramètre d'ordre supraconducteur ont été menées. On constate que la présence de sauts au deuxième voisin augmente la valeur de la T_c du côté dopé en électrons, contrairement à celui dopé en trous. Toujours à température finie, la relation de proportionnalité de Uemura a été reproduite et on retrouve un accord qualitatif avec les résultats expérimentaux [12, 73]. Les travaux réalisés suggèrent que les fluctuations de phase classiques du paramètre d'ordre supraconducteur diminueraient considérablement la valeur de T_c [11, 21, 40]. Expérimentalement, dans la région où les corrélations antiferromagnétiques se développent, une augmentation abrupte de la longueur de pénétration magnétique devrait être observée.

PUBLICATIONS

1. **Hall effect in cuprates with incommensurate spin-density wave**, M. Charlebois, S. Verret, A. Foley, **O. Simard**, D. Sénéchal and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*, 96, 2017
2. **Phenomenological theories of the low-temperature pseudo-gap : Hall number, specific heat, and Seebeck coefficient**, S. Verret, **O. Simard**, M. Charlebois, D. Sénéchal and A.-M. S. Tremblay, *Physical Review B*, 96(12), 2017

Le matériel de ce mémoire constitue le contenu de deux articles en préparation.

*Dans la vie, il est avant tout utile de parfaire l'entendement,
autrement dit la Raison, autant que nous le pouvons,
et en cela seul consiste la souveraine félicité
ou béatitude de l'homme.*

— Baruch Spinoza [70]

REMERCIEMENTS

J'adresse mes premiers remerciements à l'endroit de mon directeur de maîtrise, Pr. André-Marie Tremblay. Je me considère très chanceux d'avoir eu accès à votre corps de connaissances très vaste et votre compétence invétérée. Vous êtes doué d'une grande sagesse et d'une patience inébranlable ; vous avez bien compris que la science s'acquiert avec la patience. Vous êtes une personne modèle qui m'a beaucoup influencé dans ma façon de travailler et penser. Je vous remercie d'avoir eu confiance en moi et de m'avoir accordé beaucoup de liberté dans le déroulement des projets qui m'ont été assignés. Je vous remercie pour tout, André-Marie. Vous faites une grande différence dans la vie des gens qui vous entourent.

Je désire signifier ma gratitude envers les professeurs constituant le comité de suivi s'assurant de la qualité de ce mémoire. Ce comité était composé mon directeur Pr. André-Marie Tremblay, de Pr. David Sénéchal et de Pr. Eva Dupont-Ferrier. Les corrections et commentaires que vous avez apportés étaient de grande valeur.

Je dédie également de chaleureux remerciements à Dr. Giovanni Sordi. Giovanni, je te remercie de m'avoir accueilli à Londres pour poursuivre mes travaux de recherche. Tu es une personne absolument dévouée et passionnée par ce que tu fais. Je tiens garder contact avec toi pour de futurs collaborations scientifiques. Giovanni, ti ringrazio per tutto il tempo che hai investito in me. Je remercie Mitacs et ICAM de m'avoir octroyé les fonds nécessaires pour mener à bien mon projet en Angleterre.

Je remercie mes collègues et amis Maxime Charlebois et Simon Verret pour les nombreuses discussions à saveur philosophique au restaurant Rima : vous avez nourri mon intérêt pour la science. Je remercie Alexis Reymbaut pour les discussions et conseils de tout genre — souvent autour d'une bière. Je suis très reconnaissant envers Charles-David Hébert dont l'aide fut très pertinente afin de démarrer mon projet. Je remercie aussi Reza Nourafkan et Shaheen Acheche pour nos discussions profondes teintées d'un certain humour. Je dois beaucoup à Alexandre Foley pour le partage de ses résultats, merci. Il est difficile de croire que j'aurai d'aussi bons collègues et amis avec qui travailler.

Enfin, et non le moindre, je remercie ma famille — les personnes les plus importantes dans ma vie. Je remercie donc mes trois petites sœurs Audrey, Mélanie et Marie-Ève. Je remercie aussi mon petit frère Antoine, avec qui 16 ans nous séparent, qui déjà admet un intérêt particulier pour les sciences et mathématiques : futur physicien peut-être ? Je conclus mes remerciements avec mes parents : mon père Yves et ma mère Chantal. Sans vous et votre dévouement, je ne serais pas la personne que je suis.

TABLE DES MATIÈRES

I PRÉAMBULE

1	CUPRATES SUPRACONDUCTEURS	3
1.1	Introduction à la matière condensée	3
1.2	Introduction à la supraconductivité	3
1.3	Motivation expérimentale	5
1.3.1	Matériaux fortement corrélés	7
1.3.2	Relation de proportionnalité de Uemura	8
1.4	Motivation théorique	8
1.4.1	Modèle de Hubbard	9
1.4.2	Phénoménologie	12
1.4.3	Coexistence de phase	13

II NOTIONS FONDAMENTALES

2	PROBLÈME À N-CORPS	17
2.1	Mécanique quantique	17
2.1.1	Représentations de l'équation de Schrödinger	19
2.2	Mécanique statistique	21
2.3	Formalisme d'intégrales de chemin	22
2.4	Fonction de Green	25
2.4.1	Représentation spectrale	28
2.4.2	Représentation de Lehmann	29
2.4.3	Fonction de Green de Matsubara	30
2.5	Théorie de la réponse linéaire	32

III MÉTHODES THÉORIQUES

3	LE PROBLÈME D'IMPURETÉ QUANTIQUE	37
3.0.1	Modèle d'impureté d'Anderson	37
4	MÉTHODES THÉORIQUES QUANTIQUES SUR AMAS	41
4.1	Idée générale et points communs	41
4.1.1	Détermination de $t(\vec{k})$	43
4.2	CDMFT	45
4.2.1	Diagonalisation exacte (ED)	48
4.2.2	Monte-Carlo quantique en temps continu (CT-QMC)	50
4.2.3	Périodisation	51

IV LA RIGIDITÉ SUPERFLUIDE

5	RIGIDITÉ SUPERFLUIDE	57
5.1	Symétrie brisée et supraconductivité	57
5.2	Théorie de London	58
5.3	Fluctuations de phase classiques	59
5.4	Formule générale	61

5.4.1	Approche microscopique : corrections de vertex	62
5.4.2	Sans corrections de vertex	65
5.5	Formules obtenues sans périodisation	67
5.6	Formules avec périodisation (AFM+SC)	75
5.7	Formules avec état pur supraconducteur (SC)	77
6	RÉSULTATS	79
6.1	Résultats à température nulle	80
6.1.1	Présentation des figures	82
6.1.2	Rigidité superfluide interplan	82
6.1.3	Rigidité superfluide intra-plan	86
6.1.4	Effet de la périodisation	91
6.2	Résultats à température finie	93
6.2.1	Rigidité superfluide interplan	93
V	CONCLUSION	
7	CONCLUSION	101
VI	APPENDIX	
A	SOLUTION À L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER DANS LA REPRÉSENTATION D'INTERACTION	105
B	L'OPÉRATEUR DENSITÉ	107
C	LA DEUXIÈME QUANTIFICATION	109
D	LA REPRÉSENTATION SPECTRALE AVEC INTERACTION	111
E	LA FONCTION DE CORRÉLATION COURANT-COURANT	113
F	LA REPRÉSENTATION MIXTE	115
G	MONTE-CARLO QUANTIQUE EN TEMPS CONTINU CT-HYB	117
H	INTÉGRALE DE CHEMIN GAUSSIENNE	119
H.1	Algèbre de Grassmann et état cohérent	119
H.2	Fonctionnelle d'énergie libre	122
I	L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE SCALAIRE	127
J	GRAND POTENTIEL DE BAYM-KADANOFF	133
K	FORMULES DE LA RIGIDITÉ SUPERFLUIDE	135
K.1	Formules en traçant sur l'amas	135
K.2	Formules en présence d'AFM et de d SC	138
L	AUTRES SCHÉMAS DE PÉRIODISATION	141
L.1	Résultats à température nulle	141
L.1.1	Rigidité superfluide interplan	141
L.1.2	Rigidité superfluide intra-plan	145
M	ÉVALUATION NUMÉRIQUE DE ρ_s	149
M.1	Convergence en β	149
M.2	Convergence en n_{\max}	151
N	NORMALISATION DE ρ_s	157
	BIBLIOGRAPHIE	163

TABLE DES FIGURES

FIGURE 1.1	Figure simplifiée illustrant le digramme de phase des cuprates 6
FIGURE 1.2	Illustration de la maille élémentaire d'un cuprates ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$) comportant deux plans CuO_2 7
FIGURE 1.3	Figure illustrant la relation entre T_c et ρ_s pour des cuprates dopés en trous 9
FIGURE 1.4	Figure illustrant la relation entre T_c et ρ_s pour des cuprates sous-dopés en électrons 10
FIGURE 1.5	Figure illustrant la relation entre T_c et ρ_s pour des cuprates sur-dopés en trous 10
FIGURE 4.1	Illustration des zones de Brillouin complète et réduite d'un système comportant de l'antiferromagnétisme. 45
FIGURE 4.2	Exemple d'amas 2x2 en ED 48
FIGURE 4.3	Illustration procédurale de la CDMFT 49
FIGURE 5.1	Illustration diagrammatique de la rigidité superfluide sans corrections de vertex 66
FIGURE 5.2	Illustration d'une portion du super-réseau d'amas reconstituant le plan CuO_2 . 69
FIGURE 5.3	Illustration d'un amas 2×2 dans la base orbitale 71
FIGURE 5.4	Exemple d'empilement des plans CuO_2 dans les cuprates selon l'axe z . 73
FIGURE 5.5	Illustration diagrammatique de la rigidité superfluide sans corrections de vertex avec l'approximation des vertex de courant. 74
FIGURE 6.1	ρ_{zz} en fonction n en régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_\perp et <i>pér.</i> G 83
FIGURE 6.2	ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_\perp et <i>pér.</i> G 84
FIGURE 6.3	ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_\perp et <i>pér.</i> G 85
FIGURE 6.4	ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_\perp et <i>pér.</i> G 86

FIGURE 6.5	Effet de t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: <i>pér.</i> G 87
FIGURE 6.6	Effet de t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: <i>pér.</i> G 88
FIGURE 6.7	ρ_{\parallel} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: <i>pér.</i> G 89
FIGURE 6.8	ρ_{\parallel} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: <i>pér.</i> G 90
FIGURE 6.9	ρ_{\parallel} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: <i>pér.</i> G 90
FIGURE 6.10	ρ_{\parallel} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: <i>pér.</i> G 91
FIGURE 6.11	ρ_{\parallel} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ en utilisant $\mathbf{K}_x = \{(0, 0), (\pi, 0)\}$: <i>pér.</i> M 92
FIGURE 6.12	Figure d'intensité de couleur de l'amplitude du paramètre d'ordre dSC en fonction de T et de n en régime pur dSC : <i>pér.</i> G et toutes les valeurs de t' sont montrées. 94
FIGURE 6.13	T_{cm} en fonction de n en régime pur dSC pour $U = 8t$ et toutes valeurs de considérées : <i>pér.</i> G 95
FIGURE 6.14	$ \phi $ en fonction de n en régime pur dSC pour $U = 8t$ et toutes valeurs de considérées : <i>pér.</i> G 96
FIGURE 6.15	Figure d'intensité de couleur de ρ_{\perp} en fonction de T et de n en régime pur dSC : <i>pér.</i> G et toutes les valeurs de t' sont montrées. 96
FIGURE 6.16	ρ_{\perp} en fonction de n en régime pur dSC pour $U = 8t$ et toutes valeurs de considérées : <i>pér.</i> G 97
FIGURE 6.17	Relation de proportionnalité entre T_{cm} et ρ_{\perp} pour toute valeur de dopage : <i>pér.</i> G 98
FIGURE L.1	ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et <i>pér.</i> M 142
FIGURE L.2	ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et <i>pér.</i> M 143

- FIGURE L.3 ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_{\perp} et *pér.* *M* 143
- FIGURE L.4 ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_{\perp} et *pér.* *M* 144
- FIGURE L.5 ρ_{zz} en fonction de n en régime pur *dSC* pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_{\perp} et tous les schémas de périodisation 144
- FIGURE L.6 Effet de t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: *pér.* *M* 145
- FIGURE L.7 Effet de t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: *pér.* *M* 146
- FIGURE L.8 Effet de t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: *tr.* 146
- FIGURE L.9 Effet de t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: *tr.* 147
- FIGURE L.10 ρ_{\parallel} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: *pér.* *M* 147
- FIGURE M.1 Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et *pér.* *G* 150
- FIGURE M.2 Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et *pér.* *M* 150
- FIGURE M.3 Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et *tr.* 151
- FIGURE M.4 Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_{\perp} et *pér.* *G* 152
- FIGURE M.5 Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_{\perp} et *pér.* *M* 152
- FIGURE M.6 Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: t_{\perp} et *tr.* 153

FIGURE M.7	Convergence en β de ρ_{\parallel} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: <i>pér.</i> G 153
FIGURE M.8	Convergence en β de ρ_{\parallel} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$: <i>pér.</i> G 154
FIGURE M.9	Convergence de ρ_{zz} en fonction de n_{\max} pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et <i>pér.</i> G 154
FIGURE M.10	Convergence de ρ_{zz} en fonction de n_{\max} pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$: t_{\perp} et <i>pér.</i> M 155
FIGURE N.1	Calcul de ρ_{zz} vs n en régime mixte : utilisation unique de la formule de ρ_{zz} en régime de coexistence pour tous les paramètres U , t , t' et t'' , avec t_{\perp} et <i>pér.</i> G utilisés 158
FIGURE N.2	Calcul de ρ_{zz} vs n en régime mixte : utilisation unique de la formule de ρ_{zz} en régime de coexistence pour tous les paramètres U , t' et t'' , avec t_{\perp} et <i>pér.</i> M utilisés 159
FIGURE N.3	Autres exemples de calcul de ρ_{zz} pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ avec t_{\perp} et <i>pér.</i> G utilisés 160
FIGURE N.4	Autres exemples de calcul de ρ_{\parallel} pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, et $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$, avec <i>pér.</i> G 161
FIGURE N.5	Autres exemples de calcul de ρ_{\perp} pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, et $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ avec <i>pér.</i> G 162

LISTE DES TABLEAUX

TABLE 1.1	Paramètres de liaison forte 11
-----------	--------------------------------

ACRONYMES

AFM	Antiferromagnétisme
ARPES	Spectroscopie par photoémission résolue en angle (<i>Angle-resolved photoemission spectroscopy</i>)
BZ	Zone de Brillouin (<i>Brillouin Zone</i>)
rBZ	Zone de Brillouin réduite antiferromagnétique (<i>reduced Brillouin Zone</i>)
srBZ	Zone de Brillouin réduite du super-réseau (<i>supercluster reduced Brillouin Zone</i>)
CDMFT	Théorie de champ moyen dynamique sur amas (<i>Cellular dynamical mean-field theory</i>)
CDW	Onde de densité de charge (<i>Charge Density Wave</i>)
CT-HYB	Monte-Carlo quantique en temps continu dans le développement en hybridation (<i>Hybridization expansion continuous-time quantum Monte Carlo</i>)
DCA	Approximation dynamique sur amas (<i>Dynamical cluster approximation</i>)
DMFT	Théorie de champ moyen dynamique (<i>Dynamical mean-field theory</i>)
ED	Diagonalisation exacte (<i>Exact diagonalization</i>)
PDW	Onde de densité de paire (<i>Pair Density Wave</i>)
SC	Supraconductivité
<i>d</i> SC	Supraconductivité de type <i>d</i>

Première partie

PRÉAMBULE

Une courte introduction portant sur les cuprates supraconducteurs est présentée. Notamment, le modèle théorique employé afin d'étudier les cuprates est motivé. L'intérêt de calculer la rigidité superfluide est discuté.

CUPRATES SUPRACONDUCTEURS

Le contenu de ce mémoire porte principalement sur l'effet de la compétition de phases sur la supraconductivité dans les cuprates. En particulier, l'effet de cette compétition de phases sur la rigidité superfluide est calculé en ayant recours à des méthodes numériques sophistiquées. Les cuprates sont introduits et certaines de leurs caractéristiques sont énoncées. La méthodologie suivie dans l'obtention des résultats est exposée.

INTRODUCTION À LA MATIÈRE CONDENSÉE

L'étymologie du mot atome stipule que ce dernier est constitué de deux éléments provenant du grec : le préfixe «a-» désignant la négation et le suffixe «-tome», qui d'après le mot grec «temnein», signifie «qui ne peut pas être coupé». Toutefois, force est d'admettre que d'ores et déjà les avancées scientifiques des dernières décennies ont révoqué les atomes au rang d'objets composites : les particules élémentaires du modèle standard seraient jusqu'à maintenant les éléments fondamentaux desquels s'articulent toutes les formes complexes de l'univers. Toutefois, les atomes s'avèrent toujours des objets fondamentaux dont l'étude exige une compréhension de la mécanique quantique ; ils constituent les éléments formant l'immense variété de matériaux qui nous entourent. L'arrangement de ces atomes ainsi que la nature des atomes composant les matériaux dictent leurs propriétés physiques. Plus particulièrement, la particule élémentaire qu'est l'électron est l'objet principal à l'origine des phases électroniques du diagramme de phase d'un matériau, par définition. La grande diversité de ces phases électroniques tient son origine des interactions entre les électrons eux-mêmes, ainsi que des interactions entre les électrons et différents modes d'excitations collectives (phonons, magnons, spinons, etc.). Par exemple, la supraconductivité conventionnelle découverte en 1911 [46] survenant dans les métaux de transition simples (Pb, Hg, Al, etc.) est expliquée dans la théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [8] par le processus d'échange d'un phonon virtuel entre deux électrons de spins opposés : cet échange lie ces électrons en paires, soit les paires de Cooper.

INTRODUCTION À LA SUPRACONDUCTIVITÉ

La supraconductivité est une des phases d'intérêt en ce qui concerne ce mémoire. Il y a la supraconductivité conventionnelle décrite par la

Les éléments atomiques se différencient par le nombre de protons, de neutrons et d'électrons le composant.

D'autres excitations bosoniques tels les phonons associés aux quanta de vibration cristalline, les magnons associés aux excitations collectives du spin électronique, etc., peuvent être impliquées dans le diagramme de phase.

théorie BCS, mais également la supraconductivité non-conventionnelle dont les mécanismes physiques engendrant la supraconductivité diffèrent. Ces deux catégories de supraconductivité déclinent les mêmes phénomènes caractéristiques. En plus des fermions lourds et des organiques, l'une des premières classes de matériaux supraconducteurs non-conventionnels qui viola les prédictions théoriques de la théorie BCS fut les cuprates. Les cuprates sont des matériaux quasi-bidimensionnels caractérisés par des plans de CuO_2 intercalés par des éléments de terre-rares¹. Notamment, ces matériaux admettent une température critique beaucoup plus élevée que celle prédite par la théorie BCS en plus d'apparaître d'un état métallique très différent de l'état métallique standard. Par conséquent, les mécanismes physiques à l'origine de la supraconductivité dans les cuprates sont bien différents de ceux à l'origine de la supraconductivité conventionnelle.

Les phénomènes caractérisant la supraconductivité se rapportent aux deux suivants :

- Effet Meissner, soit l'expulsion des champs magnétiques du volume du matériau supraconducteur
- Absence de résistance électrique donnant lieu à des supercourants électriques

Ces propriétés émergentes de la matière surviennent à faible température, soit $0^+ - 39\text{K}$ pour les supraconducteurs conventionnels, et en deçà d'une valeur critique du champ magnétique. Plusieurs autres facteurs influent sur l'état supraconducteur, notamment la pression chimique et physique et la différence de potentiel appliquée sur un matériau.

Tous les facteurs mentionnés précédemment sont des facteurs extrinsèques influençant l'état supraconducteur. Dans un supraconducteur conventionnel, lorsque toutes les conditions sont réunies, les électrons s'apparient en paires pour former des bosons composites (paires de Cooper) et condensent ensemble dans l'état quantique de plus faible énergie. De manière concomitante à la formation des paires de Cooper, la cohérence de phase du paramètre d'ordre supraconducteur apparaît. La cohérence de phase existe dans les descriptions classique et quantique du paramètre d'ordre. Le paramètre d'ordre surgit suite à la brisure de symétrie spontanée du groupe de symétrie $U(1)$ associé à la conservation du nombre de particules. Ce paramètre d'ordre supraconducteur représente la fonction d'onde macroscopique du condensat de paires de Cooper et est un nombre complexe : il comprend par conséquent une phase θ et une amplitude $|\phi|$. Le coût énergétique associé à la variation de cette phase θ constitue la rigidité superfluide. Plus cette quantité est grande, plus l'état supraconducteur est robuste face aux fluctuations des paramètres extrinsèques.

La rigidité superfluide, notée ρ_s , est une mesure des fluctuations classiques et quantiques de la phase du paramètre d'ordre θ . Il n'est

La température critique T_c d'un supraconducteur conventionnel la plus élevée appartient au superhydrure de lanthane LaH_{10} [69] à une pression de 190 GPa, alors que la T_c la plus élevée d'un supraconducteur non-conventionnel à pression ambiante est attribuée aux cuprates $\text{HgBa}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{6+\delta}$ [60]. Cette famille de cuprates comprend trois plans CuO_2 par maille élémentaire.

1. Voir la figure 1.2

toutefois pas prescrit que la formation de paires de Cooper et la cohérence de phase surviennent simultanément : la formation locale des paires de Cooper peut survenir à une température² T_{cm} plus élevée que la température critique T_c [21]. Cela est le cas, par exemple, dans les métaux bidimensionnels de faible taille, où $T_{cm} > T_c$ [27, 36]. De plus, le fait de calculer ρ_s à la plus faible température accessible, soit $\rho_s(T \rightarrow 0)$, fournit une borne supérieure à la T_c [22]. L'équation (3) de [22] établit la borne supérieure que doit respecter la T_c par rapport à $\rho_s(T \rightarrow 0)$.

Puisque ρ_s dans les cuprates supraconducteurs est faible, les fluctuations de phases classiques y seraient importantes [21, 40]. Elles réduiraient T_c par rapport à T_{cm} . Les fluctuations de phase quantiques $\Delta\theta$ proviennent du principe d'incertitude³ entre le nombre de particules n et la phase θ : $\Delta n \Delta\theta \geq \frac{\hbar}{2}$. Cette contribution est faible si le matériau a une faible constante diélectrique, autrement dit si l'écrantage électronique est important.

La rigidité superfluide est particulièrement faible dans le régime sous-dopé des cuprates.

MOTIVATION EXPÉRIMENTALE

Les cuprates forment une classe de matériaux fortement corrélés et cela signifie que les électrons de valence interagissent fortement les uns avec les autres. Les cuprates sont des isolants à transfert de charge à demi-remplissage, c'est-à-dire lorsque la densité électronique n par orbitale de cuivre $3d_{x^2-y^2}$ de cuivre est $n = 1$. Ce ne sont toutefois pas des isolants ordinaires compris dans le formalisme de la théorie des bandes, mais des isolants de Mott⁴ [16], c'est-à-dire que leur mauvaise conductivité électrique est attribuable aux fortes interactions électroniques. En changeant la concentration de terres rares ou d'oxygène dans la maille élémentaire, les couches réservoirs des cuprates (fig.1.2) fournissent ou retirent des électrons du plan CuO_2 . Doper un isolant de Mott en trous revient à diminuer la densité d'électrons par atome de cuivre, de telle sorte que $n < 1$, alors que doper un isolant de Mott en électrons revient plutôt à accroître cette densité électronique ($n > 1$). Le fait de doper l'isolant de Mott dans les cuprates, soit de modifier la densité électronique n de telle sorte que $n \neq 1$, introduit l'antiferromagnétisme (AFM) ainsi que d'autres phases, dont la supraconductivité de type d (dSC) [10, 74] dépendent du régime de dopage. Ces phases peuvent coexister sur un certain domaine de dopage : certaines expériences montrent la coexistence entre la dSC , l'AFM [44, 48] et l'onde de densité de charge (CDW) [20]. L'existence d'ondes de densité de paires (PDW) et la compétition de cette dernière avec la supraconductivité expliquerait une variété de phénomènes dans les cuprates, tels les oscillations quantiques et la

2. L'indice cm signifie champ-moyen.

3. La constante de Planck réduite est notée \hbar .

4. L'isolant de Mott dans les cuprates est un isolant à transfert de charge.

brisure sous inversion du temps [1]. Expérimentalement, la région de coexistence entre la dSC et l'AFM ne surviendrait que du côté dopé en électrons⁵ [5, 48, 57]. Par coexistence de phase, on entend le fait que les paramètres d'ordre de différentes phases peuvent exister simultanément. Il semble, de manière générale, qu'il y ait plus de phases qui compétitionnent les unes avec les autres du côté dopé en électrons que du côté dopé en trous du diagramme de phase. Cela pourrait être la principale raison pour laquelle T_c est plus élevée du côté $n < 1$.

Les trous sont des absences d'électrons dans la mer de Fermi. En matière condensée, les trous sont équivalents aux positrons en physique des hautes énergies.

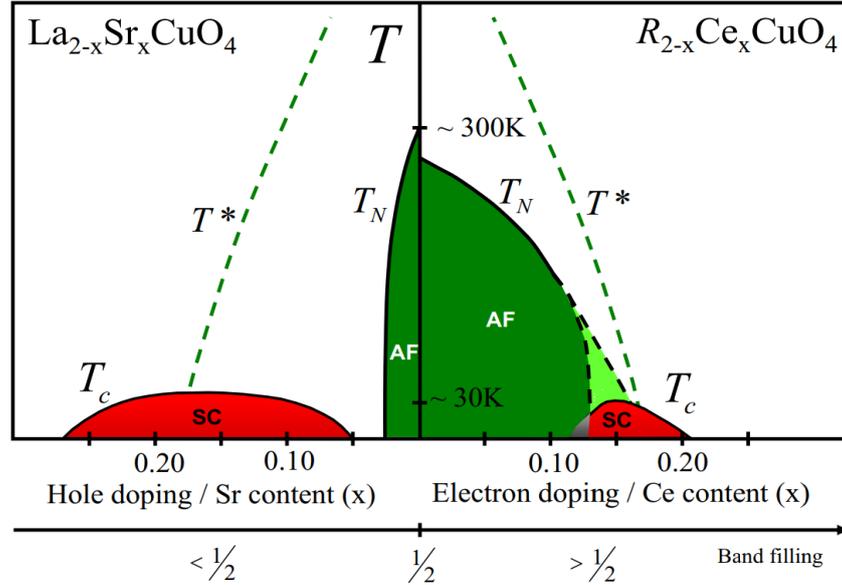


FIGURE 1.1 – Diagramme de phase de certains cuprates montrant les phases antiferromagnétique et supraconductrice seulement. La température T^* représente délimite le pseudo-gap, celle notée T_N représente la température de Néel et celle notée T_c représente la température critique supraconductrice. Le dôme supraconducteur couvre une région plus large en dopage du côté dopé en trous avec une T_c plus élevée. Le remplissage de la bande (*Band filling* en anglais) de $\frac{1}{2}$ correspond au demi-remplissage, donc au cas $n = 1$. Sur cette figure, il manque notamment les phases à onde de densité de charge (CDW) des deux côtés du diagramme. La figure est tirée de [5].

Il est pertinent d'approfondir davantage la terminologie employée pour décrire la physique des cuprates. On définit le dopage optimal $p_{opt.}$ comme celui auquel la T_c est maximale. Il existe deux valeurs distinctes de $p_{opt.}$ pour chacun des régimes de dopage (trous ou électrons). La région entre le demi-remplissage et le dopage optimal $p_{opt.}$ est communément dénommée la région sous-dopée, alors que la région partant de $p_{opt.}$ allant jusqu'au dopage après lequel la supraconducti-

5. Voir fig.1.1.

tivité (SC) disparaît est la région surdopée. Le dopage est noté p et il est relié à la densité de particules n comme suit : $n = 1 - p$. Le chiffre 1 représente le demi-remplissage, soit $n = 1$. Un dopage positif est donc un dopage en trous. Également, les phases précurseurs à la phase supraconductrice diffèrent qu'on se situe dans le régime sous-dopé ou surdopé. Dans le régime sous-dopé, la supraconductivité émerge d'un état métallique partiellement gappé, communément appelé le pseudo-gap. Toutefois, dans le régime surdopé, la supraconductivité émerge d'un mauvais métal (appelé *strange metal* en anglais) caractérisé par une résistivité intra-plan linéaire en température persistant jusqu'à des températures autour de 1000K [29].

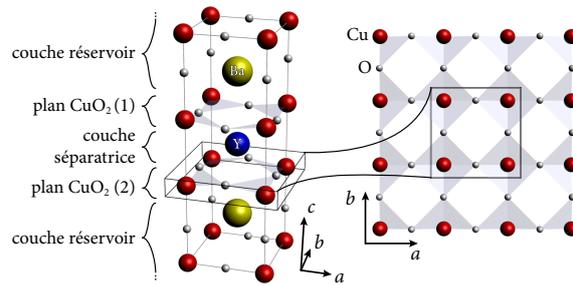


FIGURE 1.2 – Illustration de la maille élémentaire d'un cuprates ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$) comportant deux plans CuO_2 . Le point commun entre les cuprates peut être déduit du nom référant à cette classe de matériaux : des plans CuO_2 sont superposés les uns aux autres et forment un groupe de plans mutuellement séparés par un atome de terre rare (Yttrium dans ce cas) agissant en tant qu'isolant. Ce groupe de plans est délimité par des plans BaO qui constituent des réservoirs d'électrons (trous) : le symbole δ dans la formule chimique représente la densité électronique passant des plans CuO_2 aux plans BaO dû aux fortes interactions. Les axes principaux du cristal sont identifiés par les axes a , b et c . Les électrons conduisent principalement dans les plans CuO_2 (selon les axes a et b) puisque les orbitales électroniques des ions Cu^{2+} et O^- sont fortement hybridés, faisant des cuprates des matériaux quasi-bidimensionnels. La figure est tirée de [80].

Matériaux fortement corrélés

Les fortes interactions électroniques dans les cuprates sont visibles à travers plusieurs mesures expérimentales. Par exemple, des mesures d'effet Hall montrent un changement drastique du nombre de porteurs de Hall à un dopage près de p_{opt} . [7, 76]. Le dopage auquel le nombre de porteur de Hall passe d'un comportement en p à $1 + p$ serait $p_{opt} \simeq 0.16$ pour les composés $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ [7]. Dans ces mêmes composés, p_{opt} coïnciderait avec le dopage où le pseudo-gap apparaît,

soit p^* . Ce changement de comportement serait associé aux fortes interactions, mais il peut aussi être reproduit à l'aide des modèles phénoménologiques de Yang-Rice-Zhang (YRZ) [84], d'antiferromagnétisme colinéaire (AF) et spirale (sAF) [14, 71, 78]. Un coefficient de Hall positif serait requis afin qu'il y ait de la supraconductivité non-conventionnelle [76]. De plus, des mesures de spectroscopie résolue en angle (ARPES) montrent une perte de poids spectral à la surface de Fermi sans brisure de symétries ; cela suggère une fois de plus que les cuprates sont des isolants de Mott dopés et que la physique de Mott serait à l'origine du pseudo-gap [16].

Relation de proportionnalité de Uemura

Suite à la découverte des cuprates supraconducteurs, UEMURA et al. furent les premiers à observer une loi de proportionnalité entre la rigidité superfluide ρ_s et la température critique supraconductrice T_c dans le régime sous-dopé en trous dans les cuprates supraconducteurs [77]. La rigidité superfluide est évaluée à la plus faible température accessible, puisqu'elle est maximale à la température nulle ($T \rightarrow 0$) — elle constitue donc une borne supérieure à T_c . Cette relation universelle ne dépend pas du nombre de plans CuO_2 compris dans la maille élémentaire fig.1.2, c'est-à-dire que la T_c est proportionnelle à ρ_s dans le régime sous-dopé en trous indépendamment du nombre de plans CuO_2 . Si l'on augmente le nombre de plans CuO_2 dans la maille élémentaire jusqu'à concurrence de 3, on se trouve à augmenter ρ_s ainsi que la valeur maximale de T_c [54].

Par la suite, TALLON et al. raffinèrent cette étude en incluant des données obtenues dans le régime sur-dopé pour différentes familles de composés des cuprates [73]. Ce raffinement est montré à la fig.1.3 et expose l'effet de la structure de bande électronique sur ρ_s . La relation découverte par UEMURA et al. liant T_c et ρ_s serait aussi valide pour le régime sous-dopé en électrons des cuprates [41], tel que montré à la fig.1.4. Les rapports entre ρ_s et T_c sont toutefois distincts d'un côté du demi-remplissage par rapport à l'autre et cela reste inexpliqué.

Une relation de proportionnalité à la Uemura lierait également T_c à ρ_s dans le régime surdopé des cuprates [12]. Cette relation serait linéaire jusqu'à très faible ρ_s et elle serait robuste à l'insertion d'impuretés de zinc (voir la fig.1.5).

MOTIVATION THÉORIQUE

Étant donné que les cuprates constituent une classe de matériaux fortement corrélés, on doit résoudre les équations du mouvement des électrons de manière non-perturbative. Il faut toutefois un hamiltonien modèle approprié aux cuprates qui gouverne le comportement des électrons dans le plan CuO_2 (voir fig.1.2).

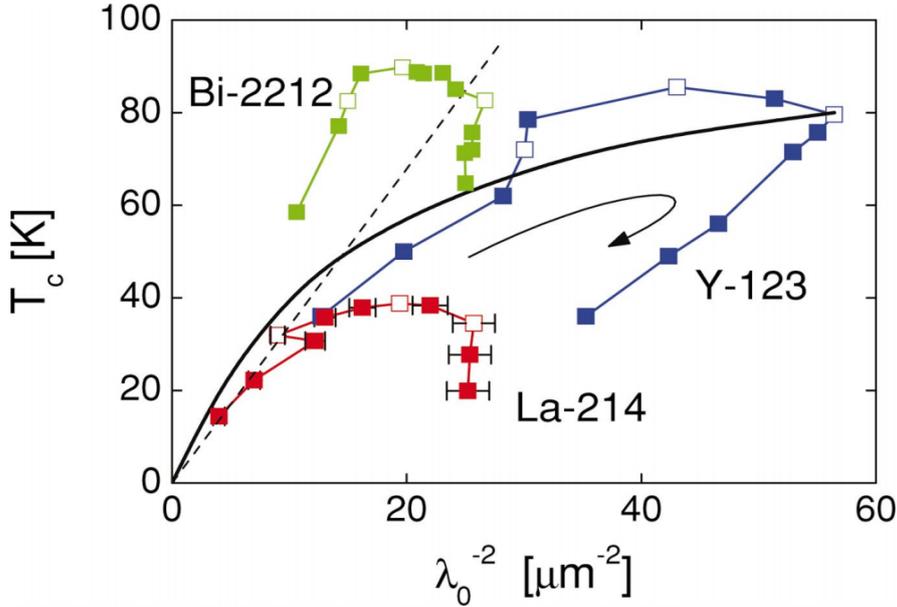


FIGURE 1.3 – Figure illustrant la relation entre T_c ainsi que la longueur de pénétration intra-plan λ_0 pour des cuprates LSCO, BSCO ainsi que YBCO. Puisque $\rho_s \propto \lambda_0^{-2}$, ρ_s augmente lorsque la longueur d'onde de pénétration magnétique diminue. Suivant la flèche, on augmente le dopage en trous. Le régime surdopé correspond aux points suivant la valeur minimale de λ_0 . On note que la relation entre T_c et ρ_s diffère selon si l'on se trouve dans le régime sous-dopé ou dans le régime surdopé.

Modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard fut initialement proposé pour expliquer la physique des cuprates par ANDERSON [4]. Le modèle de Hubbard bidimensionnel à une bande comprendrait l'essentiel de la physique sous-jacente à la supraconductivité non-conventionnelle observée dans les cuprates supraconducteurs : il comprend la physique de Mott à demi-remplissage, celle de la phase normale des cuprates (pseudogap), et à l'intérieur de ce modèle l'AFM ainsi que la d SC apparaissent en dopant l'isolant de Mott. La bande électronique traversant le niveau de Fermi est celle de l'orbitale $3d_{x^2-y^2}$ du cuivre. Ce modèle, lorsqu'exprimé sur un réseau d'orbitales dans la maille élémentaire, prend la forme suivante

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}, \quad (1.1)$$

où les états localisés électroniques exprimés dans la base de Wannier sont identifiés par les indices de position du réseau i, j , le spin par $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ et l'opérateur nombre de particule est $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$. Les opérateurs d'échelle $\hat{c}_{i,\sigma}^{(\dagger)}$ annihilent (créent) un électron de spin σ

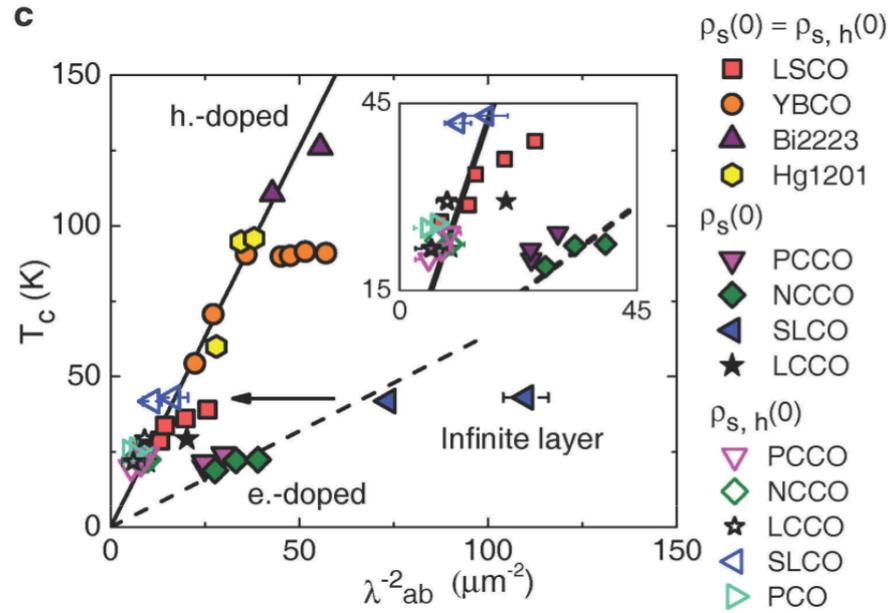


FIGURE 1.4 – Figure illustrant la relation entre T_c ainsi que la longueur de pénétration intra-plan λ pour plusieurs cuprates. La ligne pointillée montre la relation de proportionnalité liant T_c et ρ_s dans le régime sous-dopé en électrons. Elle est comparée au cas sous-dopé en trous. La T_c a une dépendance plus prononcée sur ρ_s dans le régime sous-dopé en trous des cuprates que dans celui sous-dopé en électrons.

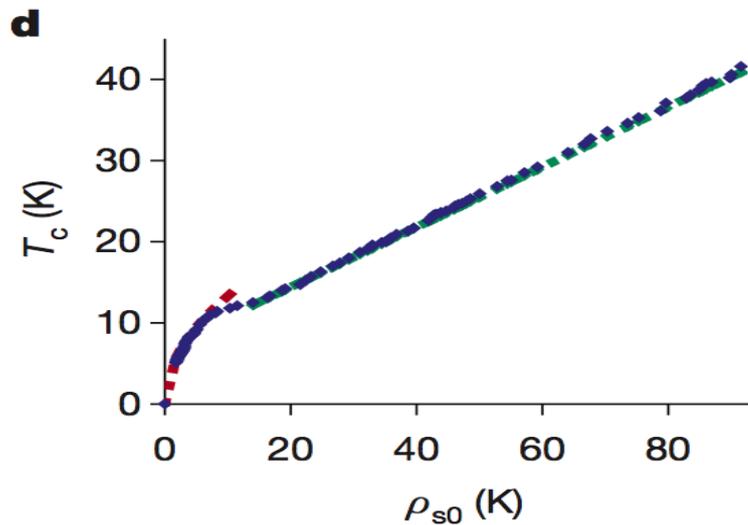


FIGURE 1.5 – Figure illustrant la relation entre T_c ainsi que ρ_s pour des composés de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Le comportement linéaire serait violé à plus faible température ou, de manière équivalente, à plus faible ρ_s . Il ne changerait pas avec l'ajout d'impuretés.

localisé sur le site de Cu i . Le potentiel chimique est noté μ et contrôle la densité électronique, tout en influençant la partie diagonale de t_{ij} qu'on met ici égale à zéro. Pour clarifier les équations, μ sera fréquemment inclus dans le terme d'énergie cinétique du hamiltonien ; il sera donc implicite. L'interaction de Coulomb est notée U et est locale. Les termes de saut électronique t_{ij} sont limités au plan CuO_2 des cuprates, de telle sorte que l'éq.(1.1) est projetée sur un réseau carré bidimensionnel en supposant que les paramètres du réseau intra-plan a , dans la direction x , et b , dans la direction y , sont tous deux égaux [32]. Le paramètre du réseau c est perpendiculaire aux plans CuO_2 , dans la direction z . Dans ce qui suit, afin de simuler la structure de bande des cuprates supraconducteurs à température nulle, on utilise les termes de saut premier-voisin t , deuxième-voisin t' et troisième-voisin t'' donnés au tableau 1.1 [38, 54].

paramètres composés	t'/t	t''/t
YBCO/BSCCO	-0.3	0.2
LSCO/NCCO	-0.17	0.03

TABLE 1.1 – Paramètres de liaison forte

Typiquement, dans les cuprates, $t \sim 250\text{meV}$ et il convient de comparer les échelles d'énergie associées à U et à la largeur de bande électronique $W = 8t$, puisque $U \simeq W$. L'interaction de Coulomb U doit être plus grande que la largeur de bande électronique W pour engendrer le gap de Mott. Tous les paramètres importants du modèle de Hubbard sont représentés en unité d'énergie du terme de saut premier-voisin t . Le modèle de Hubbard, bien que simple en apparence, est extrêmement difficile⁶ à résoudre en dimension $d \geq 2$, puisqu'il comporte un terme quadratique représentant l'énergie cinétique digonale dans l'espace réciproque (des vecteurs d'onde \mathbf{k}) et un terme quartique représentant l'énergie potentielle dans l'espace réel (des positions). Or, on sait en mécanique quantique que les opérateurs de position \hat{R} et de quantité de mouvement \hat{P} ne commutent pas, faisant en sorte qu'il est hautement non-trivial de diagonaliser le hamiltonien (1.1).

Afin d'être en mesure de calculer des observables à un corps, il faut résoudre le modèle de Hubbard (eq.(1.1)) en calculant la fonction de Green électronique du système⁷. La fonction de Green décrivant la propagation des électrons interagissants dans la plan CuO_2 sera obtenue approximativement en ayant recours à la méthode de champ-

Le commutateur $[\hat{R}, \hat{P}] = i$, et les valeurs propres à \hat{P} sont les vecteurs d'onde \mathbf{k} .

6. C'est aussi difficile en $d = 1$, pour les mêmes raisons, mais possible avec l'ansatz de Bethe.

7. Les fonctions de Green sont présentées à la section 2.4.

moyen dynamique sur amas (CDMFT) décrite à la [section 4.2](#). Cette méthode autocohérente résout le problème d'impureté de Anderson décrit à la [sous-section 3.0.1](#), même lorsque l'impureté est constituée de plus d'un site.

Pour solutionner le modèle de Hubbard à température nulle ($T = 0$), un solveur d'impureté de type diagonalisation exacte (*Exact Diagonalization* en anglais) [63] est employé avec une paramétrisation des bains telle que décrite dans LIEBSCH et TONG [42]. Les résultats à $T = 0$ sont présentés dans l'article de FOLEY et al. [23]. Puisque les corrélations antiferromagnétiques sont beaucoup plus importantes du côté $n > 1$ [5, 57], le côté dopé en électrons est mis de l'avant dans ce mémoire.

À température finie, un solveur d'impureté de type Monte-Carlo quantique en temps continu (*Continuous-time Quantum Monte Carlo* en anglais) dans le développement la fonction d'hybridation (CT-HYB) [43] est utilisé pour résoudre le modèle de Hubbard.

Phénoménologie

Puisque les cuprates ont des propriétés anisotropes, certaines approximations peuvent être effectuées lorsqu'il est question de calculer la rigidité superfluide selon l'axe c . Dans une description approximative des cuprates basée sur un modèle à une bande, l'amplitude de saut selon l'axe c est notée t_{\perp} et est supposée petite par rapport à t pour tenir compte de la forte anisotropie de la conductivité des cuprates dans l'état normal. Cela serait expliqué par le fait que les porteurs de charge parcourent les différents plans de la maille élémentaire en sautant parmi les orbitales $4s$ du Cu [54] et que ce terme de saut tiendrait sa dépendance en \mathbf{k} uniquement des vecteurs d'onde de la zone Brillouin bidimensionnelle des plans cuivre-oxygène : il aurait une dépendance de la forme $t_{\perp}(k_x, k_y) \propto (\cos k_x - \cos k_y)^2$ [2, 53, 54, 83]. Cette dépendance en \mathbf{k} de t_{\perp} relève notamment du fait que les quantités de transport sont largement supprimées lors de l'ouverture du pseudo-gap survenant dans le plan cuivre-oxygène. Dans les cuprates, les interactions électroniques sont principalement restreintes dans les plans CuO_2 , d'où l'intérêt de se restreindre aux fonctions de Green décrivant la propagation électronique dans le plan CuO_2 . Ainsi, il s'avère plus simple de calculer ρ_s selon l'axe c puisqu'on peut alors faire abstraction des corrections de vertex. Bien que les corrections de vertex soient nécessaires dans le plan CuO_2 afin d'avoir une bonne description des quantités de transport [31, 35], on calcule également la rigidité superfluide dans le plan en négligeant les corrections de vertex pour observer l'effet de la coexistence de phase AFM+ d SC.

Dans le calcul de ρ_s selon l'axe c , les vertex de courant sont remplacés par un terme de saut $t_{\perp}(\mathbf{k})$ entre deux plans CuO_2 dans une maille élémentaire [24, 45, 53] :

L'emboîtement de la relation de dispersion électronique avec la zone de Brillouin réduite antiferromagnétique du côté dopé en électrons amplifie les fluctuations antiferromagnétiques.

$$t_{\perp}^2(\mathbf{k}) = t_{bi}^2 \cos^2 k_z (\cos k_x - \cos k_y)^4, \quad (1.2)$$

où $t_{bi} \simeq 10\text{meV}$ [45, 53] est l'amplitude de saut requise pour qu'un porteur de charge saute d'un plan CuO_2 à l'autre dans la maille élémentaire. Le terme de saut t_{\perp} est multiplié par $\cos k_z$ puisqu'on considère les sauts premiers-voisins selon l'axe z . L'expression du terme de saut perpendiculaire éq.(1.2) pourrait être raffinée⁸ selon les classes de cuprates à l'étude [45]. Cette approximation est mise en oeuvre aux section 5.5, section 5.6 et section 5.7.

Coexistence de phase

L'effet de la coexistence de phase sur ρ_s dans les cuprates a été étudié dans la littérature dans le cadre de modèles champ-moyen de type Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [66] et de type Mott-Hubbard [6]. Ces travaux, même si effectués dans un traitement champ-moyen, montrent que la compétition de phase entre un ordre magnétique ainsi qu'un ordre supraconducteur de type d ($d\text{SC}$) est néfaste pour la rigidité superfluide. Dans un isolant de Mott antiferromagnétique dopé, i. e., les cuprates supraconducteurs, l'effet de la compétition de phase sur la rigidité superfluide n'a jamais été étudié et il a fallu développer un formalisme approprié afin de calculer ρ_s dans le contexte des méthodes de champ moyen dynamique sur amas. Ce formalisme est présenté et dérivé de manière exhaustive au chapitre 5.

Hormis les méthodes quantiques sur amas utilisant la formalisme des fonctions de Green pour résoudre des systèmes interagissants [23], des méthodes solutionnant les fonctions d'onde, telle la DMET (*Density Matrix Embedding Theory* en anglais), ont montré [85] que l'état fondamental électronique des cuprates supraconducteurs, dans le régime sous-dopé en électrons, comprend à la fois l'antiferromagnétisme commensurable (AFM) et la supraconductivité de type d ($d\text{SC}$). Ces calculs solutionnant le modèle de Hubbard sur un amas de 16 sites en DMET ont aussi déterminé qu'une variété d'autres phases inhomogènes, telles l'onde de densité de paires (PDW) et l'onde de densité de charge (CDW), compétitionnent avec l'état supraconducteur dans certains régimes de paramètres. De plus, des méthodes de réseaux de tenseurs iPEPS fermioniques ont solutionné le modèle t - J et montrent une compétition entre la $d\text{SC}$ et des ordres de rayures [19].

8. Voir, par exemple, les éqs.(7) et (11) de [45].

Deuxième partie

NOTIONS FONDAMENTALES

Chacun est enfermé dans sa conscience comme dans sa peau.

— Arthur Schopenhauer [61]

Les outils mathématiques importants pour résoudre des systèmes quantiques à particules interagissantes y sont présentés. La connaissance et la compréhension de ces outils est importante pour la suite des choses. Les expressions mathématiques saillantes sont encadrées afin de les valoriser.

PROBLÈME À N-CORPS

La physique théorique dispose de plusieurs outils mathématiques afin de pouvoir prédire et comprendre certains phénomènes naturels. Dans ce chapitre, les outils essentiels aux problèmes physiques à plusieurs particules interagissantes — plus succinctement aux problèmes à N-corps — sont présentés et discutés. Notamment, l'équation de Schrödinger, équation fondamentale à la physique de la matière condensée, est discutée. On enchaîne ensuite avec la présentation du formalisme des intégrales de chemin. On poursuit avec le formalisme des fonctions de Green, nécessaire à la résolution de l'équation de Schrödinger d'un système interagissant, pour ensuite clôturer avec la théorie de la réponse linéaire. Les développements qui suivent sont inspirés des références [13, 18, 75]. À un certain moment dans ce chapitre et pour le reste du mémoire, sauf lors d'avis contraires, les constantes fondamentales seront mises à l'unité par un choix judicieux et implicite du système d'unités. Ceci permet d'alléger significativement la notation.

MÉCANIQUE QUANTIQUE

De la même façon que les objets classiques, les objets quantiques sont décrits par des équations du mouvement. Toutefois, la nature des objets quantiques diffère de celle des objets classiques. En effet, lorsqu'une personne ou que tout autre objet, i. e., un appareil de mesure, effectue une mesure portant sur la dynamique d'un système quantique, l'état du système à l'étude subit un changement imprévisible et irréversible malgré le fait que l'évolution de l'état du système entre différentes observations soit causale et déterministe. En fait, l'évolution d'un système quantique dont l'état est connu à un certain temps peut être connue à un temps ultérieur tant que le système n'est pas observé ou mesuré d'une quelconque façon. De plus, le principe de superposition est applicable tant que le système physique n'est pas soumis à l'observation extérieure. Si l'on considère l'état d'un système $|\phi(t)\rangle$ à un temps t de la forme

$$|\phi(t)\rangle = a_1(t) |\phi_1\rangle + a_2(t) |\phi_2\rangle, \quad (2.1)$$

où $a_1(t), a_2(t) \in \mathbb{C}$ et $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ sont des vecteurs mutuellement orthonormaux de l'espace des états définissant l'objet quantique $|\phi\rangle$ — qu'on appelle aussi espace de Hilbert —, le fait que le produit scalaire sur lui-même donne

$$\begin{aligned}\langle \phi(t) | \phi(t) \rangle &= |a_1(t)|^2 \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle + |a_2(t)|^2 \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle \\ &= |a_1(t)|^2 + |a_2(t)|^2 = 1\end{aligned}\quad (2.2)$$

implique que l'évolution dans le temps de $|\phi\rangle$ préserve son module et est donc unitaire. Les coefficients $|a_i(t)|^2$ jouent le rôle de probabilités : la probabilité que le système $|\phi(t)\rangle$ soit caractérisé par l'état $|\phi_i\rangle$ à un temps t est $|a_i(t)|^2$. Si l'on suppose que l'état $|\phi(t)\rangle$ à un temps t est obtenu à partir d'un état initial $|\phi_0\rangle$ à un temps t_0 en appliquant un opérateur de translation dans le temps¹ \hat{U}

$$|\phi(t)\rangle = \hat{U}(t - t_0) |\phi_0\rangle, \quad (2.3)$$

on doit avoir en vertu de l'éq.(2.2) que

$$\hat{U}^\dagger(t_0 - t) \hat{U}(t - t_0) = \mathbb{1}. \quad (2.4)$$

Le vecteur $|\phi\rangle$ est indépendant de la base choisie. Les vecteurs d'états dépendent implicitement de la position. L'équation décrivant l'évolution de l'énergie totale d'un système quantique est :

Équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\phi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\phi(t)\rangle.$$

(2.5)

L'équation (2.5) est l'équation de Schrödinger. Le terme $\hat{\mathcal{H}}$ est le hamiltonien du système indépendant du temps t et ce dernier est hermitien² puisque les énergies propres d'un système sont réelles. La forme du hamiltonien dépend du système en considération. Le facteur imaginaire assure que la solution à l'équation de Schrödinger soit unitaire :

$$|\phi(t)\rangle = \underbrace{C e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-t_0)}}_{\hat{U}(t-t_0)} |\phi_0\rangle, \quad (2.6)$$

où C est une constante unitaire ($C = 1$) en vertu de l'éq.(2.4). L'équation de Schrödinger a différentes représentations équivalentes et elles sont discutées plus loin. Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ peut être décomposé en une partie non-perturbative (sans interaction) $\hat{\mathcal{H}}_0$ et en une partie perturbative \hat{V} ($\hat{V} = \{\hat{\mathcal{O}} \mid [\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{O}}] = \hat{\mathcal{H}}_0 \hat{\mathcal{O}} - \hat{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{H}}_0 \neq 0\}$) :

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

En général, étant donné un système physique décrit adéquatement par un hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$, les vecteurs propres de $\hat{\mathcal{H}}_0$ sont connus. Toutefois, les vecteurs propres de $\hat{\mathcal{H}}$ sont changés car ce dernier est perturbé

1. On note les opérateurs \mathcal{O} par un accent circonflexe : $\hat{\mathcal{O}}$.

2. La transposée du conjugué complexe du hamiltonien est égale à lui-même $((\hat{\mathcal{H}}^\tau)^* = \hat{\mathcal{H}})$.

par \hat{V} et ces deux opérateurs ne commutent pas l'un l'autre, signifiant que $[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{V}] \neq 0$. La perturbation \hat{V} agissant sur le système sans interaction $\hat{\mathcal{H}}_0$ est un potentiel externe. Ce potentiel doit être distingué d'une perturbation associée à l'observation ou à la mesure, puisque \hat{V} respecte la causalité et les équations du mouvement éq.(2.5), alors que ce n'est pas le cas pour l'observation (mesure) qui est une action inopinée, spontanée sur le système. Lorsqu'il y a observation ou mesure d'un système quantique, on dit que sa fonction d'onde s'effondre dans un état ou dans un sous-espace d'états ε de l'espace de Hilbert \mathfrak{H} ($\varepsilon \subset \mathfrak{H}$). Une façon de résoudre l'équation de Schrödinger avec interactions est de recourir aux fonctions de Green introduites à la section 2.4.

Représentations de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution dans le temps de la fonction d'onde, mais peut également décrire l'évolution d'opérateurs \hat{O} . On définit alors la représentation de Schrödinger de l'éq.(2.5) faisant évoluer $|\phi\rangle$ en gardant \hat{O} statique, celle de Heisenberg faisant plutôt évoluer \hat{O} en maintenant $|\phi\rangle$ statique, et celle d'interaction constituant un hybride des deux dernières représentations. On note \hat{O}_S les opérateurs dans la représentation de Schrödinger, \hat{O}_H ceux dans la représentation de Heisenberg, et \hat{O}_I ceux dans la représentation d'interaction :

$$\langle \phi(t) | \hat{O}_S | \phi(t) \rangle = \langle \phi_0 | \hat{O}_H(t) | \phi_0 \rangle. \quad (2.8)$$

Ces derniers sont reliés l'un à l'autre par l'éq.(2.6) comme suit :

$$\hat{O}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{O}_S \hat{U}(t, t_0). \quad (2.9)$$

Toutefois, la théorie des perturbations, importante pour la théorie de la réponse linéaire et la définition des fonctions de Green à température finie, est fondée sur la représentation d'interaction. Dans cette représentation, la fonction d'onde et l'opérateur évoluent tous deux indépendamment. On reprend alors l'éq.(2.7) pour la réécrire comme suit :

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \delta\hat{\mathcal{H}}(t), \quad (2.10)$$

où $\hat{\mathcal{H}}_0$ représente la partie du hamiltonien non-perturbative indépendante du temps — soient les états stationnaires — et $\delta\hat{\mathcal{H}}(t)$ est la perturbation appliquée à $\hat{\mathcal{H}}_0$. Dans la représentation d'interaction, l'opérateur unitaire d'évolution dans le temps est³

$$\hat{U}(t, 0) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{U}_I(t, 0) \quad (2.11)$$

3. On pose ici $t_0 = 0$ sans perte de généralité, car seul l'intervalle temporel $t - t_0$ importe.

et

$$\hat{U}^\dagger(t, 0) \equiv \hat{U}_I^\dagger(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} = \hat{U}_I(0, t) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t}. \quad (2.12)$$

De cette façon, en vertu des éqs.(2.11) et (2.12), on a ($t_0 \neq 0$)

$$\hat{U}(t, t_0) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{U}_I(t, 0) \hat{U}_I(0, t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{U}_I(t, t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0}. \quad (2.13)$$

Par conséquent, l'éq.(2.8) peut être développée ainsi :

$$\begin{aligned} \langle \phi(t) | \hat{\mathcal{O}}_s | \phi(t) \rangle &= \langle \phi_0 | \hat{U}_I^\dagger(t, 0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t_0} \hat{\mathcal{O}}_s e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{U}_I(t, 0) | \phi_0 \rangle \\ &= \langle \phi_I(t) | \hat{\mathcal{O}}_I(t) | \phi_I(t) \rangle. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Or, quelles sont les équations du mouvement de $\hat{U}_I(t, t_0)$? Il faut partir de l'équation de Schrödinger et y insérer les définitions issues des éqs.(2.10) et (2.13) :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}_I(t, 0)}{\partial t} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \delta \hat{\mathcal{H}}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{U}_I(t, 0) = \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t) \hat{U}_I(t, 0). \quad (2.15)$$

Ainsi, pour un temps initial arbitraire, l'éq.(2.15) prend la forme générale

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}_I(t, t_0)}{\partial t} = \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t) \hat{U}_I(t, t_0), \quad (2.16)$$

ayant comme condition initiale que $\hat{U}_I(t_0, t_0) = \mathbb{1}$. Une façon d'obtenir la solution perturbative à l'éq.(2.16) est d'intégrer par itération cette dernière. La solution au premier ordre est

$$\hat{U}_I^{(1)}(t, t_0) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') + O(\delta \hat{\mathcal{H}}_I^2). \quad (2.17)$$

L'éq.(2.17) constitue l'équation maîtresse de la théorie de la réponse linéaire discutée à la section 2.5. La théorie de la réponse linéaire est utilisée afin de dériver une expression pour calculer la rigidité superfluide et les détails sont exposés au chapitre 5. La solution complète à l'éq.(2.16) est la suivante :

$$\hat{U}_I(t, t_0) = \mathcal{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t')}. \quad (2.18)$$

L'éq.(2.18) est dérivée à l'Appendice A. L'ordre dans lequel les opérateurs $\delta \hat{\mathcal{H}}_I(t')$ associés à la perturbation agissent est important puisque les règles de commutation entre les opérateurs bosoniques (ou d'anti-commutation entre les opérateurs fermioniques) doivent être respectées. Cette succession temporelle est assurée par le super-opérateur d'ordonnancement \mathcal{T}_t dont la définition mathématique est

$$\mathcal{T}_t [\hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t_2)] = \hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \zeta \hat{B}_I(t_2) \hat{A}_I(t_1) \theta(t_2 - t_1). \quad (2.19)$$

Les opérateurs d'interaction \hat{A} et \hat{B} sont arbitraires, ainsi que les temps t_1 et t_2 . Si les opérateurs de l'éq.(2.19) sont des fermions, on a que $\zeta = -1$, et s'ils sont des bosons, on a plutôt que $\zeta = 1$.

MÉCANIQUE STATISTIQUE

Lorsqu'on désire comprendre les transitions de phases quantiques, il ne suffit pas de considérer la statistique quantique énoncée précédemment. Puisque la température T intervient, l'entropie intervient nécessairement. Il faut donc ajouter à cela la statistique thermodynamique. Pour ce faire, on suppose une observable \hat{O} avec les valeurs propres λ_α suivantes

$$\hat{O} |\phi_\alpha\rangle = \lambda_\alpha |\phi_\alpha\rangle. \quad (2.20)$$

La valeur λ_α représente une quantité physique associée à l'état $|\phi_\alpha\rangle$, i. e., la quantité de mouvement, le spin, etc. La probabilité quantique de retrouver la valeur λ_α de \hat{O} est $\mathcal{P}(\lambda_\alpha) = |\langle\phi_\alpha|\psi\rangle|^2$ si l'état du système considéré est $|\psi\rangle$. Maintenant, on suppose un état $|\psi^a\rangle = \sum_\alpha c_\alpha |\phi_\alpha\rangle$ dont la probabilité conditionnelle de préparation est p_a . L'indice a dénote les configurations possibles du système $|\psi\rangle$ établies à partir de l'ensemble de vecteurs $\{|\phi\rangle\} \in \mathfrak{H}$. La probabilité de mesurer un système $|\psi\rangle$ ayant une valeur λ_β est la somme sur l'ensemble des configurations ainsi que leur poids statistique associé :

$$\mathcal{P}(\lambda_\beta) = \sum_a p_a |\langle\phi_\beta|\psi^a\rangle|^2, \quad (2.21)$$

où ⁴ $\langle\phi_\beta|\phi_\alpha\rangle = \delta_{\alpha\beta}$ étant donné que les vecteurs $|\phi\rangle$ sont orthonormaux, et

$$\sum_a p_a = 1. \quad (2.22)$$

La valeur moyenne d'une observable $\langle\hat{O}\rangle$ est, à partir de l'éq.(2.21),

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}\rangle &= \sum_\beta \lambda_\beta \mathcal{P}(\lambda_\beta) \\ &= \sum_\beta \lambda_\beta \langle\phi_\beta| \underbrace{\sum_a p_a |\psi^a\rangle \langle\psi^a|}_{\hat{\rho}} |\phi_\beta\rangle \\ &= \sum_\beta \langle\phi_\beta| \hat{\rho} \lambda_\beta |\phi_\beta\rangle = \text{Tr} [\hat{\rho} \hat{O}], \end{aligned} \quad (2.23)$$

où $\hat{\rho}$ est l'opérateur densité. La matrice densité ρ contient l'ensemble des états quantiques possibles $\{|\psi^a\rangle\}$ et le poids statistique p_a de chacun de ces états dans ce mélange statistique. On veut maintenant déterminer la forme de la matrice densité. Les démarches sont montrées à l'Appendice B. La forme complète de l'opérateur densité est la suivante

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{K}}}{\mathcal{Z}}, \quad (2.24)$$

4. On note que $\delta_{\alpha\beta} = 0$ si $\alpha \neq \beta$ et $\delta_{\alpha\beta} = 1$ sinon : c'est le delta de Kronecker.

La température est une quantité thermodynamique intensive alors que l'entropie est extensive. La température ainsi que l'entropie sont des variables conjuguées l'une de l'autre. En fait, toute variable thermodynamique intensive est conjuguée à une variable extensive.

où $\hat{K} \equiv \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{n}$ et \hat{n} est l'opérateur de densité de particules. La fonction de partition dans l'ensemble grand-canonique s'écrit

Fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left[e^{-\beta \hat{K}} \right],$$

(2.25)

où la trace $\text{Tr}[\dots]$ s'effectue sur l'ensemble des états propres du hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ puisqu'en général $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{n}] = 0$, signifiant que \hat{n} et $\hat{\mathcal{H}}$ partagent les mêmes états propres. La ressemblance entre l'opérateur $\hat{\rho}$ de l'éq.(2.24) et celui concernant l'évolution temporelle \hat{U} (eq.(2.6)) conduira à travailler en temps imaginaire. En effet, afin d'accommoder les statistiques thermodynamique et quantique, on doit prolonger le temps réel dans le plan complexe. La fonction de partition eq.(2.25) est l'une des quantités les plus puissantes de la physique, puisque l'ensemble des quantités thermodynamiques peuvent être dérivées de cette dernière. Une autre quantité extrêmement puissante, nécessitant la connaissance de \mathcal{Z} lorsqu'à température finie, est la fonction de Green contenant l'essentiel de l'information sur la propagation d'une particule contenue dans la fonction d'onde d'un système, interagissant ou pas. Cette quantité est discutée à la [section 2.4](#).

FORMALISME D'INTÉGRALES DE CHEMIN

L'émergence de la mécanique classique de la mécanique quantique apparaît naturellement dans le formalisme d'intégrales de chemin qui généralise le principe de moindre action classique à la mécanique quantique. Ce formalisme permet d'unir la théorie des champs quantique et la mécanique statistique ; il est même perméable au formalisme des fonctions de Green discuté à la [section 2.4](#). En mécanique quantique, la fonction d'onde d'un système évolue d'un état initial $|i\rangle$ à un état final $|f\rangle$ en empruntant, échantillonnant plusieurs chemins ou parcours⁵ distincts à la fois. Dans ce qui suit, on considère un système à une particule dont les états final et initial sont des états propres $|\mathbf{r}_m\rangle$ de l'opérateur position \hat{R} . On reprend alors l'opérateur d'évolution dans le temps (eq.(2.6)) faisant évoluer le système d'un état $|i\rangle$ à $|f\rangle$ avec la définition (eq.(2.7)) du hamiltonien et on discrétise le temps en N intervalles infinitésimaux $\Delta t = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{t}{N}$ pour insérer un ensemble complet d'états $\{|\mathbf{r}_m\rangle\} \in \mathfrak{H}$ entre chacun de ces intervalles

5. Au sens des équations du mouvement décrivant la fonction d'onde.

$$\underbrace{\langle f | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}(t-t_0)} | i \rangle}_{T_{i \rightarrow f}} \rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=2}^{N-1} d^3 r_i \underbrace{\langle \mathbf{r}_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \Delta t} | \mathbf{r}_{N-1} \rangle}_{\langle f |} \langle \mathbf{r}_{N-1} | \cdots | \mathbf{r}_2 \rangle \times \\
 \langle \mathbf{r}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \Delta t} | \mathbf{r}_1 \rangle, \quad (2.26)$$

où le terme sans interaction ($\hat{\mathcal{H}}_0$) constitue le terme d'énergie cinétique :

$$T_{i \rightarrow f} = \lim_{N \rightarrow \infty} \iint \prod_{i=2}^{N-1} d^3 r_i \prod_{m=1}^{N-1} \frac{d^3 p_m}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{r}_N | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_m^2}{2m} \Delta t} | \mathbf{p}_{N-1} \rangle \langle \mathbf{p}_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \Delta t} | \mathbf{r}_{N-1} \rangle \\
 \times \langle \mathbf{r}_{N-1} | \cdots | \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_m^2}{2m} \Delta t} | \mathbf{p}_1 \rangle \langle \mathbf{p}_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{V} \Delta t} | \mathbf{r}_1 \rangle. \quad (2.27)$$

L'opérateur \hat{P} est l'opérateur quantité de mouvement dont les états propres sont $|\mathbf{p}_m\rangle$. On a inséré dans l'éq.(2.27) la relation de fermeture appropriée sur l'espace des vecteurs d'onde (quantité de mouvement) : $\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \mathbb{1}$. On reprend maintenant l'éq.(2.27) sachant que $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$:

$$T_{i \rightarrow f} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=2}^{N-1} d^3 r_i \int \prod_{m=1}^{N-1} \frac{d^3 p_m}{(2\pi)^3} \left[e^{\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p}_{N-1} \cdot \left(\frac{\mathbf{r}_N - \mathbf{r}_{N-1}}{\Delta t} \right) - \frac{p_{N-1}^2}{2m} - V(\mathbf{r}_{N-1}) \right) \Delta t} \right] \times \\
 \cdots \times \left[e^{\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{p}_1 \cdot \left(\frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{\Delta t} \right) - \frac{p_1^2}{2m} - V(\mathbf{r}_1) \right) \Delta t} \right] \\
 = \int \mathcal{D}[p] \int \mathcal{D}[r] e^{\frac{i}{\hbar} \int dt (\mathbf{p} \cdot \partial_t \mathbf{r} - \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}))} \\
 = \int \mathcal{D}[p] \int \mathcal{D}[r] e^{\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{r}, \mathbf{p}]} \quad (2.28)$$

L'éq.(2.28) établit l'ensemble des trajectoires empruntées par le système dans l'espace des phases. Ces trajectoires peuvent interférer par l'entremise de l'exponentielle oscillante. La définition des éléments différentiels $\mathcal{D}[\cdots]$ est claire par inspection. L'action du système $S[\mathbf{r}, \mathbf{p}]$ est définie comme

$$S[\mathbf{r}, \mathbf{p}] = \int dt L(\mathbf{r}, \partial_t \mathbf{r}, t), \quad (2.29)$$

où le lagrangien L est simplement la transformée de Legendre du hamiltonien \mathcal{H} :

$$L(\mathbf{r}, \partial_t \mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \cdot \partial_t \mathbf{r} - \mathcal{H}(\mathbf{r}). \quad (2.30)$$

Le lagrangien est une quantité scalaire et n'est pas un opérateur. Par exemple, le lagrangien duquel découle l'équation de Schrödinger, où ϕ et ϕ^* sont des fonctions d'onde, est le suivant :

$$L[\phi^*, \phi, t] = \int d^3 r \phi^*(\mathbf{r}, t) [i\hbar \partial_t - \hat{\mathcal{H}}] \phi(\mathbf{r}, t). \quad (2.31)$$

Ici, on sort de la mécanique quantique à une particule et on entre dans la théorie des champs.

Il arrivera à quelques reprises de définir la fonction de partition (éq.(2.25)) en tant qu'intégrale de chemin (éq.(2.28)). Toutefois, l'action S dans la définition de la fonction de partition sous forme d'intégrale de chemin est une fonctionnelle de champs fermioniques, i. e., ϕ et ϕ^* , comme on le verra. Pour représenter \mathcal{Z} en fonction d'une intégrale de chemin, il faut toutefois aller une étape plus loin : il faut prolonger le temps réel dans le plan complexe pour travailler en temps imaginaire τ . Ce passage est requis afin que la statistique quantique associée à l'équation de Schrödinger (éq.(2.5)) et que la statistique thermodynamique puissent être simultanément considérées lorsque vient temps de pondérer l'importance statistique d'une configuration d'un système. Quelle est la définition de τ ? Il suffit de comparer les termes $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ et $e^{-\beta\hat{K}}$, respectivement associés à l'évolution de la probabilité quantique et à l'évolution de la probabilité thermodynamique : si l'on égalise les arguments de ces deux exponentielles, on trouve que $\frac{it}{\hbar} \equiv \tau = \beta$, donc que le temps imaginaire est équivalent à l'inverse de la température. De plus, par inspection de l'éq.(2.25), on constate que la trace de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ est la somme sur les amplitudes de chemin qui retournent à l'état initial de configuration après un temps imaginaire β (cf. éq.(2.26)). Ainsi, en temps imaginaire, l'intégrale de chemin éq.(2.28) devient la fonction de partition :

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[p] \int \mathcal{D}[r] e^{-\int_0^\beta d\tau (-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \partial_\tau \mathbf{r} + \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}))}. \quad (2.32)$$

Enfin, on souhaite formuler la fonction de partition de l'éq.(2.32) en intégrale de chemin sur l'ensemble des configurations de champ fermionique $\phi^{(+)}$, où les particules sont des quanta d'excitation de ces champs. Il est utile de travailler avec ces champs plutôt qu'avec les variables canoniques \mathbf{r} et \mathbf{p} , puisque la fonction de partition échantillonne des configurations dans l'espace de Fock qui ne comportent pas nécessairement le même nombre de particules⁶. La fonction de partition de l'éq.(2.32) exprimée en fonction des champs fermioniques $\phi^{(+)}$ est

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\phi^\dagger, \phi] e^{-\int_0^\beta d\tau \int d^3r (\phi^\dagger \partial_\tau \phi + \mathcal{H}(\phi^\dagger, \phi))}. \quad (2.33)$$

Le passage de l'éq.(2.32) à l'éq.(2.33) est montré à l'Appendice C. Les champs de l'éq.(2.33) sont des variables de Grassmann, soit les valeurs propres de l'opérateur d'annihilation $\hat{\phi}^{(+)}$. Ces nombres de Grassmann sont présentés à la section H.1.

L'éq.(2.33) peut également servir de fonction génératrice pouvant générer des fonctions de corrélation d'ordre arbitraire si l'on ajoute des champs sources λ et λ^\dagger :

6. C'est notamment le cas lorsqu'il y a des interactions, i. e., $\hat{V} \neq \hat{0}$.

L'espace de Fock est la somme directe des espaces de Hilbert comportant différents nombres de particules.

$$\mathcal{Z}[\lambda^\dagger, \lambda] = \int \mathcal{D}[\phi^\dagger, \phi] e^{-S[\phi^\dagger, \phi] - \int \lambda \phi^\dagger - \int \lambda^\dagger \phi}, \quad (2.34)$$

de telle sorte que la fonction de corrélation au deuxième ordre (fonction de Green) s'écrit

Fonction de corrélation

$$\left. \frac{\delta^2 \ln \mathcal{Z}[\lambda^\dagger, \lambda]}{\delta \lambda \delta \lambda^\dagger} \right|_{\lambda=\lambda^\dagger=0} = \left(\langle \phi \phi^\dagger \rangle - \langle \phi \rangle \langle \phi^\dagger \rangle \right) \Big|_{\lambda=\lambda^\dagger=0}.$$

(2.35)

La moyenne thermodynamique est $\langle \phi \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}[\phi^\dagger, \phi] \phi e^{-S[\phi^\dagger, \phi]}$.

FONCTION DE GREEN

Les fonctions de Green constituent une méthode générale de résolution d'équations différentielles inhomogènes⁷. Elles sont beaucoup employées en mécanique quantique, car elles permettent notamment de résoudre les équations de Schrödinger et de Dirac soumises à un potentiel externe. Ces fonctions de Green, aussi connues sous le nom de propagateurs, décrivent la *propagation* de l'analogue de la fonction d'onde à une particule du système à l'étude. Afin de motiver la forme des fonctions de Green, qui sont utilisées *in extenso* dans le reste du mémoire, on reprend l'éq.(2.5) avec $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0$, dans laquelle on insère la solution éq.(2.6) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(t-t_0)} |\phi_0\rangle &= \hat{\mathcal{H}}_0 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(t-t_0)} |\phi_0\rangle \\ &= E_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E_0(t-t_0)} |\phi_0\rangle \\ &= E_0 |\phi_0(t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

On a posé que $|\phi_0\rangle$ dans l'éq.(2.36) est vecteur propre de $\hat{\mathcal{H}}_0$, c'est-à-dire que $\hat{\mathcal{H}}_0$ est diagonal dans la base des vecteurs $\{|\phi_0\rangle\}$. Les termes E_0 sont donc les énergies propres associées aux vecteurs propres $|\phi_0\rangle$ de $\hat{\mathcal{H}}_0$. Si l'on considère un hamiltonien ayant la forme de l'éq.(2.7), l'ensemble de vecteurs propres $\{|\phi_0\rangle\}$ ne constituent plus la base diagonale de $\hat{\mathcal{H}}$ signifiant que les états propres ont été modifiés par \hat{V} . Dans ce cas, on réécrit l'équation de Schrödinger comme suit :

$$\left[\underbrace{i\hbar \partial_t - \hat{\mathcal{H}}_0}_L - \hat{V} \right] |\phi(t)\rangle = 0. \quad (2.37)$$

L'astuce est alors de définir le propagateur sans interaction $\mathcal{G}_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$

⁷ La fonction de Green est notamment utilisée afin de résoudre l'équation de Poisson inhomogène et déterminer le profil du potentiel électrostatique généré par une charge électrique ponctuelle.

$$\hat{L}\mathcal{G}_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t') \quad (2.38)$$

afin de trouver une solution autocohérente $|\phi(t)\rangle$ vérifiant l'éq.(2.37). Cette solution est construite à partir des états propres sans interaction $|\phi_0\rangle$ déjà connus (on explicite cette fois-ci la dépendance en position \mathbf{r}) :

$$|\phi(\mathbf{r}, t)\rangle = |\phi_0(\mathbf{r}, t)\rangle + \int d\mathbf{r}' \int dt' \mathcal{G}_0(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \hat{V}(\mathbf{r}') |\phi(\mathbf{r}', t')\rangle. \quad (2.39)$$

On ne travaille pas avec un hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ changeant dans le temps, d'où le fait que \hat{V} ne dépend que de la position. La dépendance temporelle de $\hat{\mathcal{H}}$ provient uniquement de l'équation de Schrödinger. On vérifie facilement que l'éq.(2.39) est solution à l'éq.(2.37). D'après la relation (2.38), la fonction de Green a la forme suivante :

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{1}{i\hbar\partial_t - \hat{\mathcal{H}}_0 - \hat{V}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t') = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1} - \hat{V}}, \quad (2.40)$$

où \mathcal{G}_0 est la fonction de Green non-interagissante. De l'éq.(2.40), on déduit que⁸

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{-1} &= \mathcal{G}_0^{-1} [\mathbb{1} - \mathcal{G}_0 \hat{V}] \\ \implies \mathcal{G} &= [\mathbb{1} - \mathcal{G}_0 \hat{V}]^{-1} \mathcal{G}_0 \\ \implies \mathcal{G}_0 &= \mathcal{G} - \mathcal{G}_0 \hat{V} \mathcal{G} \\ \implies \mathcal{G} &= \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \hat{V} \mathcal{G}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Pour avoir la solution complète de la fonction d'onde interagissante $|\phi(t)\rangle$, il faut développer l'éq.(2.41) et substituer le tout dans l'éq.(2.39). La fonction de Green \mathcal{G} satisfait l'équation de Dyson :

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0 \Sigma \mathcal{G}, \quad (2.42)$$

où le terme de potentiel \hat{V} est remplacé par la *self-énergie* Σ . La *self-énergie* a les mêmes propriétés analytiques que la fonction de Green \mathcal{G} et elle contient l'effet de toutes les interactions que subissent les électrons. Avec ce changement, la fonction de Green (eq.(2.40)) se réécrit :

Fonction de Green

$$\mathcal{G} = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1} - \Sigma}.$$

(2.43)

À partir de maintenant, sauf avis contraire, les constantes fondamentales sont choisies égales à l'unité : $\hbar = k_B = c \equiv 1$ (c est la vitesse

⁸. On utilise une notation *fonctionnelle* où les indices (\mathbf{r}, t) sont implicites et sommés comme en notation matricielle.

de la lumière). On travaille avec des systèmes à l'équilibre thermodynamique et on suppose l'invariance par translation dans le temps et dans l'espace

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \rightarrow \mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t').$$

L'invariance par translation de la fonction de Green (éq.(2.40)) entraîne le fait que l'on puisse effectuer la transformée de Fourier suivante :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \omega) = \int d(t - t') e^{i\omega t} \int d^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t'). \quad (2.44)$$

D'autres solutions à l'équation de Schrödinger (éq.(2.38)) sont les fonctions de Green retardée \mathcal{G}^R et avancée \mathcal{G}^A

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t') \langle \mathbf{r} | e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle \quad (2.45a)$$

$$\mathcal{G}^A(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = i\theta(t' - t) \langle \mathbf{r} | e^{-i\hat{\mathcal{H}}(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.45b)$$

Cela peut être vérifié facilement sachant que $\partial_t \theta(t - t') = \delta(t - t')$ et $\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. La fonction de Heaviside est telle que $\theta(t - t') = 1$ si $t > t'$ et 0 sinon. Ainsi, il est clair d'après l'éq.(2.46) que la fonction de Green retardée décrit la probabilité qu'un électron⁹ créé au temps t' à la position \mathbf{r}' se propage jusqu'à la position \mathbf{r} au temps t avant d'être annihilé. La fonction \mathcal{G}^R est reliée à \mathcal{G}^A par son conjugué complexe lorsqu'exprimée en fréquence. Puisque les systèmes physiques sont causaux, on emploiera la fonction de Green retardée. Elle peut être représentée dans la base désirée, telle la base dans laquelle le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ est diagonal, pourvu que la relation de fermeture appropriée $\sum_{n,n'} |\phi_n\rangle \langle \phi_{n'}| = \delta_{n,n'}$ soit insérée :

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t') \sum_{n,n'} \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle e^{-iE_n(t-t')} \langle \phi_{n'} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.46)$$

Les énergies propres E_n sont associées aux vecteurs propres $|\phi_n\rangle$ et dépendent de la position relative $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Elles sont implicitement normalisées par le potentiel chimique μ , signifiant que ces énergies propres sont telles que $E_n \rightarrow E_n - \mu$. Si l'on prend la transformée de Fourier en fréquence et en vecteur d'onde (cf. éq.(2.44)) de l'éq.(2.46), on trouve

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \omega) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{V} \sum_{n,n'} \frac{\langle \mathbf{k} | \phi_n \rangle \langle \phi_{n'} | \mathbf{k} \rangle}{\omega + i\eta - E_n(\mathbf{k})} \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{\Phi_n(\mathbf{k}) \Phi_n^*(\mathbf{k})}{\omega + i\eta - E_n(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

où $\eta \in \mathbb{R}$ est une constante infinitésimalement positive nécessaire afin que l'intégrale sur le temps soit définie. Cette constante complexe assure par le fait même la causalité. De plus, V est le volume de la maille

⁹. Cet électron obéit aux équations du mouvement prescrites par le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$.

élémentaire du cristal. Les fonctions d'onde $\Phi_n^{(*)}$ correspondent aux $n^{\text{ième}}$ vecteurs propres des électrons du système. Afin que le système puisse se propager d'un état $|\phi_n\rangle$ à un état $|\phi_m\rangle$ ($n \neq m$), il faut qu'une perturbation \hat{V} hors-diagonale dans l'ensemble des vecteurs propres $\{|\phi_n\rangle\}$ s'ajoute à $\hat{\mathcal{H}}$ décrivant le système physique initial.

La fonction de Green peut avoir maintes représentations et on ne fait que décrire celles qui sont utiles, soient les représentations spectrale, de Lehmann et en temps imaginaire. Toutes ces représentations sont équivalentes et permettent d'extraire plus ou moins facilement certaines quantités physiques d'intérêt.

Représentation spectrale

La représentation spectrale de la fonction de Green (éq.(2.47)) est obtenue en définissant la fonction spectrale $\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega')$

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega') = \sum_n \Phi_n(\mathbf{k}) \Phi_n^*(\mathbf{k}) 2\pi \delta(\omega' - E_n(\mathbf{k})) \quad (2.48)$$

et en écrivant la fonction de Green \mathcal{G} comme

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega')}{\omega + i\eta - \omega'}. \quad (2.49)$$

Dans cette représentation, il est évident d'après la formule de Weierstrass

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega \pm i\eta} &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\frac{\omega}{\omega^2 + \eta^2} \mp \frac{i\eta}{\omega^2 + \eta^2} \right) \\ &= \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega} \right) \mp i\pi \delta(\omega), \end{aligned} \quad (2.50)$$

que la fonction spectrale peut être extraite de la fonction de Green comme suit

$$-2\text{Im}\mathcal{G}^R(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.51)$$

La partie principale est notée \mathcal{P} et est restreinte à l'axe réel. La fonction spectrale (éq.(2.48)) donne la distribution de probabilité qu'un électron ayant une quantité de mouvement \mathbf{k} ait une énergie ω ($\hbar \equiv 1$). La fonction spectrale respecte la règle de somme

$$\int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega') = 1. \quad (2.52)$$

La règle de somme de (2.52) est une conséquence directe de la normalisation des états propres électroniques (voir l'éq.(2.48)). L'éq.(2.47) est valide pour un système dépourvu de toute forme d'interaction (\hat{V} quartique en opérateurs d'échelle), puisque la fonction spectrale (éq.(2.51)) établit une relation de correspondance univoque entre l'énergie et la quantité de mouvement, et \mathbf{k} est toujours un bon nombre quantique

dans les systèmes sans interaction. Dans les systèmes avec interaction, la fonction spectrale (éq.(2.48)) prend effectivement la forme d'une lorentzienne :

$$A_n(\mathbf{k}, \omega) = 2Z_{n,\mathbf{k}} \left[\frac{\Gamma_{n,\mathbf{k}}(\omega)}{(\omega - E_n(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2 + \Gamma_{n,\mathbf{k}}^2(\omega)} \right] + 2\pi\mathcal{A}_{\text{inc}}, \quad (2.53)$$

où $\Gamma_{n,\mathbf{k}}(\omega)$ représente le temps de vie des quasiparticules et $Z_{n,\mathbf{k}}$ le poids de quasiparticule. Le terme \mathcal{A}_{inc} représente la portion incohérente de la fonction spectrale causée par les interactions. La partie réelle de la *self-énergie* renormalise la relation de dispersion originale $E_n(\mathbf{k})$. Une courte démonstration de la fonction spectrale éq.(2.53) est faite à l'Appendice D.

En deuxième quantification (cf. Appendice C), les fonctions de Green retardées fermioniques — décrivant des particules soumises au principe d'exclusion de Pauli, tels les électrons — sont de la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, t) &= -i\theta(t) \langle \{ \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{c}_\sigma^\dagger \} \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} & (\hat{K} = \hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{n}) \\ &= -i\theta(t) \text{Tr} \left[\frac{e^{-\beta\hat{K}}}{\mathcal{Z}} \left\{ \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{c}_\sigma^\dagger \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Les opérateurs d'échelle $\hat{c}^{(\dagger)}$ sont exprimés dans la représentation de Heisenberg. L'indice σ représente le spin des particules, nombre quantique intrinsèque aux particules élémentaires. Les opérateurs $\hat{c}^{(\dagger)}$ annihilent (créent) un électron du vide, noté $|0\rangle$. Ces opérateurs sont équivalents à ceux définis comme $\hat{\phi}^{(\dagger)}$ à la section 2.3 (cf. Appendice C, éq.(C.3)). Le principe d'exclusion de Pauli, prohibant le fait que deux fermions occupent le même état, s'exprime par l'entremise de la relation d'anticommutation¹⁰ $\{\hat{c}, \hat{c}^\dagger\} = \hat{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger\hat{c} = \hat{1}$. La notation $\langle \dots \rangle_{\hat{\mathcal{H}}}$ dans l'éq.(2.54) signifie $\text{Tr}[\hat{\rho} \dots]$ et elle pondère le poids statistique de chacun des états propres du système par rapport à $\hat{\mathcal{H}}$.

Représentation de Lehmann

Dans ce mémoire, la représentation de la fonction de Green est utilisée afin de résoudre le problème d'impureté quantique (chapitre 3) avec le solutionneur d'impureté par diagonalisation exacte (ED). Dans le cadre de l'ED, les calculs sont effectués à température nulle de telle sorte que l'on ne présente que la représentation de Lehmann de la fonction de Green à température nulle. Cette représentation est toutefois valide à température finie. On part alors de la fonction de Green retardée de l'éq.(2.54), sans l'opérateur densité $\hat{\rho}$, dans laquelle on insère un ensemble complet d'états propres dégénérés $\{|n'\rangle\}$ dont les valeurs propres sont $E_{n'}$:

Les quasiparticules sont des excitations cohérentes du champ quantique électronique représenté par les fonctions de Grassmann $\phi^{(\dagger)}$. Les quasiparticules sont bien définies lorsque $\Gamma^{-1} > \omega$.

À température nulle, $\hat{\rho}$ se réduit au projecteur sur l'état fondamental.

10. Consulter la section H.1 pourrait s'avérer utile!

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, t) &= -i\theta(t) \text{Tr} \left[\{ \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, t), \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{0}, 0) \} \right] && \begin{array}{l} \text{invariance sous translation} \\ \text{dans le temps} \\ \mathbf{r} = -\mathbf{r} \end{array} \\
&= -i\theta(t) \sum_n \langle n | \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, t) \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{0}, 0) + \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, -t) \hat{c}_\sigma(\mathbf{0}, 0) | n \rangle \\
&= -i\theta(t) \sum_{n, n'} \left[\langle n | e^{i\hat{H}t} \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}t} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{0}) | n \rangle \right. \\
&\quad \left. + \langle n | e^{-i\hat{H}t} \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) e^{i\hat{H}t} | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_\sigma(\mathbf{0}) | n \rangle \right]. \tag{2.55}
\end{aligned}$$

On effectue alors la transformée de Fourier en fréquence ω de l'éq.(2.55), similaire à l'éq.(2.47) ($z \equiv \omega + i\eta$) :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, \omega) &= -i \int_0^\infty dt e^{izt} \sum_{n, n'} \left[e^{i(E_n - E_{n'})t} \langle n | \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{0}) | n \rangle \right. \\
&\quad \left. + e^{-i(E_n - E_{n'})t} \langle n | \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_\sigma(\mathbf{0}) | n \rangle \right] \\
&= \sum_{n, n'} \left[\underbrace{\frac{\langle n | \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{0}) | n \rangle}{z - (E_{n'} - E_n)}}_{\mathcal{G}_{\sigma,e}^R(\mathbf{r}, z)} + \underbrace{\frac{\langle n | \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) | n' \rangle \langle n' | \hat{c}_\sigma(\mathbf{0}) | n \rangle}{z - (E_n - E_{n'})}}_{\mathcal{G}_{\sigma,h}^R(\mathbf{r}, z)} \right]. \tag{2.56}
\end{aligned}$$

À température nulle, les états dégénérés $|n\rangle$ sont les états fondamentaux (états de plus faible énergie) du système. Les états $|n'\rangle$ constituent alors l'ensemble d'états comportant une particule de plus dans le cas de $\mathcal{G}_{\sigma,e}^R(\mathbf{r}, z)$ et une particule de moins dans le cas de $\mathcal{G}_{\sigma,h}^R(\mathbf{r}, z)$. La fonction de Green $\mathcal{G}_{\sigma,e}^R(\mathbf{r}, z)$ décrit la propagation des électrons dans le milieu alors que $\mathcal{G}_{\sigma,h}^R(\mathbf{r}, z)$ décrit la propagation de trous (absences d'électron dans la mer de Fermi).

Fonction de Green de Matsubara

Les fonctions de Green en temps imaginaire, aussi appelées fonctions de Green de Matsubara, sont privilégiées dans les calculs parce qu'en temps imaginaire, l'évolution de la probabilité quantique et la probabilité thermodynamique sont considérées sur un pied d'égalité. En effet, en temps imaginaire, l'opérateur d'évolution (éq.(2.6)) est, dans la représentation d'interaction,

$$\hat{U}(\tau) = e^{-\hat{H}\tau} = e^{-\hat{H}_0\tau} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\tau d\tau \delta\mathcal{H}_I(\tau)}, \tag{2.57}$$

puisque $it \equiv \tau$. On note que l'éq.(2.11) a été mise à profit afin d'obtenir l'éq.(2.57). L'opérateur d'ordonnement dans le temps imaginaire est \mathcal{T}_τ (cf. éq.(2.19)). Or, comme l'opérateur densité (éq.(2.25)) équivaut à l'opérateur d'évolution de l'éq.(2.57) pour un temps imaginaire $\tau = \beta$, la fonction de Green de Matsubara est, en vertu de l'éq.(2.54) :

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, \tau) &= -i\langle \mathcal{T}_\tau \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \hat{c}_\sigma^\dagger \rangle_{\hat{H}} \\ &= -\text{Tr} \left[\frac{e^{-\beta \hat{K}_0}}{\mathcal{Z}} \mathcal{T}_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau \delta \mathcal{H}_I(\tau)} \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \hat{c}_\sigma^\dagger \right],\end{aligned}\quad (2.58)$$

où, par définition, $\mathcal{Z} = \text{Tr} [e^{-\beta \hat{K}}]$ et où les opérateurs d'échelle $\hat{c}^{(\dagger)}(\tau) = e^{\hat{H}\tau} \hat{c}^{(\dagger)} e^{-\hat{H}\tau}$. La fonction de Green de l'éq.(2.58) est antipériodique de période β et l'intervalle de temps imaginaire sur lequel la fonction de Green de Matsubara doit être définie afin de contenir toute l'information d'un système est restreinte au domaine $\tau \in]0, \beta[$. En effet,

$$\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, \tau) = \begin{cases} -\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, \tau - \beta) & \text{si } \tau \in]0, \beta[\\ -\mathcal{G}_\sigma^R(\mathbf{r}, \tau + \beta) & \text{si } \tau \in]-\beta, 0[\end{cases} \quad (2.59)$$

de telle sorte que soit l'intervalle $\tau \in]-\beta, 0[$ ou $\tau \in]0, \beta[$ suffit. L'intervalle $\tau \in]0, \beta[$ est celui choisi dans ce mémoire. L'antipériodicité de période β de l'éq.(2.58) permet de définir la série de Fourier suivante

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \mathcal{G}^R(\mathbf{r}, i\omega_n), \quad (2.60)$$

où les fréquences de Matsubara fermioniques sont $i\omega_n \equiv (2n+1)\frac{\pi}{\beta}$ et constituent un ensemble discret le long de l'axe imaginaire. La transformée de Fourier en fréquence de Matsubara s'écrit

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}^R(\mathbf{r}, \tau). \quad (2.61)$$

Le fait que les opérateurs d'évolution ne soient pas unitaires en temps imaginaire rend le prolongement analytique — le passage de fréquences imaginaires ($i\omega_n$) aux fréquences réelles (ω) — compliqué et il faut recourir à des méthodes sophistiquées telle la méthode d'entropie maximale [30]. Cette méthode utilise la représentation spectrale de la fonction de Green (éq.(2.49)) exprimée en temps imaginaire

$$\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\mathcal{A}(\mathbf{r}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \quad (2.62)$$

afin d'estimer le profil de la distribution spectrale $\mathcal{A}(\mathbf{r}, \omega)$, étant donnée $\mathcal{G}^R(\mathbf{r}, i\omega_n)$.

La définition de la fonction de Green de Matsubara éq.(2.58) est très pratique, puisqu'elle permet de lier toute valeur moyenne d'observable à un corps $\hat{\mathcal{O}}$ à la fonction de Green :

$$\begin{aligned}\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\hat{H}} &= \langle \hat{c}_\alpha^\dagger \mathcal{O}_{\alpha\beta} \hat{c}_\beta \rangle_{\hat{H}} \\ &= -\lim_{\tau \rightarrow 0^-} \mathcal{O}_{\alpha\beta} \left\langle \mathcal{T}_\tau \hat{c}_\beta(\tau) \hat{c}_\alpha^\dagger \right\rangle_{\hat{H}} \\ &= \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \mathcal{O}_{\alpha\beta} \mathcal{G}_{\beta\alpha}^R(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{O}_{\alpha\beta} \mathcal{G}_{\beta\alpha}^R(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_n \text{tr} \left[\mathcal{O} \mathcal{G}^R(i\omega_n) \right] e^{-i\omega_n 0^-}.\end{aligned}\quad (2.63)$$

En temps imaginaire,
 $(\hat{c}(\tau))^\dagger = \hat{c}^\dagger(-\tau)$.

On rappelle que la convention d'Einstein est utilisée, donc les indices répétés sont sommés.

THÉORIE DE LA RÉPONSE LINÉAIRE

La théorie de la réponse linéaire permet de calculer la réponse d'une observable \mathcal{O} causée par la perturbation $\delta\hat{\mathcal{H}}(t)$ (éq.(2.10)) au premier ordre. Par exemple, pour calculer la réponse d'une observable \mathcal{O}_a dans la direction a du système de coordonnées cartésien, on doit considérer la moyenne thermodynamique hors équilibre de l'opérateur $\hat{\mathcal{O}}_a$:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{O}}_a(\mathbf{r}, t) \rangle_{n.e.} &= \langle \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{\mathcal{O}}_a(\mathbf{r}) \hat{U}(t, t_0) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &= \sum_m \langle m | \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{K}}_0}}{\mathcal{Z}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t_0} \hat{U}_I^\dagger(t, t_0) e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{\mathcal{O}}_a(\mathbf{r}) e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0 t} \hat{U}_I(t, t_0) e^{i\hat{\mathcal{H}}_0 t_0} | m \rangle \\ &= \text{Tr} \left[\frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{K}}_0}}{\mathcal{Z}} \hat{U}_I^\dagger(t, t_0) \hat{\mathcal{O}}_a(\mathbf{r}, t) \hat{U}_I(t, t_0) \right]. \end{aligned} \quad (2.64)$$

La notation $\langle \dots \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}$ signifie que la moyenne thermodynamique est prise par rapport aux états propres de $\hat{\mathcal{H}}_0$. La propriété cyclique de la trace, soit le fait que $\text{Tr} [\hat{A}\hat{B}] = \text{Tr} [\hat{B}\hat{A}]$, a été utilisée à l'éq.(2.64).

On veut calculer les fluctuations du courant paramagnétique lorsqu'on applique un potentiel vecteur \mathbf{A} . Pour ce faire, on considère le hamiltonien décrivant des électrons interagissants soumis à un potentiel vecteur¹¹ \mathbf{A}

On rappelle que e représente la charge élémentaire électronique. Elle est donc prise positive.

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_\sigma \int d^3r \frac{1}{2m} \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) [-i\nabla - e\mathbf{A}]^2 \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) + \hat{V}(\mathbf{r}), \quad (2.65)$$

où l'opérateur $\hat{c}_\sigma^{(\dagger)}$ détruit (annihile) un électron de spin σ . Le couplage minimal au potentiel vecteur électromagnétique assure que les équations de mouvement soient invariantes de jauge $U(1)$. Ce couplage minimal est linéaire en \mathbf{A} et cela justifie l'utilisation de la théorie de la réponse linéaire. De l'éq.(2.65), on peut développer à partir du terme cinétique les termes de courant diamagnétique \hat{J}_D et paramagnétique¹² \hat{J}_P :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 &= \sum_\sigma \int d^3r \frac{1}{2m} \left[\underbrace{\hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \nabla^2 \hat{c}_\sigma(\mathbf{r})}_{\hat{\mathcal{K}}_\sigma(\mathbf{r})} + ie\hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \cdot (\mathbf{A}\hat{c}_\sigma(\mathbf{r})) \right. \\ &\quad \left. + ie\hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \mathbf{A} \cdot \nabla \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) + e^2 \mathbf{A}^2 \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) \right] \\ &= \sum_\sigma \int d^3r \left[\hat{\mathcal{K}}_\sigma(\mathbf{r}) - \underbrace{\hat{J}_P(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A} - \hat{J}_D(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}}_{\hat{J}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}} \right], \end{aligned} \quad (2.66)$$

11. Le potentiel vecteur a une dépendance implicite sur le temps t et l'espace \mathbf{r} .

12. Les calculs sont faits dans la jauge transversale où $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

où les opérateurs de densité de courant sont

$$\hat{J}_P(\mathbf{r}) = -\frac{ie}{2m} \left[\hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) - \nabla \hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{c}_\sigma(\mathbf{r}) \right] \quad (2.67a)$$

$$\hat{J}_D(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{2m} \mathbf{A} \underbrace{\hat{c}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{c}_\sigma(\mathbf{r})}_{\hat{n}_\sigma(\mathbf{r})}. \quad (2.67b)$$

On cherche la réponse de la densité de courant paramagnétique $\hat{J}_P(\mathbf{r})$ du système à l'application d'un potentiel vecteur, puisque la rigidité superfluide définie au [chapitre 5](#) y est directement proportionnelle. En théorie de la réponse linéaire, la réponse de $\hat{J}_P(\mathbf{r})$ occasionnée par \mathbf{A} est accessible via la fonction de corrélation courant-courant suivante :

Fonction de corrélation courant-courant

$$\chi_{J_a J_i}^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{J}_a^P(\mathbf{r}, t), \hat{J}_i^P(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_{\hat{H}_0}.$$

(2.68)

La formule de l'éq.(2.68) est démontrée à l'[Appendice E](#) et est associée à la polarisation électrique d'un système. La notation $[\hat{J}_a^P, \hat{J}_i^P]$ signifie qu'un commutateur fait intervenir \hat{J}_a^P et \hat{J}_i^P . Dans un supraconducteur, la réponse du système au potentiel vecteur est non-locale à l'intérieur de l'échelle de la longueur de corrélation de Pippard $\zeta_P = v_F / \Delta$, où Δ correspond au gap supraconducteur et v_F à la vitesse de Fermi des électrons. Lorsqu'on considère le courant diamagnétique (éq.(2.67b)) comme faisant partie de la perturbation, ce qui est nécessaire pour préserver l'invariance de jauge, le *kernel* représentant la réponse du système au potentiel vecteur \mathbf{A} est donné par

$$\mathcal{Q}_{a,i}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \frac{n(\mathbf{r}', t') e^2}{2m} \delta_{a,i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') - \chi_{J_a J_i}^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \quad (2.69)$$

qui, dans l'espace de Fourier, aurait la forme suivante

$$\mathcal{Q}_{a,i}(\mathbf{q}, \nu) = \frac{n_{\mathbf{q}=0} e^2}{2m} \delta_{a,i} - \chi_{J_a J_i}^R(\mathbf{q}, \nu), \quad (2.70)$$

où

$$\begin{aligned} \chi_{J_a J_i}^R(\mathbf{q}, \nu) &= i \int d^3r \int_0^\infty dt e^{-i(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \nu(t - t'))} \left\langle \left[\hat{J}_a^P(\mathbf{r}, t), \hat{J}_i^P(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_{\hat{H}_0} \\ &= i \left\langle \left[\hat{J}_a^P(\mathbf{q}, \nu), \hat{J}_i^P(-\mathbf{q}, -\nu) \right] \right\rangle_{\hat{H}_0} \\ &= i \left\langle \left[\hat{J}_a^P(q), \hat{J}_i^P(-q) \right] \right\rangle_{\hat{H}_0}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

La densité de particule de l'éq.(2.70) est $n(\mathbf{r}', t') = \sum_\sigma \langle \hat{n}_\sigma(\mathbf{r}', t') \rangle_{\hat{H}_0}$. On se place dans le cas invariant sous translation dans l'espace où cette

La vitesse de Fermi d'un électron est la vitesse du paquet d'onde électronique à la surface de Fermi ($\omega = 0$) suivant la relation $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$, où \mathbf{k}_F est le vecteur d'onde électronique à la surface de Fermi et m est la masse de l'électron.

densité est constante. La notation de quadri-vecteur empruntée de la physique des hautes énergies, i. e., $q \equiv (\mathbf{q}, \nu)$, sera beaucoup employée dans ce mémoire.

La fonction de corrélation courant-courant (éq.(2.71)) est le *kernel* de la polarisation électrique, c'est-à-dire que la fonction retardée décrivant les fluctuations de la densité de courant s'écrit

$$\delta \langle \hat{j}_a^P(\mathbf{q}, \nu) \rangle = \mathcal{Q}_{a,i}(\mathbf{q}, \nu) A_i(\mathbf{q}, \nu). \quad (2.72)$$

La relation éq.(2.72) quantifie la polarisabilité électrique d'un système vis-à-vis le potentiel vecteur et elle peut être reliée à la loi d'Ohm

$$\delta \langle \hat{j}_a^P(\mathbf{q}, \nu) \rangle = \sigma_{a,i}(\mathbf{q}, \nu) E_i(\mathbf{q}, \nu), \quad (2.73)$$

où E_i est le champ électrique dans la direction cartésienne i et $\sigma_{a,i}$ est le *kernel* de la conductivité électrique. Les relations (2.72) et (2.73) sont reliées par le fait que le champ électrique est dérivé du potentiel vecteur \mathbf{A} :

$$E_i(\mathbf{q}, t) = -\frac{\partial A_i(\mathbf{q}, t)}{\partial t}, \quad (2.74)$$

si l'on suppose que le potentiel scalaire ϕ ne varie pas dans l'espace. En effet, puisque la polarisation électrique (éq.(2.72)) ne dépend que de la partie spatiale du champ de jauge électromagnétique, soit \mathbf{A} , on laisse tomber ϕ . Le potentiel vecteur est nul pour des temps infinis $t \rightarrow \pm\infty$, de telle sorte que $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \mathbf{A}(\mathbf{q}, t) = 0$. Ainsi, en prenant la transformée de Fourier de l'éq.(2.74), on peut connecter la fonction de corrélation courant-courant χ à la conductivité électrique σ de la manière suivante :

$$\sigma_{a,i}(\mathbf{q}, \nu) = -i \frac{\mathcal{Q}_{a,i}(\mathbf{q}, \nu)}{\nu + i\eta}, \quad (2.75)$$

où $\eta \rightarrow 0^+$. La relation éq.(2.75) est cruciale afin de dériver une expression permettant de calculer la conductivité de Hall dans des systèmes multibandes, i. e., des systèmes ayant plusieurs bandes électroniques traversant le niveau de Fermi ou des systèmes antiferromagnétiques ayant une seule bande traversant le niveau de Fermi¹³. Le prolongement analytique de la partie réelle de la conductivité de Hall est dérivé pour des systèmes multibandes dans un document séparé disponible sur demande. Les calculs partent des résultats de NOURAFKAN et TREMBLAY [51].

13. C'est le cas des cuprates dans le régime sous-dopé en trous ou en électrons.

Troisième partie

MÉTHODES THÉORIQUES

La beauté est la forme de la finalité d'un objet, en tant qu'elle est perçue dans cet objet sans représentation d'une fin.

— Emmanuel Kant [33]

Dans cette partie du mémoire, les différentes méthodes théoriques utilisées pour calculer la rigidité superfluide sont exposées dans plus de détails. Le modèle d'impureté d'Anderson, les attributs des méthodes quantiques sur amas et les différents solveurs d'impureté tels la diagonalisation exacte (ED) et le Monte Carlo quantique en temps continu dans le développement d'hybridation (CT-HYB) sont abordés. Tous ces différents solveurs s'incorporent dans la méthode quantique de champ moyen dynamique sur amas (CDMFT), soit la méthode quantique sur amas qui est employée dans ce mémoire.

LE PROBLÈME D'IMPURETÉ QUANTIQUE

Il existe plusieurs modèles pouvant fidèlement caractériser certains systèmes électroniques fortement corrélés et parmi ceux-ci s'inscrit le modèle de Hubbard bidimensionnel à une bande. Ce modèle figure parmi les modèles les plus étudiés en matière condensée puisqu'il contiendrait l'essentiel de la physique fondamentale expliquant le comportement des électrons — par conséquent, les phases électroniques observées — dans les cuprates supraconducteurs [4]. Ce modèle a été décrit d'entrée de jeu à la [section 1.4](#), éq.(1.1). On présente le modèle d'impureté d'Anderson, élément central à l'approximation champ moyen dynamique, qui sera exposée au [chapitre 4](#). Le modèle d'impureté d'Anderson fut initialement proposé par ANDERSON afin d'expliquer la formation de moments magnétiques dans les métaux comportant des impuretés magnétiques [3].¹

Modèle d'impureté d'Anderson

Le modèle de Hubbard décrit à la [section 1.4](#) peut être intégré au modèle d'impureté de Anderson. L'idée générale du modèle d'impureté d'Anderson est de simuler les interactions électroniques survenant sur une impureté. Cette impureté peut être un atome ou un amas d'atomes munis d'un nombre arbitraire d'orbitales atomiques et elle est hybridée à une bande d'électrons libres représentant l'environnement, i. e., le reste du réseau (matériau). Ces impuretés représentent une portion d'un matériau à l'étude, i. e., une portion du réseau de Bravais. On privilégie l'utilisation d'un amas comme impureté afin d'avoir une résolution spatiale pour pouvoir briser des symétries non-locales et engendrer l'apparition de paramètres d'ordre non-locaux, tels la supraconductivité de type d et l'antiferromagnétisme commensurable. Si l'on s'intéressait seulement à la supraconductivité de type s qui est locale, on pourrait utiliser un seul atome comme impureté.

Dans cette section, on note les électrons libres par les opérateurs \hat{c} et les électrons sur l'amas par \hat{d} . Le super-réseau d'amas est constitué d'amas de dimension 2×2 juxtaposés l'un à l'autre². Cet amas 2×2 comprend la taille minimale prescrite permettant d'inclure toutes les corrélations bidimensionnelles dynamiques de courte portée et ces dernières peuvent tenir leur origine du spin, de la charge, etc. Le hamiltonien régissant les électrons sur l'amas est noté $\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}$ et coïncide

1. On réitère que par simplicité, sauf sous avis contraire, les constantes \hbar, k_B ainsi que les paramètres du réseau a et c sont portées à égarder 1 dans les formules.

2. Voir la fig.(5.2).

avec le modèle de Hubbard éq.(1.1). Le hamiltonien des électrons dans l'environnement est noté $\hat{\mathcal{H}}_b$. Le fait que $\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}[\hat{d}^\dagger, \hat{d}]$ ne commute pas avec $\hat{\mathcal{H}}_b[\hat{c}^\dagger, \hat{c}]$ rend les calculs non-triviaux. La CDMFT (tiré de l'anglais, *Cellular Dynamical Mean-Field Theory*) est une méthode théorique de champ moyen dynamique sur amas et est expliquée à la section 4.2. Le hamiltonien sur l'amas incluant l'hybridation aux électrons de conduction \hat{c} utilisé pour calculer la *self-énergie* sur l'amas décrivant les interactions électroniques intra-amas s'écrit [63]

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \underbrace{- \sum_{ij,\sigma} (t'_{ij} + \mu) \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{d}_{j,\sigma}}_{\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ & + \underbrace{\sum_{i\alpha,\sigma} (\theta_{i\alpha,\sigma} \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\alpha,\sigma} + \text{c.h.})}_{\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}} + \underbrace{\sum_{\alpha,\sigma} (\epsilon_{\alpha,\sigma} - \mu) \hat{c}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\alpha,\sigma}}_{\hat{\mathcal{H}}_b}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

où l'opérateur d'échelle $\hat{d}^{(\dagger)}$ crée (annihile) un électron sur l'amas et $\hat{c}^{(\dagger)}$ crée (annihile) un électron dans l'environnement d'électrons non-corrélés. La matrice de terme de saut intra-amas est t'_{ij} avec i et j désignant les sites sur l'amas et le spin est désigné par $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$. Le terme c.h. signifie le conjugué hermitien. Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$ permet aux électrons de sauter de l'impureté dans l'environnement et de revenir après un certain temps imaginaire τ sur l'impureté. Ainsi, les électrons non-corrélés de l'environnement dans lequel l'amas est encapsulé sont couplés à l'amas via la matrice d'hybridation amas-environnement $\theta_{i\alpha,\sigma}$, où α désigne les degrés de liberté des électrons dans l'environnement. Les énergies des électrons de l'environnement sont caractérisés par $\epsilon_{\alpha,\sigma}$. Dans les notes de cours de TREMBLAY [75], les équations du mouvement du hamiltonien éq.(3.1) sont dérivées et cela permet d'introduire le formalisme nécessaire à la présentation du solveur d'impureté CTQMC (tiré de l'anglais, *Continuous-Time Quantum Monte Carlo*) dans l'expansion d'hybridation CT-HYB.

En s'inspirant des éqs.(2.31) et (2.39), l'action $S_c[d^\dagger, d]$ qui décrit l'impureté s'écrit, en fonction des variables de Grassmann³ $d^{(\dagger)}$,

$$\begin{aligned} S_c[d^\dagger, d] = & - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{ij,\sigma} d_{i,\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_{ij,\sigma}^0(\tau - \tau')^{-1} d_{j,\sigma}(\tau') \\ & + \frac{U}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} d_{i,\sigma}^\dagger(\tau) d_{i,-\sigma}^\dagger(\tau) d_{i,-\sigma}(\tau) d_{i,\sigma}(\tau), \end{aligned} \quad (3.2)$$

et elle permet de définir la fonction de partition de l'impureté \mathcal{Z}_c constituant une partie intégrante du solveur d'impureté CT-HYB :

$$\mathcal{Z}_c = \int \mathcal{D}[d^\dagger, d] e^{-S_c[d^\dagger, d]} = \text{Tr} \left[\mathcal{T}_\tau e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_b} \right]. \quad (3.3)$$

3. Consulter la section H.1 pour plus amples détails.

Dans l'éq.(3.1), la fonction de Green de Weiss⁴

$$\mathcal{G}_{ij,\sigma}^0(i\omega_n) = [i\omega_n + \mu + t_{ij} - \Gamma_{ij}(i\omega_n)]^{-1}$$

contient les paramètres variationnels qui représentent les degrés de liberté du reste du réseau. La fonction d'hybridation $\Gamma_{ij}(i\omega_n)$ joue le rôle de champ moyen dynamique dans la procédure autocohérente de la CDMFT, c'est-à-dire que les valeurs des paramètres variationnels la définissant ($\theta^{(*)}$ et ϵ de l'éq.(3.1)) convergent vers les valeurs simulant l'effet de l'environnement sur les électrons de l'impureté.

4. Puisque l'on travaille avec des système causals, on est toujours amenés à utiliser les fonctions de Green retardées \mathcal{G}^R que l'on notera à l'avenir tout simplement \mathcal{G} .

MÉTHODES THÉORIQUES QUANTIQUES SUR AMAS

Dans ce chapitre, l'idée générale enveloppant les différentes extensions sur amas de la théorie de champ moyen dynamique (DMFT) est présentée. En particulier, une des extensions de la DMFT — soit, la théorie de champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) — est expliquée. De tous les éléments de la procédure autocohérente de la CDMFT, le solutionneur d'impureté est le plus important. Seuls deux solutionneurs sont décrits : celui utilisé à température nulle, basé sur la méthode dite de diagonalisation exacte (ED), et celui utilisé à température finie, soit le Monte-Carlo quantique en temps continu (CT-HYB). On expliquera aussi les différentes procédures de périodisation de la fonction de Green de l'amas \mathcal{G}_c , quantité d'intérêt produite par ces méthodes théoriques quantiques sur amas.

IDÉE GÉNÉRALE ET POINTS COMMUNS

Dans les systèmes électroniques fortement corrélés, c'est-à-dire dans les systèmes électroniques ayant une énergie cinétique $\langle \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle$ comparable à l'énergie potentielle $\langle \hat{V} \rangle$, $\langle \hat{\mathcal{H}}_0 \rangle \sim \langle \hat{V} \rangle$, les méthodes de résolution reposant sur la théorie des perturbations s'avèrent déficientes et il faut plutôt recourir aux méthodes non-perturbatives. Comme l'on s'intéresse à la description des phases de la matière, il faut pouvoir accéder aux corrélations électroniques. Pour ce faire, il est nécessaire d'opter pour une impureté quantique ayant une résolution spatiale, tel un amas, pour pouvoir décrire les fluctuations des corrélations non-locales jusqu'à un vecteur d'onde de coupure limité en borne inférieure à la taille de la zone de Brillouin réduite du super-réseau srBZ ¹. De cette façon, il est possible de décrire des transitions de phase issues de la brisure spontanée de symétrie, de laquelle un paramètre d'ordre non-local peut émerger. Par exemple, la supraconductivité est un état de la matière issu de la brisure spontanée de la symétrie² $U(1)$, alors que l'antiferromagnétisme est issu de la brisure spontanée de la symétrie de spin $SO(3)$ à une symétrie réduite \mathbb{Z}_2 . Ces deux états ordonnés ont un paramètre d'ordre non-local et sont discutés dans ce mémoire. Le paramètre d'ordre supraconducteur est décrit par un nombre complexe $|\Psi(\mathbf{r}, t)| e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$.

En matière condensée, un système physique comprend une infinité de degrés de liberté et ces derniers peuvent être de différentes natures : spin, charge, bande, orbitale, quantité de mouvement (\mathbf{k}), etc. C'est

Si la symétrie du gap supraconducteur était de type s , le paramètre d'ordre serait local.

1. Voir la fig.(4.1).

2. Le phénomène de brisure de symétrie est détaillé à la [section 5.1](#).

d'ailleurs pour cette raison que l'on peut décrire les particules élémentaires, tel l'électron, à l'aide du formalisme de la théorie des champs quantiques. Les méthodes quantiques sur amas sont des méthodes de champ moyen dynamique, signifiant qu'elles constituent une classe d'approximations qui permettent de considérer les corrélations entre des degrés de liberté localisés spatialement de manière *exacte*, tout en traitant les corrélations à plus longue portée comme formant un milieu effectif autocohérent. Ainsi, on peut séparer les degrés de liberté d'un système en deux sous-ensembles : le premier comportant les degrés de liberté de l'amas traités de manière *exacte* et l'autre comportant les degrés de liberté restant qui sont approximés en champ moyen et qui affectent le premier. La procédure de la méthode repose sur un principe d'autocohérence.

Afin de découpler du reste du réseau les degrés de liberté de l'amas traités exactement, on sépare le vecteur du réseau de Bravais \mathbf{r} en un vecteur $\tilde{\mathbf{r}}_m$ situant les m amas dans le super-réseau et un vecteur \mathbf{R}_i situant les i sites à l'intérieur de l'amas : $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}}_m + \mathbf{R}_i$. Dans l'espace réciproque, le vecteur de Bloch \mathbf{k} est plutôt séparé en un vecteur $\tilde{\mathbf{k}}$ de la zone de Brillouin réduite du super-réseau et un vecteur \mathbf{K}_j du super-réseau réciproque : $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}_j$. En conséquence, on doit séparer les éléments de la fonction de Green \mathcal{G} , soient le terme à un corps t et la *self-énergie* Σ , en une portion intra-amas (t_c, Σ_c) et une portion inter-amas³ ($\delta t, \delta \Sigma$) :

$$\mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n)^{-1} = (z + \mu) - t(\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n) - \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n), \quad (4.1)$$

où

$$t(\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n) = t_c \delta_{\tilde{\mathbf{r}}_m, \tilde{\mathbf{r}}_n} + \delta t(\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n) \quad (4.2)$$

$$\Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n) = \Sigma_c(z) \delta_{\tilde{\mathbf{r}}_m, \tilde{\mathbf{r}}_n} + \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n) \quad (4.3)$$

Le potentiel chimique est noté μ . On a considéré l'invariance par translation dans les équations (4.1), (4.2) et (4.3). Le terme de saut t issu de la théorie des liaisons fortes (*tight-binding* en anglais) joue le rôle de $\hat{\mathcal{H}}_0$ dans l'éq.(2.40). Toutes les quantités des relations (4.2) et (4.3), intra-amas ou inter-amas, sont de dimension $N_c \times N_c$, avec N_c représentant le nombre de sites constituant l'amas. En s'inspirant de MAIER et al. [43], on insère les constituants des équations (4.2) et (4.3) dans l'éq.(4.1), pour obtenir :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(z, \overbrace{\tilde{\mathbf{r}}}^{\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n})^{-1} &= (z + \mu) - t_c \delta_{\tilde{\mathbf{r}}, 0} - \Sigma_c(z) \delta_{\tilde{\mathbf{r}}, 0} - \delta t(\tilde{\mathbf{r}}) - \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}) \\ &= \mathcal{G}_c(z)^{-1} - \delta t(\tilde{\mathbf{r}}) - \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}), \end{aligned} \quad (4.4)$$

où l'on a défini la fonction de Green limitée aux degrés de liberté sur l'amas

$$\mathcal{G}_c(z)^{-1} = (z + \mu) - t_c \delta_{\tilde{\mathbf{r}}, 0} - \Sigma_c(z) \delta_{\tilde{\mathbf{r}}, 0}.$$

3. Pour éviter la confusion entre les indices, on note les fréquences de Matsubara $i\omega_n \equiv z$, et ce jusqu'à avis contraire.

En vertu de l'éq.(2.42), $\mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{r}})$ obtenue à l'éq.(4.4) peut également s'exprimer comme :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{r}})^{-1} &= \mathcal{G}_0(z, \tilde{\mathbf{r}})^{-1} - \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}) \\
&= \underbrace{(z + \mu) - t_c \delta_{\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{0}} - \delta t(\tilde{\mathbf{r}})}_{\mathcal{G}_0(z, \tilde{\mathbf{r}})^{-1}} - \underbrace{\Sigma_c(z) - \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}})}_{\Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}})} \\
&= \underbrace{\mathcal{G}_c(z)^{-1} + \Sigma_c(z) - \delta t(\tilde{\mathbf{r}})}_{\mathcal{G}_0(z, \tilde{\mathbf{r}})^{-1}} - \Sigma_c(z) - \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}) \\
&= \mathcal{G}_c(z)^{-1} - \delta t(\tilde{\mathbf{r}}) - \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}}), \tag{4.5}
\end{aligned}$$

et donc,

$$\mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{r}}) = \mathcal{G}_c(z) + \mathcal{G}_c(z) [\delta t(\tilde{\mathbf{r}}) + \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{r}})] \mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{r}}). \tag{4.6}$$

Une expression équivalente à l'éq.(4.6) existe dans l'espace réciproque \mathbf{k} — ou plutôt dans une portion de la zone de Brillouin originale, soit la zone de Brillouin réduite du super-réseau $\tilde{\mathbf{k}}$ — et on a qu'à effectuer la transformée de Fourier partielle pour représenter le tout dans l'espace mixte $(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}})$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{k}}) &= \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}_m, \tilde{\mathbf{r}}_n} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot (\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n)} \mathcal{G}_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j}(\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n) \\
&= \mathcal{G}_c(z) + \mathcal{G}_c(z) [\delta t(\tilde{\mathbf{k}}) + \delta \Sigma(z, \tilde{\mathbf{k}})] \mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{k}}). \tag{4.7}
\end{aligned}$$

L'approximation saillante qui est effectuée dans toutes les méthodes théoriques de champ moyen sur amas, que ce soit la CDMFT, l'approximation dynamique sur amas (DCA) [43], la théorie de perturbation sur amas (CPT) [65], etc., est de négliger la *self-énergie* inter-amas. Une des raisons justifiant cette approximation tire son origine de la complexité additionnelle des calculs associée à l'ajout de $\delta \Sigma$. Ainsi, l'ensemble des approximations qui suivent et qui distinguent les méthodes théoriques sur amas reposent sur le traitement du terme de saut inter-amas δt . Les différentes procédures de périodisation qui visent à représenter $\mathcal{G}(z, \tilde{\mathbf{k}})$ dans la zone de Brillouin originale (notée par les vecteurs d'onde \mathbf{k}) comptent aussi comme des approximations.

La CDMFT converge plus rapidement que la DCA dans le calcul de quantités locales, puisque la représentation de la CDMFT se rapproche davantage de l'espace réel que celle de la DCA.

Détermination de $t(\tilde{\mathbf{k}})$

De manière générale, la portion du hamiltonien de Hubbard représentant l'énergie cinétique des électrons $\hat{\mathcal{H}}_0$ d'un système tend à délocaliser la fonction d'onde décrivant l'ensemble des particules interagissantes. On considère dans ce cas-ci l'énergie cinétique $\hat{\mathcal{H}}_0$ suivante :

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = - \sum_{\substack{m,n \\ i,j}} t_{ij}^{mn} \hat{c}_{i,m}^\dagger \hat{c}_{j,n}, \tag{4.8}$$

où $\hat{c}_{i,m}^\dagger$ est un opérateur d'échelle créant un électron sur le site i de l'amas m , $\hat{c}_{j,n}$ est un opérateur d'échelle annihilant un électron sur le site j de l'amas n , et t_{ij}^{mn} est le tenseur de termes de saut entre les sites du réseau complet repérés par l'ensemble $\{i, m\}$ ainsi que $\{j, n\}$. Or, puisque le vecteur du réseau complet $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j + \tilde{\mathbf{r}}_n$ est décomposé en un vecteur de position intra-amas \mathbf{R}_j et un vecteur de position inter-amas $\tilde{\mathbf{r}}_n$ — le vecteur de la zone de Brillouin originale $\mathbf{k} = \mathbf{K}_j + \tilde{\mathbf{k}}$ décomposé en un vecteur de zone de Brillouin (srBZ) $\tilde{\mathbf{k}}$ et un vecteur du super-réseau réciproque \mathbf{K}_j —, on peut écrire la transformée de Fourier partielle de la zone de Brillouin réduite au super-réseau direct comme suit :

$$\hat{c}_{j,n} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_n} \hat{c}_j(\tilde{\mathbf{k}}). \quad (4.9)$$

On note que le plan d'atomes de cuivre constitue le réseau de Bravais du plan CuO_2 , comportant N vecteurs \mathbf{r} , où les atomes d'oxygène agissent en tant que réservoir électronique sans interaction. Il y a N atomes de cuivre dans le réseau. Ainsi, on dénombre N/N_c amas dans le réseau. En fait, les *kernels* de la forme

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (4.10)$$

figurant dans les transformées de Fourier sont des générateurs de translation dans le réseau de Bravais : il y a autant de générateurs de translation qu'il y a de sites dans le réseau direct. Ces générateurs et l'identité du groupe forment une base orthogonale pour l'espace de Hilbert réel de dimension $N \times N$, étant donné le réseau de Bravais bidimensionnel. Par exemple, le terme $e^{i\mathbf{K}_j \cdot \tilde{\mathbf{r}}_n}$ de l'éq.(4.10) produit l'identité ($\mathbf{K}_j \cdot \tilde{\mathbf{r}}_n = 2\pi m \forall j, n, m \in \mathbb{Z}$), puisque ce dernier ne génère aucune translation sur le super-réseau.

Si maintenant on insère l'éq.(4.9) dans l'éq.(4.8), on trouve

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{1}{N_c} \sum_{\substack{m,n \\ i,j}} t_{ij}^{mn} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_m} \sum_{\tilde{\mathbf{k}'}} e^{i\tilde{\mathbf{k}'} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_n} \hat{c}_i^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{c}_j(\tilde{\mathbf{k}'}). \quad (4.11)$$

En posant maintenant que $\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n = \Delta_{m,n} \equiv \Delta$, l'éq.(4.11) devient

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 &= -\frac{1}{N_c} \sum_{\substack{\Delta, n \\ i,j}} t_{ij}^\Delta \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} e^{i(\tilde{\mathbf{k}'} - \tilde{\mathbf{k}}) \cdot \tilde{\mathbf{r}}_n} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \Delta} \hat{c}_i^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{c}_j(\tilde{\mathbf{k}'}) \\ &= -\frac{N_c}{N_c} \sum_{\substack{\Delta \\ i,j}} t_{ij}^\Delta \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}'}} \delta_{\tilde{\mathbf{k}'}, \tilde{\mathbf{k}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \Delta} \hat{c}_i^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{c}_j(\tilde{\mathbf{k}'}) \\ &= -\sum_{\substack{\Delta \\ i,j}} t_{ij}^\Delta \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \Delta} \hat{c}_i^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{c}_j(\tilde{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (4.12)$$

On constate que $\hat{\mathcal{H}}_0$ est désormais diagonal dans la zone de Brillouin réduite (espace des $\tilde{\mathbf{k}}$); c'est le résultat recherché puisque l'on veut

pouvoir reconstituer le réseau original en juxtaposant les amas. La construction du terme de saut inter-amas à l'éq.(4.2), $\delta t (\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n)$, est effectuée dans la représentation mixte $(\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{R})$ à l'Appendice F et s'appuie sur la fig.5.2.

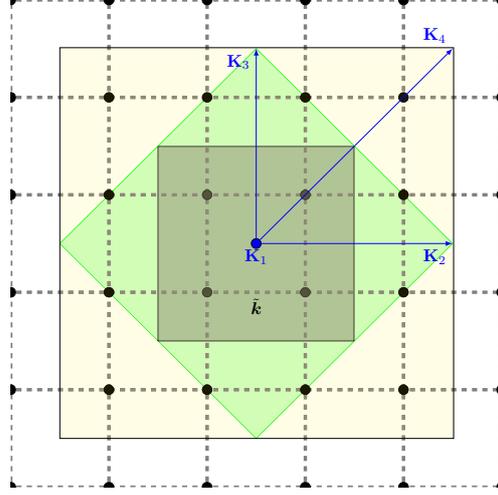


FIGURE 4.1 – La zone de Brillouin originale (BZ) est couverte de couleur jaunâtre, la zone de Brillouin réduite antiferromagnétique (rBZ) est contenue dans le diamant vert alors que la zone de Brillouin réduite du super-réseau (srBZ) est couverte de noir. La fonction de Green de l'amas $\mathcal{G}_c(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$ est définie dans la zone de Brillouin réduite srBZ et la fonction de Green complète de l'état supraconducteur pur $\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ dans la zone de Brillouin originale BZ. Un vecteur d'onde de la zone de Brillouin originale \mathbf{k} est décomposé comme : $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$, où $\tilde{\mathbf{k}}$ est un vecteur de la srBZ et \mathbf{K} un vecteur du super-réseau réciproque. Les vecteurs d'onde du super-réseau réciproque \mathbf{K}_j avec $j \in \{1, 2, 3, 4\}$ sont : $\mathbf{K}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{K}_2 = (\pi, 0)$, $\mathbf{K}_3 = (0, \pi)$ et $\mathbf{K}_4 = (\pi, \pi)$.

CDMFT

La CDMFT est une méthode théorique autocohérente visant à résoudre les équations du mouvement d'électrons interagissants sur un amas en traitant les corrélations locales. Les degrés de liberté à plus longue portée sont approximés par un champ moyen déterminé de manière autocohérente⁴. Les degrés de liberté du réseau — l'environnement de l'amas — sont simulés en CDMFT par un continuum d'électrons libres dans le cas d'un solveur d'impureté CTQMC ou une par un ensemble fini d'orbitales non corrélées dans le cas d'un solveur ED. Cet environnement constitué d'électrons libres est hybridé à un amas représentant une portion du réseau de Bravais complet. La CDMFT, à l'aide d'un solveur d'impureté, est la méthode

4. Ce sujet a été abordé dans la section 4.1.

par laquelle la fonction de Green de l'amas peut être calculée. Cette dernière est calculée en employant les solutionneurs de diagonalisation exacte (ED) fondée sur l'algorithme de Lanczos [63] ou le solutionneur basé sur le Monte-Carlo quantique en temps continu dans le développement de la fonction d'hybridation (CT-HYB). Tous les différents solutionneurs d'impureté exigent de travailler sur l'axe imaginaire avec les fréquences de Matsubara fermioniques $i\omega_n \equiv 2\pi(n+1)/\beta$, où $n \in \mathbb{Z}$ et β est l'inverse de la température ($k_B \equiv 1$).

Dans les méthodes quantiques sur amas, le vecteur associé au paramètre de réseau dans l'espace réel $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$ est segmenté, $\tilde{\mathbf{r}}$ situant l'amas dans le super-réseau d'amas reconstituant le réseau de Bravais et \mathbf{R} situant les sites dans l'amas. Le vecteur d'onde de Bloch de la zone de Brillouin originale $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ est également segmenté, $\tilde{\mathbf{k}}$ étant le vecteur d'onde de la srBZ et \mathbf{K} le vecteur du super-réseau réciproque. La fonction de Green interagissante sur l'amas $\mathcal{G}_{\mathbf{R}_i\mathbf{R}_j}^c(i\omega_n)$ décrite dans la base mixte $(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{R})$ s'exprime comme suit :

$$\mathcal{G}_{\mathbf{R}_i\mathbf{R}_j}^c(i\omega_n) = [i\omega_n + \mu - t' - \Gamma(i\omega_n) - \Sigma_c(i\omega_n)]_{ij}^{-1}, \quad (4.13)$$

où Σ_c est la matrice de la *self-énergie*, t' est la matrice du terme de saut intra-amas, et Γ est la fonction d'hybridation dont la forme peut être déduite des équations du mouvement⁵ à partir du hamiltonien de l'éq.(3.1) :

$$\Gamma_{\mathbf{R}_i\mathbf{R}_j}(i\omega_n) = \sum_{\alpha,\sigma} \frac{\theta_{i\alpha,\sigma}\theta_{j\alpha,\sigma}^*}{i\omega_n - \epsilon_{\alpha,\sigma}}. \quad (4.14)$$

Une fois la *self-énergie* de l'amas Σ_c déterminée à l'aide d'un solutionneur d'impureté, on suppose qu'elle correspond à celle du réseau, signifiant que la fonction de Green du réseau $\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$ s'écrit, en vertu de l'éq.(4.7) :

$$\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)^{-1} = i\omega_n + \mu - t(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(i\omega_n). \quad (4.15)$$

La *self-énergie* Σ_c peut être réécrite comme suit en partant de l'éq.(4.13) :

$$\Sigma_c(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - t' - \mathcal{G}_c(i\omega_n)^{-1} - \Gamma(i\omega_n). \quad (4.16)$$

L'autocohérence de la CDMFT réside dans le fait que la fonction de Green du réseau projetée sur l'impureté $\bar{\mathcal{G}}(i\omega_n)$

$$\bar{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - t(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(i\omega_n)} \quad (4.17)$$

coïncide avec celle de l'éq.(4.13), de telle sorte que

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - \frac{N}{N_c} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} [i\omega_n + \mu - t(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(i\omega_n)] = \Sigma_c(i\omega_n), \quad (4.18)$$

5. La dérivation complète est faite dans cette référence [75], ch.56.

où $\mathcal{G}_0(i\omega_n)$ est la fonction de Weiss. Au fil de ce mémoire, il est sous-entendu que $\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$, $\bar{\mathcal{G}}(i\omega_n)$ et $\mathcal{G}_c(i\omega_n)$ ont une dépendance implicite sur les sites intra-amas \mathbf{R}_i et \mathbf{R}_j , de même que sur le spin σ . L'éq.(4.18) constitue la relation d'autocoherence de la CDMFT et elle tient du fait que $\bar{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \mathcal{G}_c(i\omega_n)$. Or, comment s'articule la procédure d'autocoherence de la CDMFT? Autrement dit, comment arrive-t-on à obtenir une fonction de Weiss convergée contenant la fonction d'hybridation représentant adéquatement l'environnement de l'impureté? Il faut se fier à l'équation d'autocoherence (4.18) afin d'arriver à cette procédure itérative autocohérente permettant de faire converger \mathcal{G}_0 :

$$\underbrace{\left[\mathcal{G}_0^{(i+1)}\right]^{-1}}_{\text{Fonction de Weiss : itération } i+1} = \underbrace{\left[\bar{\mathcal{G}}\left[\mathcal{G}_0^{(i)}\right]\right]^{-1}}_{\text{Fonction de Green du réseau projetée sur l'amas : itération } i} + \underbrace{\Sigma_c\left[\mathcal{G}^{(i)}\right]}_{\text{Self-énergie de l'amas : itération } i}. \quad (4.19)$$

À l'éq.(4.19), on suppose qu'on a atteint la $i^{\text{ème}}$ itération dans la procédure autocohérente de l'éq.(4.18), c'est-à-dire qu'on a résolu le problème d'impureté quantique pour la $i^{\text{ème}}$ fois. On obtient alors la $i^{\text{ème}}$ self-énergie de l'amas Σ_c . Or, à cette self-énergie Σ_c est associée une fonction de Green du réseau $\mathcal{G}^{(i)}$ unique⁶, puisque la CDMFT suppose que la self-énergie de l'amas est égale à celle du réseau, d'où la notation $\Sigma_c[\mathcal{G}^{(i)}]$. Toutefois, la fonction de Green du réseau projetée sur l'amas dépend elle-même de la fonction de Weiss obtenue à la $i^{\text{ème}}$ itération, d'où le terme $\bar{\mathcal{G}}\left[\mathcal{G}_0^{(i)}\right]^{-1}$. La fonction de Weiss subséquente se rapprochant de la solution convergée est obtenue de l'addition (4.19). La procédure est également illustrée sous forme graphique à la fig.4.3 dans le cas où l'ED est utilisée comme solutionneur d'impureté. À la première itération, une fonction de Weiss d'essai est posée. Le choix de l'essai peut influencer sur la rapidité de la convergence et peut même entraîner des solutions non physiques.

Les trois fonctions de Green \mathcal{G} (eq.(4.15)), \mathcal{G}_c (eq.(4.13)) et $\bar{\mathcal{G}}$ (eq.(4.17)) sont exprimées dans la base mixte $(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}})$ suivante, en supposant un appariement de type singulet entre les électrons formant les paires de Cooper :

$$\hat{\Psi} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}}\uparrow,1} \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}}\uparrow,2} \\ \vdots \\ \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}}\downarrow,N_c-1}^\dagger \\ \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}}\downarrow,N_c}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger = \left(\hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}}\uparrow,1}^\dagger \quad \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}}\uparrow,2}^\dagger \quad \cdots \quad \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}}\downarrow,N_c-1} \quad \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}}\downarrow,N_c} \right).$$

6. Voir la sous-section 5.4.1 et l'Appendice J.

Autrement dit, ces fonctions de Green s'expriment comme des fonctions de corrélation entre différents spineurs de Nambu : $\mathcal{G}(\vec{\mathbf{k}}, \tau) = \langle \mathcal{T}_\tau \hat{\Psi}(\tau) \hat{\Psi}^\dagger(0) \rangle$. Dans ce mémoire, on traite le cas spécifique où le nombre de sites intra-amas est $N_c = 4$.

Diagonalisation exacte (ED)

Le but d'un solutionneur d'impureté est de solutionner les équations du mouvement des électrons interagissants sur une impureté en calculant la fonction de Green de l'amas \mathcal{G}_c . La diagonalisation exacte résout le modèle d'impureté en trouvant l'état fondamental du hamiltonien de l'éq.(3.1). En diagonalisation exacte, l'environnement de l'impureté est représenté par un nombre fini N_b de bains électroniques comportant quelques orbitales électroniques non-interagissantes. Les différents bains peuvent s'hybrider ensemble et leur configuration peut être soumise à des règles de symétrie. Un amas en ED peut avoir la forme présentée à la figure 4.2.

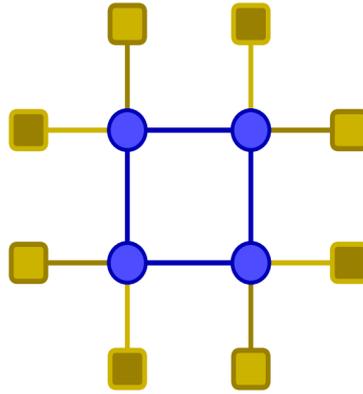


FIGURE 4.2 – Exemple d'amas 2x2 utilisé en ED. Les points bleus sont les sites physiques constituant le réseau atomique bidimensionnel auxquels sont rattachés des bains d'énergie discrète représentant les degrés de liberté du reste du réseau. Les paramètres de bain sont les paramètres variationnels optimisés dans la CDMFT et elles ne sont qu'une construction abstraite. Les différentes teintes jaunâtres des bains évoquent le fait que généralement, différents bains connectés à différents sites atomiques peuvent avoir différents paramètres. Également, différentes symétries peuvent lier les bains l'un à l'autre. La figure est tirée de [15].

Puisque la fonction \mathcal{G}_c issue de l'ED est résolue en diagonalisant la hamiltonien (3.1), il faut construire l'espace de Hilbert du système complet de taille $\dim(\mathfrak{H})^{(N_b+N_c)} = 4^{(N_b+N_c)}$. Cette croissance exponentielle de l'espace de Hilbert contraint la taille de l'amas à résoudre et le nombre d'orbitales total sur l'impureté. On utilise la représentation de Lehmann de la fonction de Green (eq.(2.56)) pour exprimer l'équation

d'autocohérence (4.18). La relation d'autocohérence ne peut pas être satisfaite exactement avec un nombre de bains fini. Lorsqu'on résout les équations d'autocohérence de la CDMFT avec un solveur ED, cela signifie qu'une fonction de distance d doit être minimisée sous un certain seuil de tolérance [63] : le critère de convergence suivant doit être vérifié :

$$d = \sum_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} \sum_{\sigma \sigma'} W(i\omega_n) \left| \left(\mathcal{G}_c(i\omega_n)^{-1} - \bar{\mathcal{G}}(i\omega_n)^{-1} \right)_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j, \sigma \sigma'} \right|^2. \quad (4.21)$$

Il est ainsi impossible d'avoir que \mathcal{G}_c égalise $\bar{\mathcal{G}}$, puisque l'environnement est représenté par des bains discrets et ne peut comporter le nombre de degrés de liberté infini du reste du réseau. Ainsi, afin de représenter fidèlement les degrés de liberté importants, une fréquence de coupure $i\omega_c$, avec⁷ $\omega_c = 2t$, est ajoutée pour discriminer entre les degrés de libertés de hautes énergies et ceux de plus faibles énergies. La fonction poids $W(i\omega_n)$ est telle que $W(i\omega_n) = 1$ si $\omega_n < 2t$ et $W(i\omega_n) = 0$ sinon. La température fictive définissant la grille de fréquences de Matsubara est $\beta = 50/t$ [23]. En insérant les définitions (4.13) et (4.17) des fonctions de Green dans l'équation d'autocohérence (4.21), on constate que la fonction d'hybridation Γ est optimisée de telle sorte que l'éq.(4.21) est minimisée. L'optimisation emploie la méthode de Powell [52]. Les détails de l'implémentation de l'ED en CDMFT sont présentés de manière exhaustive dans la thèse de CHARLEBOIS [15] et dans l'article de FOLEY et al. [23].

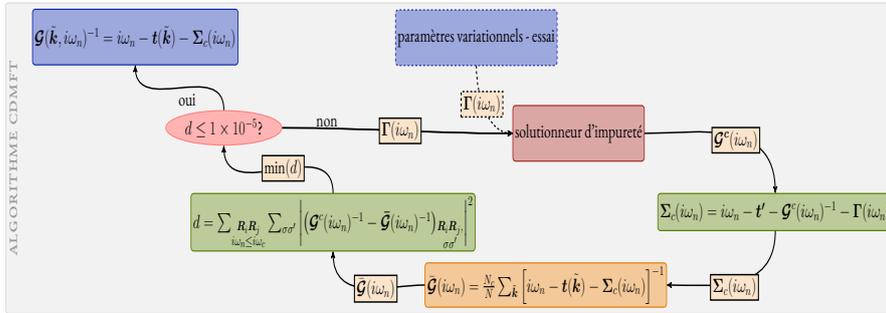


FIGURE 4.3 – Illustration procédurale de la CDMFT

Quand on utilise l'ED pour obtenir les fonctions de Green à température nulle, les densités spectrales (éq.(D.4)) ont un profil piqué. Pour alléger les calculs, plutôt que d'intégrer sur l'axe imaginaire, on introduit une autre température artificielle pour introduire une certaine largeur à mi-hauteur dans la fonction de densité spectrale (cf. éq.(2.53)) et on somme sur les fréquences de Matsubara fermioniques. La perte d'information est contrôlée lorsqu'on fait intervenir cette température fictive, comme indiqué à l'Appendice M.

7. L'unité d'énergie du terme de saut premier-voisin est notée t .

La sommation sur les fréquences de Matsubara permet d'étudier également l'effet de la température sur les données.

Monte-Carlo quantique en temps continu (CTQMC)

L'autre solutionneur utilisé est celui CT-HYB de la famille CTQMC. Ce dernier permet de solutionner les équations du mouvement des électrons sur l'amas à température finie, contrairement à l'ED qui fonctionne à température nulle. D'une certaine façon, le solutionneur d'impureté CT-HYB somme sur l'ensemble des diagrammes de Feynman régissant la propagation des électrons sur l'impureté. Afin de compter tous les diagrammes de Feynman importants, il faut échantillonner l'espace des phases à l'aide de la fonction de partition de l'impureté (éq.(3.3)) en utilisant une méthode de calcul stochastique comme le Monte-Carlo. Contrairement aux autres solutionneurs membres de la famille CTQMC tels CT-INT et CT-AUX, CT-HYB est particulièrement bien adapté pour solutionner le modèle de Hubbard à fort couplage, puisque la complexité de l'algorithme CT-HYB croît comme $ae^{N_c\beta^2} + bN_c\beta^3$ [25], où β représente l'inverse de la température, N_c le nombre de sites sur l'impureté et $a \gg b$. Toutefois, l'applicabilité de CT-HYB se limite aux amas de faible dimension et les faibles températures ne sont pas aussi facilement accessibles que si CT-INT ou CT-AUX était utilisé : la complexité de ces derniers croît comme β .

À la lumière de la [sous-section 3.0.1](#), on expose les aspects saillants du solutionneur d'impureté CT-HYB développé par WERNER et al. [82]. Comme mentionné précédemment, le solutionneur d'impureté CT-HYB fait partie de la famille des solutionneurs d'impureté utilisant le Monte-Carlo quantique en temps continu (CTQMC). Cette famille de solutionneurs — donc celui en question dans ce mémoire (CT-HYB) — est présentée en détails par GULL et al. [25]. Ce qui distingue le solutionneur CT-HYB du reste de la famille CTQMC est qu'il échantillonne les différents diagrammes de Feynman en développant la fonction de partition (éq.(3.3)) en fonction du hamiltonien d'hybridation $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$:

$$\mathcal{Z}_c = \sum_k (-1)^k \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_k \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}} + \hat{\mathcal{H}}_b)} \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_k) \times \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_{k-1}) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_1) \right]. \quad (4.22)$$

La fonction de partition éq.(4.22) est une fonction de distribution de haute dimensionnalité et une chaîne de Markov est utilisée afin d'échantillonner aléatoirement l'espace des configurations. Si la chaîne de Markov converge, la fonction de partition éq.(4.22) représente la fonction de distribution cible et le bilan global est satisfait [56]. Pour ce faire, la chaîne de Markov doit être ergodique, c'est-à-dire que toutes les configurations du système doivent être échantillonnées si le programme roulait un temps infini⁸. Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$ est défini à l'éq.(3.1). Si l'on développe l'éq.(4.22) et que l'on ne conserve que les termes pairs non-nuls, on trouve

8. Voir la section 3.6 de [56].

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_c = \mathcal{Z}_b \sum_k \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_k \int_0^\beta d\tau'_1 \cdots d\tau'_k \sum_{\substack{i_1 \cdots i_k \\ i'_1 \cdots i'_k}} \text{tr} \left[\mathcal{T}_\tau e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}} \hat{d}_{i_k}(\tau_k) \hat{d}_{i'_k}^\dagger(\tau'_k) \right. \\ \left. \times \cdots \hat{d}_{i_1}(\tau_1) \hat{d}_{i'_1}^\dagger(\tau'_1) \right] \det \Gamma_{i'_1 \cdots i'_k}^{i_1 \cdots i_k}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Le passage de l'éq.(4.22) à l'éq.(4.23) est dérivé à l'Appendice G. Le terme $\det \Gamma_{i'_1 \cdots i'_k}^{i_1 \cdots i_k}$ correspond au déterminant des fonctions de Green des électrons sans interaction du bain (\hat{c}). La fonction de partition des électrons dans le bain est notée \mathcal{Z}_b . La fonction de partition de l'éq.(4.23) constitue le poids statistique d'une configuration \mathcal{C}_k dans une distribution inconnue. Une configuration associée à un ordre de développement k comporte, par exemple, l'ensemble suivant :

$$\mathcal{C}_k = \{[\tau_1, \tau'_1, \sigma_1] \cdots [\tau_k, \tau'_k, \sigma_k]\}. \quad (4.24)$$

On cherche à déterminer cette distribution en échantillonnant l'espace des configurations du système de manière ergodique. Les configurations \mathcal{C}_k comportent chacune l'ensemble des k vertex définissant les diagrammes de Feynman échantillonnés.

Lorsqu'on progresse dans la chaîne de Markov, c'est-à-dire lorsqu'on passe d'une configuration $\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k\pm 1}$, on doit ajouter ou retirer un vertex à la fois. Puisqu'on travaille avec des fermions, les règles d'anticommution entre les opérateurs fermioniques font en sorte que certains poids statistiques de l'éq.(4.23) deviennent négatifs. Pour traiter ce problème, les signes des poids statistiques sont absorbés dans l'observable dont la moyenne thermodynamique est évaluée et la fonction de partition considérée prend seulement des valeurs positives⁹.

Périodisation

Aussitôt que la fonction de Green du réseau eq.(4.15) a été calculée, utilisant soit un solveur ED ou CTQMC pour déterminer $\Sigma_c(i\omega_n)$, il est possible de périodiser cette dernière afin de la définir dans la zone de Brillouin originale et restaurer l'invariance par translation.

La fonction de Green du réseau eq.(4.15) peut être réécrite de la manière suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ij}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)^{-1} &= [i\omega_n + \mu - t(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_c(i\omega_n)]_{ij} \\ &= \mathcal{M}_{ij}(i\omega_n)^{-1} - t(\tilde{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (4.25)$$

où $\mathcal{M}_{ij}(i\omega_n)$ est le cumulatif de la fonction de Green. On met en valeur cette quantité puisqu'elle est locale et cela provient du fait que la *self-énergie* $\delta\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$ de la section 4.1 n'existe pas entre les amas constituant les impuretés du modèle d'Anderson (voir la fig.(5.2)).

⁹. Pour plus de détails, voir la section 3.6.5 de [56].

La taille de la zone de Brillouin originale bidimensionnelle est divisée par 2 si la taille de la maille élémentaire est doublée, par réciprocity.

Pourquoi périodise-t-on, quelle en est la raison ? Périodiser au sens large revient à étendre l'effet des interactions calculées dans la zone srBZ (espace des $\tilde{\mathbf{k}}$) à celle de la zone de Brillouin originale \mathbf{k} . Par exemple, la zone de Brillouin originale BZ diffère si l'on a de l'AFM ou pas s'ajoutant à la supraconductivité d SC. Périodiser $\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$ ou le cumulant pour la représenter dans la zone de Brillouin réduite AFM (rBZ) paraît naturel puisque la maille élémentaire double en surface étant donnée la périodicité commensurable de (π, π) . Notamment, dans le calcul de la rigidité superfluide, lorsqu'il y a coexistence AFM+ d SC, le domaine de validité dans la BZ (zone des \mathbf{k}) est restreint à la zone rBZ¹⁰, car la taille de la zone BZ est divisée¹¹ par 2. Ainsi, en périodisant dans la zone rBZ, les fonctions de Green \mathcal{G} de dimension initiale $2N_c \times 2N_c$ représentées dans la base mixte éq.(4.20) diminuent de moitié leur dimension — à $N_c \times N_c$, puisque l'on se retrouve à projeter dans la zone rBZ.

Deux options sont disponibles lorsque vient temps de périodiser : on peut soit périodiser la fonction de Green \mathcal{G} (éq.(4.15)) ou périodiser le cumulant de \mathcal{G} (éq.(4.25))¹². Ces deux options sont abordées dans cette sous-section, respectivement.

La procédure de périodisation de la fonction de Green s'exprime comme [64] :

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \mathcal{G}_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n), \quad (4.26)$$

alors que la procédure de périodisation du cumulant de la fonction de Green est

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \left[\left(\sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \mathcal{M}_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j}(i\omega_n) \right)^{-1} - \epsilon(\mathbf{k}) \right]^{-1}, \quad (4.27)$$

Il est important d'insister sur le fait que la périodisation, bien qu'elle puisse être exprimée sous forme d'une matrice hermitique, n'est pas unitaire.

où N_c prend en compte le nombre de sites intra-amas. Par exemple, la relation de dispersion électronique $\epsilon(\mathbf{k})$ est soit celle exprimée dans la base éq.(5.38) dans la situation de coexistence AFM+ d SC ou dans la base éq.(5.44) dans un système uniquement supraconducteur. Les procédures de périodisation (éq.(4.26) et éq.(4.27)) donnent des résultats différents l'un de l'autre comme l'on voit au chapitre 6. La fonction de Green de l'amas $\mathcal{G}_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$ est périodique modulo \mathbf{K} , signifiant que la périodisation de cette fonction de Green apparaissant dans l'(4.26) est invariante sous la transformation $\tilde{\mathbf{k}} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$. Toutefois, contrairement à la fonction de Green de l'amas, le cumulant $\mathcal{M}_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j}(i\omega_n)$ de l'éq.(4.27) ne dépend pas de $\tilde{\mathbf{k}}$. Dans le cas où l'on périodise dans la

10. cf. éqs.(5.36) et (5.37).

11. Voir fig.(4.1).

12. Au chapitre 6, la périodisation de la fonction de Green sera notée *pér. G* et celle du cumulant *pér. M*

zone de Brillouin originale lorsque seule la d SC est présente et que $N_c = 4$, les vecteurs d'onde du super-réseau réciproque sont

$$\mathbf{K} \in \{(0, 0), (\pi, 0), (0, \pi), (\pi, \pi)\},$$

alors que dans le cas où l'AFM est aussi présent, $N_c = 2$ et

$$\mathbf{K} \in \{(0, 0), (\pi, 0)\} \text{ ou } \{(0, 0), (0, \pi)\}.$$

Les deux sous-ensembles \mathbf{K} dans la procédure de périodisation AFM- d SC sont équivalents et donnent la même fonction de Green $\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$, comme laisse entendre la figure 4.1. Ainsi, périodiser la fonction de Green éq.(4.15) à l'aide la formule éq.(4.26) ou le cumulatif éq.(4.27) revient, dans un système où coexistent AFM+ d SC, à projeter la fonction de Green du réseau sur la zone rBZ.

Toutefois, il faut être prudent, puisque les transformations éq.(4.26) et éq.(4.27) ne sont pas unitaires en soit — on doit annuler les vecteurs d'onde du super-réseau réciproque hors-diagonaux afin de retrouver l'invariance sous translation dans la zone BZ (ou rBZ pour l'AFM+ d SC), soit en supposant que $\mathbf{K}_i = \mathbf{K}_j$. La transformation unitaire complète serait plutôt :

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}_i, \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}_j; i\omega_n) \\ &= \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} e^{-i(\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{K}_i - \mathbf{R}_j \cdot \mathbf{K}_j)} e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \mathcal{G}_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n). \end{aligned} \quad (4.28)$$

On doit comprendre que le fait d'égaliser $\mathbf{K}_i = \mathbf{K}_j$ et d'ainsi obtenir l'éq.(4.26) ne change rien aux résultats de calculs de quantité à un corps telle la densité de particule sur le réseau :

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^2 \tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^2} \sum_i e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i)} \mathcal{G}_{ii}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^2 \tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^2} \text{tr} [\mathcal{G}(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)] e^{i\omega_n 0^+}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Toutefois, le calcul de la rigidité superfluide, quantité physique faisant intervenir deux corps (deux fonctions de Green), est affecté par le rejet de ces éléments hors-diagonaux puisque différentes fonctions de Green matricielles se multiplient entre elles¹³. Si toutefois on utilisait directement la transformation unitaire éq.(4.28), cela ne changerait rien à la formule de la rigidité superfluide éq.(5.19) car elle fait intervenir une trace. On obtiendrait alors immédiatement les équations de la rigidité superfluide dans le schéma sans périodisation¹⁴, i. e., éq.(5.31). Le lecteur ou la lectrice est convié(e) à se référer à la thèse de VERRET [80] pour une discussion plus approfondie en lien avec les transformées de Fourier partielles et les différentes représentations mixtes.

13. Voir, par exemple, les équations (5.37) ainsi que (5.40).

14. En ne périodisant pas, on rejette l'approximation $\mathbf{K}_i = \mathbf{K}_j$. Les résultats obtenus sans périodisation sont notés *tr.* au chapitre 6.

Quatrième partie

LA RIGIDITÉ SUPERFLUIDE

On n'entend que les questions auxquelles on est en mesure de trouver réponse.

— Friedrich Nietzsche [50]

Dans cette portion de l'ouvrage, la rigidité superfluide ρ_s est expliquée en détail au [chapitre 5](#). Un formalisme permettant de dériver une expression décrivant la rigidité superfluide pour des systèmes d'appariement singulet de taille arbitraire et comportant une quantité quelconque de phases en compétition y est présentée. Notamment, les formules de la rigidité superfluide avec supraconductivité seulement ainsi qu'en régime de coexistence AFM+SC y sont présentées et, le cas échéant, les formules en régime de coexistence de phase sont démontrées. Ensuite, au [chapitre 6](#), on montre et discute les résultats numériques de la rigidité superfluide obtenus à température nulle avec une implémentation ED de la CDMFT, ainsi que les résultats à température finie obtenus avec une implémentation CT-HYB de la CDMFT. L'essentiel de mes contributions scientifiques s'y retrouve. De la même façon que dans l'introduction, les formules importantes sont encadrées.

RIGIDITÉ SUPERFLUIDE

Dans ce chapitre, on justifie d'un point de vue phénoménologique, dans le formalisme d'action effective, pourquoi les fluctuations de phase du paramètre d'ordre supraconducteur affecteraient la longueur de pénétration λ et, par conséquent, la température critique T_c de la transition supraconductrice [73, 77]. Pour ce faire, on s'appuie sur l'action régissant les équations du mouvement de l'électrodynamique quantique scalaire (SQED). On dérive également, utilisant le formalisme des dérivées fonctionnelles, les formules générales de la rigidité superfluide dans les cas où l'on inclut les corrections de vertex, ou pas. Ensuite, en reprenant la formule générale de la rigidité superfluide sans correction de vertex, on précise la forme de cette dernière lorsque l'on trace sur la fonction de Green de l'amas \mathcal{G}^c et lorsque l'on périodise \mathcal{G}^c dans la zone de Brillouin réduite antiferromagnétique. On présente finalement la formule de la rigidité superfluide prévalant dans le régime où seulement la supraconductivité est présente. On rétablit le système d'unité S.I. dans cette section, puisqu'une analyse dimensionnelle est requise afin de pouvoir comparer les résultats numériques de la longueur d'onde de pénétration avec les données expérimentales au [chapitre 6](#).

SYMÉTRIE BRISÉE ET SUPRACONDUCTIVITÉ

Les symétries du hamiltonien \mathcal{H} d'un système peuvent être différentes de celles de l'état fondamental de \mathcal{H} . Il suffit qu'il y ait brisure spontanée de la symétrie engendrant une transition de phase afin que cela se produise. La brisure de symétrie permet d'éliminer certains états de configuration à plus haute énergie libre \mathcal{F} lorsque certains paramètres physiques, tels la température et le potentiel chimique μ diminuent. Les *crossovers*, principalement présents dans la physique des électrons fortement corrélés, permettent également de réduire la taille de l'espace des phases, par exemple, lorsque la température diminue. Un exemple simple se produit dans le modèle de Hubbard bi-dimensionnel à une bande à N particules, dans lequel il y a un passage à ¹ $U \gtrsim W$ entre un régime métallique, où l'espace de Hilbert \mathfrak{H} sur chaque site du réseau est $\mathfrak{H} = \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$, et un régime paramagnétique dégénéré où $\mathfrak{H} = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. En traversant ce *crossover* à demi-rempli où les fluctuations de charge sont gappées dans le régime paramagnétique, le système passe d'un espace de configurations de dimension 4^N à 2^N . Toujours à demi-rempli, à plus basse température

Dans l'ensemble grand-canonique, l'énergie libre \mathcal{F} s'écrit $\mathcal{F} = E - TS - \mu n$, où E est l'énergie, T la température, S l'entropie, μ le potentiel chimique et n la densité de particules.

1. La variable W décrit la largeur de bande.

Si l'on considère le modèle de Hubbard bidimensionnel à une bande, il s'agit d'un crossover à $T \simeq \frac{4t^2}{U}$ plutôt que d'une transition de phase.

Le théorème de Mermin-Wagner interdit les transitions de phase lorsque la dimension de l'espace réel est moindre que 3 et que la symétrie brisée est continue.

dans le diagramme de phase, le système rencontre un autre *crossover* à $T \simeq \frac{4t^2}{U}$, cette fois-ci du régime paramagnétique au régime d'isolant de Mott AFM. Dans le régime d'isolant de Mott AFM, il y a levée de dégénérescence et des états de spin singulet $|s\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ ainsi que triplet $|t\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ se forment. L'état AFM se produit localement, lorsque l'état électronique est une combinaison linéaire de $|s\rangle$ et $|t\rangle$, i. e., $|s\rangle + |t\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ et $|t\rangle - |s\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle$. Un *crossover* ne brise toutefois pas la symétrie.

Typiquement, lors d'une brisure de symétrie, si un hamiltonien \mathcal{H} est invariant par une transformation du groupe A , alors le groupe de symétrie de l'état fondamental B , état issu d'une brisure de symétrie, est tel que $B \subset A$. Ce ne sont toutefois pas tous les sous-groupes B qui sont réalisés dans l'état fondamental ; des règles de sélection s'appliquent lors d'un changement de phase [47]. Comment peut-on appliquer ces idées de symétrie brisée à la supraconductivité ? Dans la description de Landau de la transition supraconductrice, l'énergie libre d'un supraconducteur à proximité de la transition peut être exprimée en tant que fonctionnelle d'un paramètre d'ordre complexe $\Psi(x)$ relié à la densité d'électrons n_s formant le condensat de paires de Cooper. Le paramètre d'ordre supraconducteur Ψ associé à une brisure de symétrie de jauge $U(1)$ s'écrit $\Psi(x) = |\Psi(x)| e^{i\theta(x)}$. Lors d'une brisure de symétrie spontanée, la phase ainsi que l'amplitude du paramètre d'ordre sont fixées spontanément. Le nombre total de particules n'est alors plus conservé. La rigidité de la phase du paramètre d'ordre ou la rigidité superfluide de l'état fondamental supraconducteur correspond au changement dans l'énergie libre lorsque la phase dudit paramètre d'ordre est déformée. Dans ce qui suit, on s'attarde au cas où $\nabla_x |\Psi(x)|^2 \ll |\Psi(x)|^2 \nabla_x \theta(x)$, où $|\Psi(x)|^2 = n_s$ est la densité superfluide et $x \equiv (\tau, \mathbf{r})$ est le quadrivecteur en temps imaginaire.

THÉORIE DE LONDON

La théorie de London apparut en 1935 et fut la première théorie de la supraconductivité permettant d'expliquer la répulsion du champ magnétique d'un supraconducteur. Cette théorie explique le diamagnétisme parfait des supraconducteurs à partir des équations de Maxwell, en particulier

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mathbf{J}_s(\mathbf{r}) \quad (5.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0 \quad (5.1b)$$

où l'éq.(5.1a) représente la loi d'Ampère à champ électrique \mathbf{E} statique dans le temps, l'éq.(5.1b) représente la loi de Gauss pour un champ magnétique \mathbf{B} et μ_0 est la perméabilité du vide. \mathbf{J}_s est la densité de courant sans dissipation² dans le supraconducteur, autrement dit le

2. Aussi appelée densité de supercourant.

courant de paires de Cooper. Cette densité de courant prend la forme suivante en fonction du potentiel vecteur \mathbf{A} :

$$J_s^a(\mathbf{r}) = - \int d^3r' \left[\frac{1}{\mu_0 \lambda^2 (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \right]_{ab} A^b(\mathbf{r}'), \quad (5.2)$$

où λ est la longueur de pénétration magnétique, définie un peu plus loin. Dans l'éq.(5.2), les indices italiques $a, b \in \{x, y, z\}$ dénotent la direction de λ dans le système cartésien. λ dépend de la différence en position $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, puisque le potentiel vecteur peut avoir un effet retardé sur J_s . Toutefois, si on suppose que la longueur de cohérence supraconductrice ξ est plus courte que λ , on peut alors négliger la dépendance de λ sur la position \mathbf{r} . En vertu de la loi de Gauss (5.1b) et de la définition (5.2), si l'on prend le rotationnel de l'éq.(5.1a), on trouve

$$\nabla^2 B^a(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{\lambda^2} \right]_{ab} B^b(\mathbf{r}). \quad (5.3)$$

Le tenseur de l'éq.(5.4) est symétrique. La solution à l'équation différentielle (5.4) est la suivante :

$$B^a(\mathbf{r}) = B_0^b \left[e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{\lambda}} \right]_{ab}, \quad (5.4)$$

où B_0 est l'amplitude en surface du champ magnétique. La solution (5.4) montre qu'étant donné un courant sans dissipation J_s , on a une expulsion du champ magnétique du matériau supraconducteur. Des supercourants se formeraient à la surface du matériaux supraconducteurs, à l'intérieur d'une distance de l'ordre de λ , et ces derniers s'opposeraient au champ magnétique \mathbf{B} appliqué. Puisqu'on a négligé la dépendance en \mathbf{r} de λ , cette relation d'équivalence entre la densité superfluide n_s et la longueur de pénétration de London λ peut être établie :

$$\lambda_{ab}^{-2} \delta_{ab} = \frac{n_s e^2}{m^*} \mu_0 \delta_{ab} = \rho_{ab} \mu_0 \delta_{ab}, \quad (5.5)$$

où μ_0 est la perméabilité magnétique, e est la charge électrique, m^* la masse renormalisée des électrons. On a supposé à l'éq.(5.5) que la densité superfluide est indépendante de la direction a ou b . ρ_{ab} est la rigidité superfluide. La relation éq.(5.5) est celle qui permettra de comparer les résultats théoriques avec les données expérimentales.

FLUCTUATIONS DE PHASE CLASSIQUES

Dans la théorie de Ginzburg-Landau, il est stipulé que l'énergie libre \mathcal{F} d'un état supraconducteur est une fonctionnelle d'un paramètre d'ordre complexe Ψ relié à la densité de particules n_s composant le condensat supraconducteur, aussi nommée densité superfluide.

Afin d'arriver à l'éq.(5.4), on a utilisé l'identité vectorielle selon laquelle $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{B}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}$.

Dans cette théorie, le condensat d'électrons formerait un superfluide conduisant l'électricité sans dissipation. Cette théorie a pu expliquer les supraconducteurs conventionnels de type I.

Une avenue peu commune est empruntée à l'Appendice I afin d'expliquer le rôle de la rigidité superfluide dans le cadre de la théorie de Ginzburg-Landau, et le lecteur ou la lectrice désirant élargir sa compréhension est convié(e) à la lire. Les équations de Ginzburg-Landau y sont dérivées à partir de l'action de l'électrodynamique quantique en champ scalaire (SQED) et l'importance des fluctuations classiques de la phase du paramètre d'ordre supraconducteur sur l'énergie libre y est montrée. On arrive notamment à cette expression de l'action de la phase du paramètre d'ordre :

Action de la phase du paramètre d'ordre

$$S[\theta] \simeq \frac{\rho_s}{2} \int d^3r \int_0^\beta d\tau \left[\frac{\hbar^2}{(e^*)^2 \alpha} |\partial_\tau \theta(x)|^2 + \left(\frac{\hbar}{e^*} \partial_i \theta(x) - A_i(x) \right)^2 \right].$$

(5.6)

Dans l'équation (5.6), la rigidité superfluide est notée ρ_s et elle a la forme suivante : $\rho_s = \frac{n_s (e^*)^2}{m^*}$ (cf. (5.5)). Le terme α dépend de la masse du condensat de paires de Cooper et $e^* = 2e$ est la charge de ces paires.

Puisque l'énergie libre s'écrit $\mathcal{F} = -1/\beta \ln \mathcal{Z}$, où la fonction de partition³ $\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\Psi] e^{-S[|\Psi|] - S[\theta]}$, on remarque à partir de l'équation (5.6) que si les fluctuations classiques de la phase du paramètre d'ordre $\theta(x)$ sont grandes, même lorsque les fluctuations d'amplitude du paramètre d'ordre peuvent être négligées, elles entraîneront des fluctuations de l'énergie libre. La rigidité superfluide ρ_s de l'éq.(5.6) a donc pour effet de stabiliser l'énergie libre si sa valeur est grande par rapport aux fluctuations de phase du paramètre d'ordre supraconducteur. Les fluctuations classiques de phase du paramètre d'ordre $\Psi(x)$ affecteraient donc la robustesse de la phase supraconductrice [21]. Ces fluctuations de phase dans les cuprates supraconducteurs seraient importantes lorsque ρ_s est faible⁴ et elles repousseraient la cohérence de phase de la fonction d'onde macroscopique de paires de Cooper à des températures moindres que celle à laquelle les paires de Cooper se forment (T_{cm}) [21, 49]. La température critique T_c serait alors plus petite que celle que l'on obtiendrait dans un traitement champ-moyen.

3. Lorsqu'on travaille en temps réel avec un système non-relativiste, la fonction de partition prend la forme $\int \mathcal{D}[\Psi] e^{\frac{i}{\hbar} S[\Psi]}$, puisque $-i\hbar d\tau = dt$.

4. Ces fluctuations de phase seraient présentes dans les matériaux supraconducteurs de faible dimensionnalité, i. e., les pnictures à base de fer [67], les supraconducteurs organiques [68] et les cuprates supraconducteurs [21].

FORMULE GÉNÉRALE

Comment calcule-t-on la rigidité superfluide de manière générale ? Et dans les cuprates ? On répond à ces questions dans cette section.

La fonctionnelle d'énergie libre \mathcal{F} d'un système couplé au potentiel vecteur est une fonctionnelle génératrice (cf. éq.(2.35)) dont les champs sources sont le potentiel vecteur lui-même, de telle sorte que la rigidité superfluide peut être reliée à la fonction de corrélation courant-courant (voir section 2.5, éq.(2.68)) comme suit :

$$\begin{aligned} & \langle \mathcal{T}_\tau \hat{J}_a(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{A}) \hat{J}_b(\mathbf{r}', \tau'; \mathbf{A}) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \\ &= \frac{-\beta}{V} \frac{\delta^2 \mathcal{F}[\mathcal{G}]}{\delta A_a(\mathbf{r}, \tau) \delta A_b(\mathbf{r}', \tau')} \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

où la valeur moyenne est évaluée dans l'état fondamental supraconducteur, les indices $a, b \in \{x, y, z\}$ dénotent les axes cartésiens, V est le volume de la maille élémentaire et \mathcal{F} est l'énergie libre du système. En particulier, on calcule le courant transverse $\hat{J}_a(\mathbf{r}, \tau)$ induit par un champ magnétique décrit par un potentiel vecteur transverse $A_b(\mathbf{r}', \tau')$ dirigé selon les axes principaux de la maille élémentaire (voir fig.1.2).

Dans ce qui suit, on montre que la fonction de corrélation courant-courant de l'éq.(5.7) est proportionnelle à l'expression de la rigidité superfluide ρ_s . Pour ce faire, il faut construire la fonction de partition \mathcal{Z} du système en calculant les intégrales de chemin sur l'ensemble des configurations possibles du paramètre d'ordre supraconducteur. Ainsi, exploitant la notation compacte $x \equiv (\mathbf{r}, \tau) = (r_i, \tau)$, on peut montrer à partir des éqs.(5.6) et (5.7) que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \frac{\delta^2 \mathcal{F}[\mathcal{G}]}{\delta A_a(\mathbf{r}, \tau) \delta A_b(\mathbf{r}', \tau')} \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} \\ &= -\frac{1}{\beta V} \frac{\delta}{\delta A_a(x)} \left(\frac{\delta \ln \sum_{x''} \iint \mathcal{D}[\theta] \mathcal{D}[|\Psi|] e^{-S[\theta] - S[|\Psi|]}}{\delta A_b(x')} \right) \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} \\ &= \frac{1}{\beta V} \frac{\delta}{\delta A_a(x)} \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{x''} \iint \mathcal{D}[\theta] \mathcal{D}[|\Psi|] e^{-S[\Psi]} \times \right. \\ & \quad \left. \left[-\frac{n_s e^* \alpha}{\hbar} \int d^d r'' \int_0^\beta d\tau'' \frac{\delta A_i(x'')}{\delta A_b(x')} \left(\partial_i \theta(x'') - \frac{e^*}{\hbar} A_i(x'') \right) \right] \right) \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{r}'', \tau''} \iint \mathcal{D}[\theta] \mathcal{D}[|\Psi|] e^{-S[\Psi]} \left(\frac{e^*}{\hbar} \right)^2 \alpha n_s \delta_{a,b} \\ &= \left(\frac{e^*}{\hbar} \right)^2 \alpha n_s \delta_{a,b} = \rho_s. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Dans l'éq.(5.8), on a décidé de représenter les éléments différentiels des fonctionnelles dans un système de coordonnées cylindriques. La représentation de $\mathcal{D}[\Psi]$ dans ce système est $\mathcal{D}[\Psi] \rightarrow |\Psi| \mathcal{D}[\theta] \mathcal{D}[|\Psi|]$.

On peut interpréter un trou comme une excitation fermionique dans la mer de Fermi, alors que l'électron est une excitation au-dessus de la mer de Fermi.

La constante α est proportionnelle à l'inverse de la masse du condensat de paires de Cooper.

Or, puisque $\nabla_x |\Psi(x)|^2 \ll |\Psi(x)|^2 \nabla_x \theta(x)$, $|\Psi(x)|$ peut être approximé comme constant $|\Psi(x)| \rightarrow |\Psi|$. La constante $|\Psi|$ apparaît dans la fonction de partition \mathcal{Z} , donc disparaît de l'éq.(5.8). On note que les fonctions constituant le paramètre d'ordre $\theta \rightarrow \theta(x)$ et $|\Psi| \rightarrow |\Psi(x)|$ ont une dépendance implicite sur la position \mathbf{r} et le temps imaginaire τ . Encore une fois, comme la densité superfluide varie peu avec la position et le temps⁵, on peut factoriser la densité superfluide n_s en dehors des intégrales. Il est important d'insister sur le fait que $\mathcal{D}[\theta]$ et $\mathcal{D}[|\Psi|]$ représentent les éléments différentiels dans l'espace des configurations du paramètre d'ordre.

Le fait de considérer une longueur de cohérence ξ beaucoup plus faible que la longueur de pénétration magnétique λ permet de factoriser n_s , puisque n_s varie sur une longueur proportionnelle à ξ , signifiant que le kernel de la rigidité superfluide peut être approximé comme constant.

Approche microscopique : corrections de vertex

On dérive ici une expression de la rigidité superfluide ρ_{ab} ($a, b \in \{x, y, z\}$) comprenant les corrections de vertex, afin de pouvoir la comparer avec celle qui les néglige. Afin d'y parvenir, on part de l'énergie libre de l'ensemble grand-canonique définie en tant que fonctionnelle de champ source microscopique ϕ :

$$\mathcal{F}[\phi] = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left[\mathcal{T}_\tau \underbrace{e^{-\hat{\psi}_{\sigma'}(1)\phi_{\sigma',\sigma'}(1,2)\hat{\psi}_{\sigma'}(2)}}_{Y[\phi]} e^{-\beta\hat{K}} \right] \quad 1 \equiv (\mathbf{k}_1, \tau_1, \sigma_1). \quad (5.9)$$

Ici, \mathcal{T}_τ est le super-opérateur d'ordonnancement dans le temps, la trace $\text{Tr}[\dots]$ signifie $\sum_\sigma \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_n [\dots]$, où N est le nombre de mailles élémentaires dans le réseau, et $\hat{K} = \hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}^0 - \mu\hat{n} + \lambda\hat{V}$ est le hamiltonien avec interaction normalisé par le potentiel chimique μ . La variable $\lambda \in \{0, 1\}$ dans \hat{K} établit la force des interactions, où $\lambda = 0$ décrit le système sans interaction et $\lambda = 1$ décrit le système avec interaction. Le hamiltonien sans interaction est $\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}^0$, la perturbation du système est \hat{V} alors que l'opérateur de nombre de particules est \hat{n} . L'intérêt de travailler avec la fonctionnelle de l'éq.(5.9) vient notamment de ce qu'elle permet de générer les fonctions de corrélation en dérivant par rapport aux champs sources, en plus d'être reliée à la fonctionnelle de Kadanoff-Baym⁶ [9] $\Omega[\mathcal{G}]$:

$$\Omega[\mathcal{G}] = \mathcal{F}[\phi] - \frac{1}{\beta} \text{Tr}[\phi\mathcal{G}]. \quad (5.10)$$

$\Omega[\mathcal{G}]$ est une fonctionnelle de la fonction de Green interagissante, i. e., comportant une *self-énergie* $\Sigma[\mathcal{G}]$ non-nulle. Les fonctionnelles $\mathcal{F}[\phi]$ et $\Omega[\mathcal{G}]$ sont reliées par une transformée de Legendre. La fonctionnelle $\Omega[\mathcal{G}]$ est stationnaire lorsque la fonction de Green \mathcal{G} est la solution physique, c'est-à-dire lorsque \mathcal{G} est décrite par l'équation de Dyson (éq.(2.42)). On démontre brièvement à l'Appendice J que la forme du grand potentiel $\Omega[\mathcal{G}]$ est

On explicite le fait que la self-énergie est une fonctionnelle de la fonction de Green en écrivant $\Sigma[\mathcal{G}]$. Cette fonctionnelle est bijective, c'est-à-dire qu'il existe une solution unique Σ pour une fonction de Green interagissante \mathcal{G} donnée et vice-versa. Toutefois, Σ et \mathcal{G} sont invertibles localement seulement [55].

5. cf. éq.(5.6).

6. cf. TREMBLAY [75], ch.64.

$$\Omega[\mathcal{G}] = \Phi[\mathcal{G}] - \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\left(\mathcal{G}_0^{-1} - \mathcal{G}^{-1} \right) \mathcal{G} \right] - \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\ln \left(-\mathcal{G}^{-1} \right) \right], \quad (5.11)$$

où $\Phi[\mathcal{G}]$ est la fonctionnelle de Luttinger-Ward, définie comme

$$\beta \frac{\delta \Phi[\mathcal{G}]}{\delta \mathcal{G}(1,2)} = \Sigma[\mathcal{G}](2,1). \quad (5.12)$$

À la lumière de l'Appendice J, $\Omega[\mathcal{G}]$ est stationnaire lorsque le champ source ϕ est nul puisque l'on retrouve alors l'équation de Dyson. Ainsi, l'énergie libre qu'on utilise est un cas particulier de l'éq.(5.9) :

$$\mathcal{F}[\phi = 0] = \Omega[\mathcal{G}]_{\phi=0} = -\frac{1}{\beta} \ln \underbrace{\sum_k \left[e^{-\beta \left[(\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}^0 + \hat{V}) - \mu \hat{N} \right]} \right]}_{\equiv \mathcal{Z}}, \quad (5.13)$$

où $k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_n)$ est le quadrivecteur dans l'espace réciproque. La somme est définie comme $\sum_k [\dots] \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_n [\dots]$, où N est le nombre de mailles élémentaires. Puisqu'on travaille sur un réseau discret, le couplage minimal s'effectue par la substitution de Peierls [28], se résumant par la substitution selon laquelle $k_i \rightarrow \bar{k}_i = k_i - \frac{e}{\hbar} A_i$. Cette substitution doit se faire dans la base orbitale si l'on néglige les termes d'interaction dipolaire intra-atomique, comme il est argumenté dans l'article de NOURAFKAN et TREMBLAY [51]. Le hamiltonien sans perturbation devient alors $\hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}^0 \rightarrow \hat{H}_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A},\sigma}^0 = \hat{H}_{\mathbf{k},\sigma}^0$. Dans un système supraconducteur, le hamiltonien est représenté dans la base de Nambu et la substitution de Peierls doit être apprêtée avec précaution. En effet, dans ces systèmes, la substitution de Peierls diffère d'un signe lorsqu'elle est faite sur des opérateurs associés aux électrons ($\hat{c}_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}}^\dagger$) ou aux trous ($\hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}}$). Pour cette raison, le couplage minimal au champ électromagnétique d'un hamiltonien exprimé dans la base de Nambu et défini sur un réseau d'orbitales s'écrit⁷ $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k} \mathbb{1}_{2m \times 2m} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{m \times m}}$. La matrice $\sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{m \times m}$ consiste en le produit tensoriel entre la matrice de Pauli σ_3 et le reste de l'espace de Hilbert de dimension $m \times m$ représenté par l'identité. Cette matrice s'assure que la substitution de Peierls soit appropriée pour les systèmes supraconducteurs. Plus loin, on verra que la taille de la matrice identité $\mathbb{1}$ est directement liée au nombre de symétries de la plaquette ainsi qu'à sa dimension dans le modèle d'impureté d'Anderson : plus la dimension de la plaquette est grande et que la quantité de symétries est faible, plus la dimension m de $\mathbb{1}$ sera grande.

La substitution de Peierls est une approximation prenant en compte le fait que la fonction d'onde de Bloch d'un électron dans un cristal accumule une phase dépendant de la trajectoire semi-classique qu'emprunte le paquet d'onde⁸. On calcule alors le courant moyen (évalué

7. La notation restera la même dans les systèmes supraconducteurs : $k_i \rightarrow \bar{k}_i = k_i - \frac{e}{\hbar} A_i \sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{m \times m}$. L'identité $\mathbb{1}_{2m \times 2m}$ sera laissée implicite par la suite.

8. La substitution $\mathbf{k} \pm \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$ est possible parce qu'on regarde la réponse transversale, c'est-à-dire que la dépendance spatiale de \mathbf{A} n'est pas dans la même direction que le

dans l'état supraconducteur) dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire en partant de l'éq.(5.13) :

$$\begin{aligned}
\langle j_a \rangle &= -\frac{1}{V} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta A_a} \\
&= \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta}{\delta A_a} \exp \left(-\beta \left[\left(\hat{H}_{\mathbf{k}}^0 - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{m \times m} + \hat{V} \right) - \mu \hat{N} \right] \right) \right] \\
&= \frac{1}{\beta V} \sum_j \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[-\beta \frac{\delta \hat{H}_{\mathbf{k}}^0}{\delta \bar{k}_j} \underbrace{\frac{\delta \bar{k}_j}{\delta A_a}}_{= -\frac{e}{\hbar} \delta_{a,j} \sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{m \times m}} \underbrace{\frac{e^{-\beta[(\hat{H}_{\mathbf{k}}^0 + \hat{V}) - \mu \hat{N}]} }{\mathcal{Z}}}_{\equiv \hat{\rho}} \right] \\
&= \frac{e}{\hbar V} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[\hat{\rho} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger v_{\mathbf{k}}^a \underbrace{\sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{m \times m}}_{T_{3(m \times m)}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}} \right] \\
&= \lim_{\tau - \tau' \rightarrow 0^-} \frac{e}{\hbar V} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \left[v_{\mathbf{k}}^a T_{3(m \times m)} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau - \tau')} \right] \\
&= \frac{e}{\hbar V} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_n \text{tr} \left[v_{\mathbf{k}}^a T_{3(m \times m)} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-} \right], \tag{5.14}
\end{aligned}$$

où $\hat{\rho}$ est l'opérateur densité, $\hat{\Psi}_{\mathbf{k}}^{(\dagger)}$ sont des spineurs de Nambu et $v_{\mathbf{k}}^a \equiv \frac{\delta H_{\mathbf{k}}^0}{\delta \bar{k}_a}$ est le vertex de courant. Dans le formalisme de Nambu, la fonction de Green et le terme de vertex de courant sont matriciels, d'où la trace notée tr dans l'éq.(5.14). Lors du passage de la quatrième ligne à la cinquième ligne de l'éq.(5.14), on a utilisé la propriété selon laquelle la valeur moyenne d'un opérateur quadratique en opérateurs de champ est reliée à la fonction de Green retardée à un corps (eq.(2.63)). L'étape qui suit est le calcul de $\rho_{ab} = -\frac{\delta \langle j_a \rangle}{\delta A_b} \Big|_{\mathbf{A}=0}$:

$$\begin{aligned}
\rho_{ab} &= -\frac{e}{\hbar V} \frac{\delta}{\delta A_b} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \sum_n \text{tr} \left[v_{\mathbf{k}}^a T_{3(m \times m)} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-} \right] \Big|_{\mathbf{A}=0} \\
&= \frac{e^2}{\hbar^2 \beta} \frac{1}{VN} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \text{tr} \left(\left[v_{\mathbf{k}}^{ba} \underbrace{(T_{3(m \times m)})^2}_{\mathbb{1}_{2m \times 2m}} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-} \right] \right. \\
&\quad \left. + \left[v_{\mathbf{k}}^a T_{3(m \times m)} \frac{\delta \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n)}{\delta A_b} e^{-i\omega_n 0^-} \right] \right) \Big|_{\mathbf{A}=0} \\
&= \frac{e^2}{\hbar^2 VN \beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \text{tr} \left(\left[v_{\mathbf{k}}^{ba} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-} \right] - \right. \\
&\quad \left. \left[v_{\mathbf{k}}^a T_{3(m \times m)} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \underbrace{\frac{\delta \mathcal{G}_{\mathbf{k}}^{-1}(i\omega_n)}{\delta k_b}}_{\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n)} T_{3(m \times m)} \mathcal{G}_{\mathbf{k}}(i\omega_n) e^{-i\omega_n 0^-} \right] \right). \tag{5.15}
\end{aligned}$$

vecteur \mathbf{A} . Le gradient, représenté par \mathbf{k} , n'agit donc pas sur \mathbf{A} . C'est la raison pour laquelle la jauge de Landau a pu être utilisée.

Le terme $\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n)$ est le terme de vertex de courant comprenant les corrections. Dans la [sous-section 5.4.2](#), on suppose que $\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n)$ est similaire au vertex de courant $v_{\mathbf{k}}^a$, c'est-à-dire qu'on suppose que la *self-énergie* ne se couple pas au potentiel vecteur. Ce point sera discuté un peu plus en profondeur plus loin. L'expression diagrammatique de l'éq.(5.15) apparaît à la fig.5.1. Une dérivation similaire à l'éq.(5.15) pour le calcul de l'effet Hall est effectuée par NOURAFKAN et TREMBLAY [51].

Sans corrections de vertex

À la [sous-section 5.4.1](#), on n'a fait aucune approximation concernant les corrections de vertex. De manière générale, la *self-énergie* se couple au potentiel vecteur A_i parce que \mathcal{G} se couple à \mathbf{A} au travers le terme cinétique $H_{\mathbf{k},\sigma}^0$, et donc $\frac{\delta \Sigma}{\delta \mathcal{G}} \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta A_a} \neq 0$. Sans corrections de vertex, on peut écrire l'énergie libre en tant que fonctionnelle de la fonction de Green du système comme suit⁹ :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}] = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln (-\mathcal{G}^{-1}). \quad (5.16)$$

Cette fois-ci, la trace est définie comme suit :

$$\text{Tr} [\dots] \equiv \sum_n \frac{1}{N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \sum_{\sigma} \text{tr} [\dots].$$

La trace tr est effectuée sur un espace de Nambu quelconque. On calcule ensuite ρ_{ab} telle que décrite par l'éq.(5.8) en utilisant l'éq.(5.16) :

$$\begin{aligned} \rho_{ab} &= -\frac{1}{\beta V N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}, n, \sigma} \frac{\delta}{\delta A_b} \text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta A_a} \right] \Big|_{\mathbf{A}=0} && \mathcal{G}_{\sigma}(\bar{\mathbf{k}}, i\omega_n) \rightarrow \mathcal{G} \\ &&& \text{et } A_i(x) \rightarrow A_i \\ &= -\frac{1}{\beta V N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}, n, \sigma} \left(\text{tr} \left[\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta A_b} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta A_a} \right] + \text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\delta^2 \mathcal{G}^{-1}}{\delta A_b \delta A_a} \right] \right) \Big|_{\mathbf{A}=0}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

La relation suivante concernant les dérivées fonctionnelles s'applique : $\delta_{A_i} = -\frac{e}{\hbar} \delta_{\bar{k}_i} T_{3(m \times m)}$. On réitère que l'on suppose que la *self-énergie* de la fonction de Green $\mathcal{G}^{-1} = i\omega_n + \mu - H_{\bar{\mathbf{k}},\sigma}^0 - \Sigma_c(i\omega_n)$ ne dépend pas du potentiel vecteur A_i . Par conséquent, on a : $\delta_{\bar{k}_i} \mathcal{G}^{-1} = -\delta_{\bar{k}_i} H_{\bar{\mathbf{k}},\sigma}^0 = -\lambda_{\bar{\mathbf{k}},\sigma}^i \equiv -\lambda^i$ et $\delta_{\bar{k}_j} \delta_{\bar{k}_i} \mathcal{G}^{-1} = -\delta_{\bar{k}_j} \delta_{\bar{k}_i} H_{\bar{\mathbf{k}},\sigma}^0 = -\lambda_{\bar{\mathbf{k}},\sigma}^{ji} \equiv -\lambda^{ji}$. En utilisant le fait que

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{G} \mathcal{G}^{-1}}{\delta A_i} &= 0 \\ \implies \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta A_i} \mathcal{G}^{-1} + \mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta A_i} &= 0 \\ \implies \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta A_i} &= -\mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta A_i} \mathcal{G}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

9. Voir l'[Appendice H](#) pour une démonstration.

l'éq.(5.17) devient

$$\begin{aligned}
\rho_{ab} &= -\frac{1}{\beta VN} \sum_{\mathbf{k}, n, \sigma} \left(-\text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta \bar{k}_b} \frac{\delta \bar{k}_b}{\delta A_b} \mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta \bar{k}_a} \frac{\delta \bar{k}_a}{\delta A_a} \right] \right. \\
&\quad \left. + \text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\delta^2 \mathcal{G}^{-1}}{\delta \bar{k}_b \delta \bar{k}_a} \frac{\delta \bar{k}_b}{\delta A_b} \frac{\delta \bar{k}_a}{\delta A_a} \right] \right) \Big|_{\mathbf{A}=0} \\
&= -\frac{e^2}{\hbar^2 \beta VN} \sum_{\mathbf{k}, n, \sigma} \left(-\text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta k_b} T_{3(m \times m)} \mathcal{G} \frac{\delta \mathcal{G}^{-1}}{\delta k_a} T_{3(m \times m)} \right] \right. \\
&\quad \left. + \text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\delta^2 \mathcal{G}^{-1}}{\delta k_b \delta k_a} \right] \right) \\
&= \frac{e^2}{\hbar^2 \beta VN} \sum_{\mathbf{k}, n, \sigma} \left(\text{tr} \left[\mathcal{G} \lambda^b T_{3(m \times m)} \mathcal{G} \lambda^a T_{3(m \times m)} \right] + \text{tr} \left[\mathcal{G} \lambda^{ab} \right] \right). \quad (5.19)
\end{aligned}$$

Le premier terme de la formule de la rigidité superfluide éq.(5.19) est le terme paramagnétique alors que le deuxième terme est le terme diamagnétique. Les fonctions λ^i sont les vertex de courant et λ^{ij} correspond à l'inverse du tenseur de masse effective. Il est important de souligner que la rigidité superfluide ρ_{ab} est nulle si la fonction de Green électronique \mathcal{G} ne possède aucune partie anormale, puisque dans ce cas la fonction d'onde du système n'est pas un état cohérent macroscopique. La forme diagrammatique l'éq.(5.19) est illustrée à la figure 5.1.

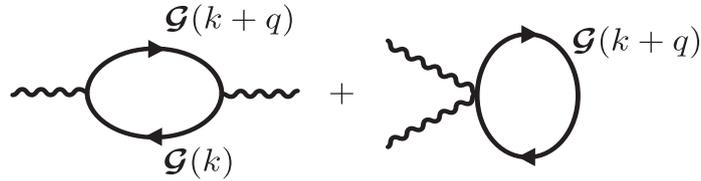


FIGURE 5.1 – Illustration diagrammatique de la rigidité superfluide sans corrections de vertex.

La ligne ondulée de la fig.5.1 représente l'interaction, soit le propagateur d'un boson d'échange (photon) caractérisé par un quadrivecteur $q \equiv (\mathbf{q}, iq_n)$, avec $iq_n = \frac{2n\pi}{\beta}$ les fréquences de Matsubara bosoniques et $n \in \mathbb{N}$. Les lignes munies d'une flèche sont des propagateurs électroniques caractérisés par un quadrivecteur $k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_n)$, $i\omega_n \equiv \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ sont les fréquences de Matsubara fermioniques, et $n \in \mathbb{N}$. Le premier diagramme de la fig.5.1 est une excitation électron-trou. En l'absence de supraconductivité, les termes paramagnétique et diamagnétique s'annulent exactement. Dans un état supraconducteur pur, seules les fonctions de Green anormales $F^{(\dagger)}$ contribuent à ρ_s et elles ont la forme $F_{\uparrow\downarrow}^{(\dagger)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) = \langle \hat{c}_{\mathbf{k}(-\mathbf{k}), \uparrow(\downarrow)}^{(\dagger)} \hat{c}_{-\mathbf{k}(\mathbf{k}), \downarrow(\uparrow)}^{(\dagger)} \rangle_{\mathcal{H}}$, lorsque l'état supraconducteur

Les fonctions de Green anormales $F^{(\dagger)}$ sont les éléments hors-diagonaux de la fonction de Green, i.e., éq.(4.15), et elles décrivent la propagation de paires de Cooper.

est de type singulet. L'Appendice N discute notamment des différentes contributions qui s'ajoutent à ρ_s lorsque le système comprend l'AFM et la SC. Les différentes formules de la rigidité superfluide pour les différents régimes dépendent de la forme du hamiltonien représentant le système. On les détermine dans les sous-sections qui suivent.

FORMULES OBTENUES SANS PÉRIODISATION

L'objectif de cette section est d'arriver à une expression de la rigidité superfluide selon tous les axes principaux de la maille élémentaire lorsque l'on trace la fonction de Green de l'amas. En d'autres mots, on veut calculer la rigidité superfluide sur le réseau où l'invariance par translation est brisée. Plutôt que d'utiliser cette dernière longue paraphrase, l'expression «tracer sur la fonction de Green de l'amas» sera utilisée. En effet, à la fin, l'invariance par translation du super-réseau nous permet d'utiliser seulement la fonction de Green de l'amas. La dérivation est effectuée dans un formalisme approprié aux méthodes sur amas, présentées au chapitre 4. Cette formule que l'on s'appête à démontrer est la plus générale dans le contexte des méthodes sur amas : elle est plus générale que celles utilisées si l'on périodisait \mathcal{G}_c (voir la sous-section 4.2.3). On rappelle que les fonctions de Green issues de la boucle d'autocohérence de la CDMFT ont une représentation matricielle puisqu'elles contiennent les corrélations à courte portée ; autrement dit, elles ont une résolution spatiale. Le hamiltonien champ-moyen comportant les brisures de symétrie potentielles de la fonction Green de l'amas doit pouvoir être représenté dans la base mixte $(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}})$ de l'amas. Ainsi¹⁰, un hamiltonien quadratique champ-moyen général représenté dans la base mixte (équ.(4.20)) avec un couplage singulet des paires de Cooper s'écrit, dans le cas où $N_c = 4$,

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} C_{l,m,n} \sigma_{\alpha\beta}^l \tau_{ab}^m \tilde{\sigma}_{rs}^n \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\beta,b,s} + \left(\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} D_{l',m',n'} \sigma_{\alpha\beta}^{l'} \tau_{ab}^{m'} \tilde{\sigma}_{rs}^{n'} \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\beta,b,s}^\dagger + \text{c.h.} \right), \quad (5.20)$$

où C et D sont des tenseurs représentant l'éventail de paramètres d'ordre possibles, i. e., ceux permis par les symétries du hamiltonien. Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ peut être décomposé en un terme d'énergie cinétique $\hat{\mathcal{H}}_0$ et un terme d'énergie potentielle \hat{V} . Dans l'équ.(5.20), les matrices de Pauli σ , τ et $\tilde{\sigma}$ agissent respectivement sur l'espace du spin, l'espace du sous-réseau antiferromagnétique et tout autre espace associé à tout autre nombre quantique levant la dégénérescence de spin sur chacun des sites du sous-réseau AFM (voir fig.5.3). Ces matrices de Pauli sont au nombre de trois et sont des générateurs du groupe SU(2). Ainsi, les sites d'amas $i \in \{1, \dots, N_c = 4\}$ de la

10. On suit la convention d'Einstein selon laquelle les indices répétés sont sommés.

figure 5.2 peuvent être identifiés sous forme de doublets d'indices (a, r) , où a dénote les sous-réseaux AFM et r la dégénérescence (ou pas) de spin sur les sites des sous-réseaux. Ainsi, on pourrait faire les associations suivantes : $1 \equiv (A, 1)$, $2 \equiv (B, 1)$, $3 \equiv (B, 2)$ et $4 \equiv (A, 2)$. Le tenseur de termes de saut de l'éq.(4.12) devient alors : $t_{ij} \rightarrow t_{ar;bs}$. Puisqu'il y a dégénérescence de spin sur les sites des sous-réseaux AFM $a \in \{A, B\}$, les sites 1 et 4 sont équivalents ainsi que le doublet 2 et 3, et la procédure de périodisation réduisant l'espace de Nambu de moitié se vaut. Les matrices τ_{ab} et $\tilde{\sigma}_{rs}$ de l'éq.(5.20), lorsque combinées, déterminent l'ensemble des sauts électroniques sur le réseau original bidimensionnel.

Le hamiltonien de l'éq.(5.20) est représenté explicitement dans la base mixte suivante :

$$\hat{\Psi}^\dagger = \left(\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow,a,r}^\dagger \quad \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow,a,s}^\dagger \quad \cdots \quad \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow,b,r} \quad \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow,b,s} \right). \quad (5.21)$$

Quelle forme prend le hamiltonien de l'éq.(5.20) si l'on considère un hamiltonien comprenant les termes de sauts électroniques entre les différents sites du réseau, le paramètre d'ordre antiferromagnétique M et le paramètre d'ordre supraconducteur de type d $\Delta_{\mathbf{k}}$? Afin de répondre à cette question, on débute en explicitant le terme associé à l'énergie cinétique $\hat{\mathcal{H}}_0$ du système. Pour ce faire, il faut écrire les trois termes de saut (t, t', t'') dans le formalisme jusqu'ici discuté. La figure 5.3 illustre un amas de la fig.5.2 dans la base mixte $(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{k}})$. On s'appuie ainsi sur la fig.5.3 afin de générer l'ensemble des sauts considérés. On montre comment on peut générer l'ensemble des termes de saut¹¹ considérés à partir des matrices τ et $\tilde{\sigma}$:

La matrice de termes de sauts t_{ij} ($t_{ar;bs}$) comporte les sauts au premier, deuxième et troisième plus proche voisins.

$$\begin{aligned} t_{ar;bs} & \left[\tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 + \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \right] \\ & = \{t_{(A,1);(B,2)}, t_{(A,2);(B,1)}, t_{(A,1);(B,1)}, t_{(A,2);(B,2)}\} \\ & = t \quad (\text{saut premier voisin}) \end{aligned} \quad (5.22a)$$

$$\begin{aligned} t_{ar;bs} & \tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^1 \\ & = \{t_{(A,1);(A,2)}, t_{(B,1);(B,2)}\} \\ & = t' \quad (\text{saut deuxième voisin}) \end{aligned} \quad (5.22b)$$

$$\begin{aligned} t_{ar;bs} & \tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \\ & = \{t_{(A,1);(A,1)}, t_{(A,2);(A,2)}, t_{(B,1);(B,1)}, t_{(B,2);(B,2)}\} \\ & = t'' \quad (\text{saut troisième voisin}). \end{aligned} \quad (5.22c)$$

Le terme cinétique $\hat{\mathcal{H}}_0$ de l'éq.(5.20) est la somme des équations (5.22a), (5.22b) et (5.22c), le tout multiplié par la matrice $\sigma_{\alpha\beta}^3$ puisque l'on travaille dans la base de Nambu augmentée éq.(5.21) :

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} t_{ar;bs} \sigma_{\alpha\beta}^3 \left[\tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^0 + \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 + \tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^1 + \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \right] \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\beta,b,s}. \quad (5.23)$$

11. Le tenseur $t_{ar;bs}$ est hermitique signifiant que $t_{ar;bs} = t_{bs;ar}$.

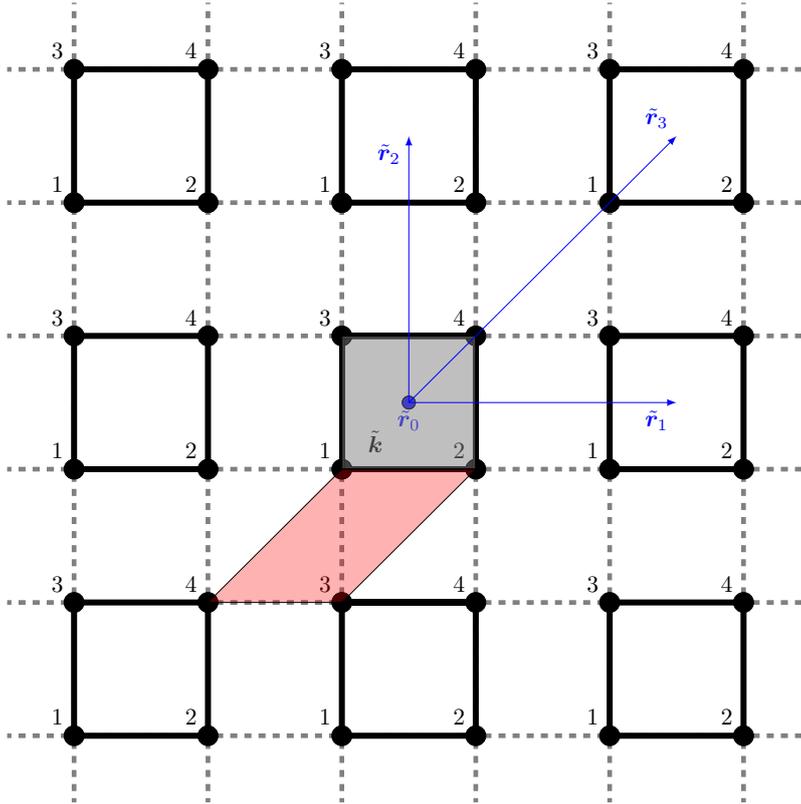


FIGURE 5.2 – Les amas constituant le super-réseau sont équidistants l'un par rapport à l'autre et respectent la géométrie du plan CuO_2 des cuprates, c'est-à-dire que le plan est reconstitué par une succession d'amas carrés 2×2 , car les paramètres du réseau a et b sont égaux — il s'agit d'une très bonne approximation. Les portions du super-réseau constituées de lignes pointillées représentent les segments inter-amas sur lesquels la *self-énergie* n'est pas définie. Les vecteurs du super-réseau \tilde{r}_i sont décrits par les flèches bleues. Les sauts entre les différents amas accumulent une phase (voir l'Appendice F pour de plus amples détails) proportionnelle au pas du réseau. Le parallélogramme rempli de rouge représente une autre forme d'amas avec laquelle l'on aurait pu tapisser le super-réseau si la configuration des paramètres du réseau du matériau étudié le permettait. À la fig.5.3, un amas est présenté ainsi que les paramètres champ-moyens associés aux ordres issus de brisures de symétrie recherchés dans les méthodes théoriques sur amas.

Afin de déterminer la forme du terme potentiel \hat{V} , on doit définir les paramètres d'ordre associés à l'antiferromagnétisme M et à la supra-

conductivité de type d Δ . Ces paramètres d'ordre sont déterminés dans la limite Hartree-Fock :

$$Me^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_{ar}-\mathbf{R}_{bs})+\phi} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \eta} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^3 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger (i\omega_n) \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}} \quad (5.24a)$$

$$\Delta_{ar;bs} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \eta} \sigma_{\alpha\beta}^1 \left[\tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 - \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 \right] \times \left\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger (i\omega_n) \hat{c}_{-\mathbf{k},\beta,b,s}^\dagger \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}}. \quad (5.24b)$$

Dans l'équation (5.24a), ϕ est une phase arbitraire et le vecteur $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ est le vecteur de diffusion antiferromagnétique défini dans la zone de Brillouin réduite $\tilde{\mathbf{k}}$. Le terme associé à l'énergie potentielle \hat{V} du hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ de l'éq.(5.20) s'écrit donc

$$\hat{V} = -Me^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_{ar}-\mathbf{R}_{bs})+\phi} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^3 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} + \left(\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Delta_{ar;bs} \sigma_{\alpha\beta}^1 \left[\tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 - \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 \right] \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\beta,b,s}^\dagger + \text{c.h.} \right). \quad (5.25)$$

Bien entendu, le hamiltonien complet de l'éq.(5.20) est $\hat{H} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}$, où $\hat{\mathcal{H}}_0$ provient de l'éq.(5.23) et \hat{V} provient de l'éq.(5.25) :

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} t_{ar;bs} \sigma_{\alpha\beta}^3 \left[\tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^0 + \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 + \tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^1 + \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \right] \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} - Me^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_{ar}-\mathbf{R}_{bs})+\phi} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^3 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} + \left(\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Delta_{ar;bs} \sigma_{\alpha\beta}^1 \left[\tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 - \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 \right] \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\beta,b,s}^\dagger + \text{c.h.} \right). \quad (5.26)$$

Ainsi, si l'on exprime le hamiltonien de l'éq.(5.26) en fonction des paramètres d'ordre champ-moyens ainsi que des termes de saut dans l'espace de Fourier de la zone de Brillouin réduite $\tilde{\mathbf{k}}$ (cf. fig.5.3), on trouve :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\tilde{\mathbf{k}}} &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \left[\tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 + \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \right] \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} \\ &+ \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^1 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^0 \tilde{\sigma}_{rs}^0 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} \\ &- Me^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_{ar}-\mathbf{R}_{bs})+\phi} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^3 \tilde{\sigma}_{rs}^3 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b,s} \\ &+ \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sigma_{\alpha\beta}^1 \left[\Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^x \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^0 - \Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^y \tau_{ab}^1 \tilde{\sigma}_{rs}^1 \right] \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\beta,b,s}^\dagger + \text{c.h.} \\ &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k},\alpha,a,r}^\dagger \mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\alpha\beta;ab;rs} \hat{\Psi}_{\mathbf{k},\beta,b,s} \end{aligned} \quad (5.27)$$

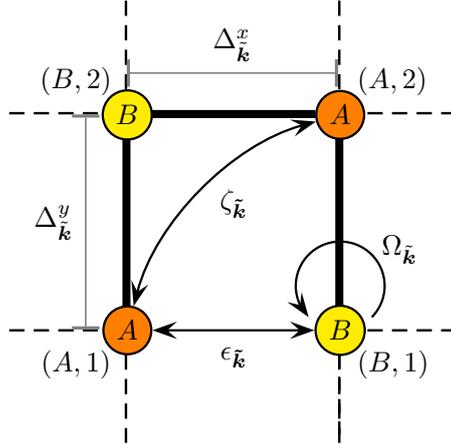


FIGURE 5.3 – Illustration de $\hat{\mathcal{H}}$ dans la base orbitale. Amas 2×2 découpé du plan CuO_2 dans la maille élémentaire des cuprates supraconducteurs. Les sites A et B représentent les sous-réseaux issus des bandes antiferromagnétiques. Les relations de dispersion électroniques premier-voisin $\epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}$, deuxième-voisin $\zeta_{\tilde{\mathbf{k}}}$, troisième-voisin $\Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}$, ainsi que le paramètre d'ordre supraconducteur $\Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^{x,y}$ y sont montrés. Comme mentionné, chacun des sites de l'amas est associé à un doublet d'indice. De plus, $\text{sign}(\Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^y) = -\text{sign}(\Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^x)$.

où $\epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} = -2t(\cos \tilde{k}_y + \cos \tilde{k}_x)$ est la relation de dispersion aux sites premier-voisins du réseau, $\zeta_{\tilde{\mathbf{k}}} = -2t'(\cos(\tilde{k}_x + \tilde{k}_y) + \cos(\tilde{k}_x - \tilde{k}_y))$ est la relation de dispersion aux sites deuxième-voisins, $\Omega_{\tilde{\mathbf{k}}} = -2t''(\cos 2\tilde{k}_x + \cos 2\tilde{k}_y)$ est celle aux sites troisième-voisins, et $\Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^x = \Delta \cos \tilde{k}_x$ et $\Delta_{\tilde{\mathbf{k}}}^y = -\Delta \cos \tilde{k}_y$. Le spineur de Nambu augmenté $\hat{\Psi}^{(\dagger)}$ de l'éq.(5.27) a 8 dimensions et partage la structure de celui de l'éq.(5.21) :

$$\hat{\Psi}_{\tilde{\mathbf{k}},\alpha,r}^{\dagger} = \left(\hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,A,1}^{\dagger} \quad \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,A,2}^{\dagger} \quad \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,B,1}^{\dagger} \quad \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,B,2}^{\dagger} \quad \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,A,1} \quad \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,A,2} \quad \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,B,1} \quad \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,B,2} \right)$$

$$\hat{\Psi}_{\tilde{\mathbf{k}},\beta,b,s} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,A,1} \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,A,2} \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,B,1} \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},\uparrow,B,2} \\ \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,A,1}^{\dagger} \\ \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,A,2}^{\dagger} \\ \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,B,1}^{\dagger} \\ \hat{c}_{-\tilde{\mathbf{k}},\downarrow,B,2}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

La base de l'équation (5.28) découle directement de l'éq.(4.20) lorsque $N_c = 4$.

Dans le but de déterminer la formule pour calculer la rigidité superfluide dans la situation où l'on trace sur la fonction de Green de l'amas \mathcal{G}_c , on suit les étapes de la sous-section 5.4.2 en utilisant le

hamiltonien matriciel $\mathcal{H}_{\vec{k}}^{\alpha\beta;ab;rs}$ de l'éq.(5.27) à la place de $H_{\vec{k},\sigma}^0$. À partir de l'éq.(5.19), une expression compacte de ρ_s à l'intérieur du plan CuO_2 sans correction de vertex aurait la forme suivante :

$$\rho_{\parallel,ab}^{\text{tr}} = \frac{1}{\beta VN} \sum_{\vec{k},n,\sigma} \left(\text{tr} \left[\mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{H}_{\vec{k}}^{\alpha\beta;ab;rs}}{\partial \mathbf{A}_b} \mathcal{G} \frac{\partial \mathcal{H}_{\vec{k}}^{\alpha\beta;ab;rs}}{\partial \mathbf{A}_a} + \mathcal{G} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{\vec{k}}^{\alpha\beta;ab;rs}}{\partial \mathbf{A}_a \partial \mathbf{A}_b} \right] \right) \Big|_{\mathbf{A}=0}. \quad (5.29)$$

La formule (5.29) développée donne

$$\begin{aligned} \rho_{\parallel,ab}^{\text{tr}} = & \frac{e^2}{\hbar^2 \beta VN} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{\delta \epsilon_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \epsilon_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_\epsilon \mathcal{G} T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{\epsilon'} \mathcal{G} T_{\epsilon'}] \right) \right. \\ & + \frac{\delta \epsilon_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \zeta_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_\epsilon \mathcal{G} T_{001}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{\epsilon'} \mathcal{G} T_{301}] \right) \\ & + \frac{\delta \epsilon_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \Omega_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_\epsilon \mathcal{G} T_{000}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{\epsilon'} \mathcal{G} T_{300}] \right) \\ & + \frac{\delta \zeta_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \zeta_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{001} \mathcal{G} T_{001}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{301} \mathcal{G} T_{301}] \right) \\ & + \frac{\delta \zeta_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \epsilon_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{001} \mathcal{G} T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{301} \mathcal{G} T_{\epsilon'}] \right) \\ & + \frac{\delta \zeta_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \Omega_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{001} \mathcal{G} T_{000}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{301} \mathcal{G} T_{300}] \right) \\ & + \frac{\delta \Omega_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \Omega_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{000} \mathcal{G} T_{000}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{300} \mathcal{G} T_{300}] \right) \\ & + \frac{\delta \Omega_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \epsilon_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{000} \mathcal{G} T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{300} \mathcal{G} T_{\epsilon'}] \right) \\ & \left. + \frac{\delta \Omega_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_b} \frac{\delta \zeta_{\vec{k}}}{\delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{000} \mathcal{G} T_{001}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{300} \mathcal{G} T_{301}] \right) \right], \quad (5.30) \end{aligned}$$

où $a, b = \{x, y\}$ dans ce cas particulier. La formule éq.(5.30) est dérivée à la section K.1 de l'Appendice K. Les différentes matrices T sont exprimées dans la base (5.28) et elles sont définies comme suit :

$$T_{lmn} \equiv \sigma_{\alpha\beta}^l \tau_{ab}^m \tilde{\sigma}_{rs}^n.$$

Les combinaisons suivantes sont utilisées à l'éq.(5.30) : $T_\epsilon = T_{011} + T_{010}$ et $T_{\epsilon'} = T_{311} + T_{310}$.

Pour trouver la rigidité superfluide dans la direction z (perpendiculaire aux plans CuO_2), on a besoin des vertex de courant obtenus par une dérivée de la relation de dispersion par rapport à k_z . Tel que mentionné dans la sous-section 1.4.2, selon le cuprate considéré, cette dépendance en k_z peut être très différente. Tous ces cas seront considérés dans des travaux à venir. Dans ce mémoire, on remplace plutôt les vertex de courant premiers-voisins de l'équation (5.36) par le vertex de courant dans la direction z , soit $v_z = -t_{bi} \sin k_z (\cos k_x - \cos k_y)^2$,

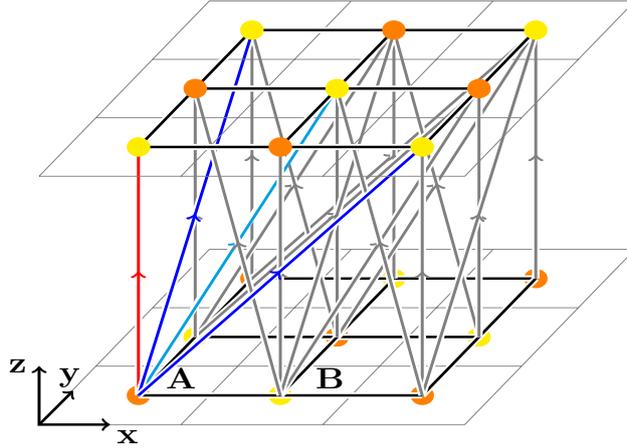


FIGURE 5.4 – Exemple d’empilement des plans CuO_2 dans les cuprates selon l’axe z . Les différents sous-réseaux AFM A et B sont représentés en orange et jaune, respectivement (cf. fig.5.3). La flèche rouge illustre un saut premier-voisin entre deux plans superposés. La flèche cyan montre un saut deuxième-voisin entre deux plans. Les flèches bleues montrent des sauts troisièmes-voisins entre deux plans CuO_2 . Pour ne pas surcharger la figure, seule la moitié des termes de saut deuxièmes-voisins et troisièmes-voisins est illustrée et une certaine portion des termes de saut a été grisée. Tous les termes de saut constituant t_{\perp} passent d’un sous-réseau AFM à l’autre en sautant d’un plan à l’autre.

parce que ce ne sont que ces termes qui lient deux sous-réseaux AFM distincts¹². Cela permet de mettre en évidence l’effet du facteur $(\cos k_x - \cos k_y)^2$ qui pondère surtout la région où se trouve le pseudo-gap dans le cas dopé en trous. Ce facteur devrait avoir moins d’influence du côté dopé en électrons. Ensuite, il est important de noter dans la dernière équation que la seule quantité dépendant de z est contenue dans le vertex de courant v_z . En effet, on ne conserve que les termes dominants en t_{bi} et on néglige cette composante en z dans les fonctions de Green¹³. Ainsi, uniquement le terme de la formule (5.30) comportant deux vertex de courant premiers-voisins contribue à¹⁴ ρ_{\perp} . Le terme de saut t_{\perp} a une périodicité de $\frac{2\pi n}{a}$ dans la direction x et de $\frac{2\pi m}{b}$ dans la direction y , avec $n, m \in \mathbb{N}$. L’intégrale sur k_z peut donc être faite, et elle contribue en un facteur $\frac{1}{2}$. On trouve alors

12. Voir la figure 5.4.

13. Les sauts premiers-voisins dans la direction perpendiculaire aux plans CuO_2 ne sont pas compris dans la procédure d’autocohérence de la CDMFT. Les effets de la troisième dimension sont négligeables [79].

14. L’ordre AFM selon l’axe z requiert que l’on ne considère que le terme ayant deux vertex de courant premiers-voisins. Si l’on conservait tous les termes de l’éq.(5.30) et que l’on remplaçait tous les vertex de courant par v_z , on considérerait à la fois un ordre antiferromagnétique et ferromagnétique selon z .

$\rho_s \perp$ au plan en traçant sur l'amas (SC+AFM)

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{tr}} = \frac{4e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \bar{t}_{\perp}^2(\tilde{\mathbf{k}}) (\text{tr} [\mathcal{G} T_c \mathcal{G} T_c] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{c'} \mathcal{G} T_{c'}]),$$

(5.31)

où $\bar{t}_{\perp}^2(k_x, k_y) = \frac{1}{2} t_{bi}^2 (\cos k_x - \cos k_y)^2$. En revanche, si l'on considérait simultanément un ordre antiferromagnétique et ferromagnétique, $\rho_{\perp,zz}^{\text{tr}}$ s'écrirait

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{tr}} = \frac{4e^2}{2\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \bar{t}_{\perp}^2(\tilde{\mathbf{k}}) \sum_{cd} \sum_{c'd'} F_{cd}^+(\tilde{\mathbf{k}}) F_{c'd'}(\tilde{\mathbf{k}}),$$

(5.32)

où les fonctions de Green anormales 4×4 sont notées¹⁵ $F^{(+)}(\tilde{\mathbf{k}}) = \mathcal{G}_{1:4(5:8),5:8(1:4)}^c(\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$. Les formules éqs.(5.30), (5.31) et (5.32) décrivant $\rho_{\perp,zz}^{\text{tr}}$ permettent de s'affranchir des procédures de périodisation de la fonction de Green \mathcal{G}_c qui éliminent les éléments hors-diagonaux de \mathcal{G}_c .

En vertu de l'éq.(5.5), puisqu'on calcule la rigidité superfluide $\rho_{\perp,zz}^{\text{tr}}$ selon l'axe c , on peut calculer $\lambda_{zz} \equiv \lambda_c$ à partir de l'éq.(5.31). À l'instar de l'axe c , on peut calculer λ_{ab} dans le plan CuO_2 , avec $a, b \in \{x, y\}$, à partir de l'éq.(5.30). Le développement diagrammatique de la formule éq.(5.31) est similaire à la fig.5.1, à la différence près que les vertex de courant sont les vitesses¹⁶ \bar{t}_{\perp} restreignant les porteurs de charge des plans CuO_2 à sauter d'un plan adjacent à l'autre¹⁷

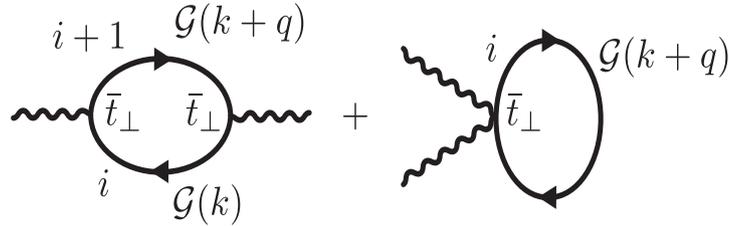


FIGURE 5.5 – Illustration diagrammatique de la rigidité superfluide sans corrections de vertex avec l'approximation des vertex de courant.

Le terme paramagnétique de la fig.5.5 décrit le passage d'un porteur de charge interagissant d'un plan CuO_2 i à celui adjacent $i+1$ d'une maille élémentaire à l'autre. Ce serait plus compliqué autrement. Le terme diamagnétique est quant à lui développé au premier ordre afin de rendre compacte les formules (éqs.(5.30) et (5.31)) décrivant ρ^{tr} .

15. Les indices associés à \mathcal{G} délimitent la portion de \mathcal{G} définissant F ; F occupe les lignes 1 à 4 (1 : 4) et les colonnes (5 : 8) de \mathcal{G} . F occupe également la portion de \mathcal{G} allant des lignes 5 à 8 et des colonnes 1 à 4.

16. Consulter l'éq.(1.2).

17. Il faut également que les porteurs de charge changent de sous-réseau AFM en sautant d'un plan adjacent à l'autre (voir la fig.5.4).

FORMULES AVEC PÉRIODISATION (AFM+SC)

Dans la situation où seuls l'AFM et la d SC existent et que l'on périodise la fonction de Green \mathcal{G}_c ou le cumulante, on se trouve à tronquer l'espace de Nambu augmenté de l'éq.(5.28) de moitié. En effet, en périodisant, on élimine les degrés de liberté associés aux matrices $\tilde{\sigma}$ de l'éq.(5.27). En effet, si l'on périodise la fonction de Green du réseau ou le cumulante éq.(4.15) afin de la projeter sur la zone de Brillouin réduite antiferromagnétique (fig.4.1), cela revient à laisser tomber toute différentiation entre sites d'un même sous-réseau (A ou B) produite par les matrices $\tilde{\sigma}$ (cf. éq.(5.27)), de telle sorte que le hamiltonien éq.(5.20) prend alors la forme suivante dans l'espace (\mathbf{R}, \mathbf{k}) , avec $\{a, b\} = \{A, B\}$ ¹⁸ et $\{\alpha, \beta\} = \{\uparrow, \downarrow\}$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^1 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b} + \sum_{\mathbf{k}} (\zeta_{\mathbf{k}} + \Omega_{\mathbf{k}}) \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^0 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b} \\ & + M \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b) + \phi} \sigma_{\alpha\beta}^3 \tau_{ab}^3 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\beta,b} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{ab} \sigma_{\alpha\beta}^1 \tau_{ab}^1 \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha,a}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\beta,b}^\dagger + \text{c.h.}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

où $\epsilon_{\mathbf{k}}$, $\zeta_{\mathbf{k}}$ et $\Omega_{\mathbf{k}}$ sont les relations de dispersion (cf. éq.(5.27)) représentées dans la rBZ, $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ est le vecteur d'onde antiferromagnétique, et $\Delta_{ab} = \Delta$ si $\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b = \pm e_x$ et $\Delta_{ab} = -\Delta$ si $\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b = \pm e_y$, correspondant à l'appariement singulet $d_{x^2-y^2}$. On note que la base mixte est dorénavant (\mathbf{R}, \mathbf{k}) , où \mathbf{k} est élément de la zone de Brillouin rBZ (fig.4.1), puisque l'on a périodisé afin de tout décrire dans la rBZ. Si l'on complète la transformée de Fourier de l'éq.(5.33) dans la zone de Brillouin originale BZ en exprimant ces paramètres d'ordre en fonction de \mathbf{k} , on obtient¹⁹

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}} = & \sum_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + M \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow} - \hat{c}_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow} \right) + \text{c.h.} \right] \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right), \end{aligned} \quad (5.34)$$

où

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}} = & -2t(\cos k_y + \cos k_x) - 2t'(\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)) \\ & - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) \end{aligned} \quad (5.35)$$

est la relation de dispersion comprenant les sauts premiers-voisins, deuxièmes-voisins et troisièmes-voisins. La fonction de gap est $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(\cos k_x - \cos k_y)$. Le hamiltonien éq.(5.35) n'est plus exprimé sous forme matricielle, contrairement au hamiltonien éq.(5.33).

On rappelle ici que $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = 2\pi n$, avec $n \in \mathbb{Z}$.

La zone de Brillouin originale \mathbf{k} est deux fois plus grande que celle antiferromagnétique rBZ, en vertu du vecteur d'onde de diffusion $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

¹⁸. Se référer à la fig.5.3.

¹⁹. On ne fait pas la distinction entre les vecteurs de la zone rBZ ou BZ dans la notation. Le cas échéant sera mentionné ou laissé implicite selon la situation.

Afin de déterminer les formules pour calculer la rigidité superfluide selon tous les axes principaux de la maille élémentaire dans le cas où il y a coexistence AFM+dSC et que l'on périodise \mathcal{G}_c , il suffit de reprendre, à l'instar de la [section 5.5](#), les démarches de la [sous-section 5.4.2](#). Les étapes de calcul explicites sont montrées à la [section K.2](#) de l'[Appendice K](#). Après périodisation dans la rBZ, la fonction de Green habillée obtenue de la CDMFT réduit sa dimension, passant d'une matrice 8×8 à 4×4 . La périodisation dans la zone de Brillouin rBZ (cf. [éq.\(5.33\)](#)) écarte la dimension associée à $\tilde{\sigma}$ de l'[éq.\(5.27\)](#). La formule permettant de calculer la rigidité superfluide dans le plan cuivre-oxygène des cuprates est

$$\begin{aligned} \rho_{\parallel,ab}^{\text{per.}} = & \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{00}\mathcal{G}T_{00}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{30}\mathcal{G}T_{30}] \right) \right. \\ & + \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{00}\mathcal{G}T_{01}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{30}\mathcal{G}T_{31}] \right) \\ & + \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{01}\mathcal{G}T_{00}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{31}\mathcal{G}T_{30}] \right) \\ & \left. + \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{01}\mathcal{G}T_{01}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{31}\mathcal{G}T_{31}] \right) \right], \quad (5.36) \end{aligned}$$

auquel cas $a, b = \{x, y\}$. La fonction $\epsilon_{\mathbf{k}}$ est la relation de dispersion premier-voisin, alors que la fonction $\bar{\zeta}_{\mathbf{k}}$ est comprend les relations de dispersion deuxième-voisin et troisième-voisin. Puisque les paramètres de réseau a et b sont équivalents, les deuxième et troisième termes de l'[éq.\(5.36\)](#) sont équivalents. La formule de ρ_{\perp} est

$\rho_s \perp$ au plan avec périodisation (SC+AFM)

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{per.}} = \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{t}_{\perp}^2(\mathbf{k}) \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{01}\mathcal{G}T_{01}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{31}\mathcal{G}T_{31}] \right),$$

(5.37)

où, encore une fois, $\bar{t}_{\perp}^2(k_x, k_y) = \frac{1}{2} t_{bi}^2 (\cos k_x - \cos k_y)^2$. On rappelle que V est le volume de la maille élémentaire AFM et que N est le nombre de mailles élémentaires en question. Les traces $\text{tr}[\dots]$ sont effectuées sur l'espace de Nambu suivant :

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\mathbf{k},\alpha,a}^{\dagger} &= \left(\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow,A}^{\dagger} \quad \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow,B}^{\dagger} \quad \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow,A} \quad \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow,B} \right) \\ \hat{\Psi}_{\mathbf{k},\beta,b} &= \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow,A} \\ \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow,B} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow,A}^{\dagger} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow,B}^{\dagger} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

À l'[Appendice N](#), la signification de chacun des termes de l'[éq.\(5.36\)](#) est expliquée. Il est possible de calculer la longueur d'onde de pé-

nétration λ à partir de l'éq.(5.36) (ou (5.37)). Pour ce faire, on utilise l'éq.(5.5) en substituant ρ_{ab} par $\rho_{\parallel,ab}^{\text{per.}}$ (ou $\rho_{\perp,zz}^{\text{per.}}$).

FORMULES AVEC ÉTAT PUR SUPRACONDUCTEUR (SC)

Lorsqu'on intègre sur la BZ, les expressions de la rigidité superfluide pour tous les axes principaux de la maille élémentaire en présence de coexistence AFM + d SC (éq.(5.36) et éq.(5.37)) surestiment les résultats de la rigidité superfluide ρ^{SC} lorsqu'il y a uniquement supraconductivité, autrement dit lorsque $M = 0$ dans l'éq.(5.33). On discute ce point à l'Appendice N en y détaillant la procédure employée afin d'éliminer le surdénombrement des contributions. On s'abstient de dériver ρ^{SC} , puisque les résultats se retrouvent déjà dans la littérature [18, 24]. On ne fait qu'énoncer et discuter des résultats. La rigidité superfluide dans le plan CuO_2 est

$$\rho_{\parallel,ab}^{\text{SC}} = \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\delta \gamma_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \gamma_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}\mathcal{G}] - \text{tr} [\sigma_3 \mathcal{G} \sigma_3 \mathcal{G}] \right), \quad (5.39)$$

où $a, b = \{x, y\}$ dans ce cas-ci et $\gamma_{\mathbf{k}}$ est la relation de dispersion complète (éq.(5.35)). Le terme σ_3 est la matrice de Pauli diagonale représentée dans l'espace de Nambu. La rigidité superfluide sans correction de vertex selon l'axe cristallin c décrivant un système supraconducteur s'écrit

$\rho_s \perp$ au plan avec périodisation (SC)

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{SC}} = \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{t}_{\perp}^2(\mathbf{k}) \left(\text{tr} [\mathcal{G}\mathcal{G}] - \text{tr} [\sigma_3 \mathcal{G} \sigma_3 \mathcal{G}] \right).$$

(5.40)

Lorsqu'on périodise, $\text{tr} [\dots]$ agit sur l'espace de Nambu supposant l'appariement singulet des paires de Cooper $\hat{\Psi}_{\mathbf{k}} = \left(\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right)^{\text{T}}$. De manière similaire au cas en régime de coexistence, en régime pur on peut s'affranchir de tout schéma de périodisation de la fonction de Green en effectuant la trace sur cette dernière. Dans cette situation, la formule alternative a plutôt l'allure suivante :

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{tr.,SC}} = \frac{4e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \bar{t}_{\perp}^2(\tilde{\mathbf{k}}) \text{tr} \left[F^{\dagger}(\tilde{k}) F(\tilde{k}) \right]. \quad (5.41)$$

La formule de la rigidité superfluide parallèle au plan traçant sur l'amas $\rho_{\parallel,ab}^{\text{tr.,SC}}$ est équivalente à l'éq.(5.41), si l'on remplace le préfacteur $\bar{t}_{\perp}(\tilde{\mathbf{k}})$ par les dérivées partielles de la relation de dispersion apparaissant dans l'éq.(5.39). En traçant, le spineur de nambu a plutôt la forme décrite à l'éq.(5.28) et la fonction de Green anormale 4×4 est notée $F^{(\dagger)}$.

Pour calculer $\rho_{\perp,zz}^{SC}$ (ou $\rho_{\parallel,ab}^{SC}$), à l'instar de $\rho_{\perp,zz}^{per.}$ (ou $\rho_{\parallel,ab}^{per.}$), on périodise la fonction de Green de l'amas \mathcal{G}_c ou le cumulante (cf. fig.4.1) et on porte la fonction de Green périodisée dans l'éq.(5.40) (eq.(5.39)). Si l'on substitue la fonction de Green \mathcal{G} de l'éq.(5.40) par celle champ-moyen

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \begin{bmatrix} \mathcal{G}_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, i\omega_n) & F_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, i\omega_n) \\ F_{\downarrow\uparrow}^*(\mathbf{k}, i\omega_n) & -\mathcal{G}_{\downarrow\downarrow}^*(\mathbf{k}, i\omega_n) \end{bmatrix} \\ &= \frac{i\omega_n \mathbb{1} + \gamma_{\mathbf{k}} \sigma_3 + \Delta_{\mathbf{k}}' \sigma_1 + \Delta_{\mathbf{k}}'' \sigma_2}{(i\omega_n)^2 - E_{\mathbf{k}}^2}, \end{aligned} \quad (5.42)$$

où $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}' + i\Delta_{\mathbf{k}}''$ est le gap supraconducteur, $\gamma_{\mathbf{k}}$ est la relation de dispersion électronique et $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ est le spectre des quasiparticules de Bogoliubov, on trouve

$$\rho^{SC} = \frac{4e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{t}_{\perp}(\mathbf{k})^2 \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{[(\omega_n)^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2]^2}. \quad (5.43)$$

Pour aboutir à l'éq.(5.42), on a simplement développé les équations du mouvement en partant de la définition de la fonction de Green et du hamiltonien BCS symétrique particule-trou :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k},\sigma}^{BCS} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} & \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\gamma_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} + \epsilon_{-\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Diagonaliser le hamiltonien eq.(5.44) permet de retrouver le spectre des bogoliubons. De l'expression eq.(5.43), il est clair que si le gap supraconducteur est nul, soit $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$, la rigidité superfluide est nulle. La rigidité superfluide est une quantité qui converge rapidement en fonction des fréquences de Matsubara ($\rho_s \propto \frac{1}{(i\omega_n)^4}$) contrairement à, par exemple, la densité de particules où $n \propto \frac{1}{(i\omega_n)^2}$. On peut donc sommer sur un ensemble de fréquences de Matsubara moins grand pour calculer ρ_s en étant tout aussi précis que pour le calcul de la densité de particules²⁰.

La rigidité superfluide comporte surtout la physique près du niveau de Fermi ($\omega = 0$), car les contributions à ρ_s diminuent très rapidement ($\propto \frac{1}{(i\omega_n)^4}$) en augmentant en fréquence de Matsubara.

20. Voir la [section M.2](#).

RÉSULTATS

Dans ce chapitre, les résultats de calculs de la rigidité superfluide à température nulle et à température finie sont présentés et commentés. On réitère que les résultats à température nulle ($T = 0$) ont été obtenus en utilisant le solveur d'impureté ED, alors que ceux à température finie ont été obtenus en utilisant le solveur d'impureté CT-HYB. Les solutions physiques montrant une coexistence de phase entre l'AFM et la d SC ont été obtenues en ED-CDMFT seulement et elles ont été calculées par FOLEY et al. [23]. L'effet des sauts interplans sur la relation d'autocohérence CDMFT a été négligé, ce qui est cohérent avec le fait que le terme de saut interplan n'est pas inclus dans les fonctions de Green. Cette coexistence apparaît dans le régime mixte d SC+AFM, c'est-à-dire lorsqu'on relaxe les symétries de l'amas permettant ladite coexistence.

Les résultats à $T = 0$ suggèrent que la coexistence de phase réduit significativement ρ_s dans le régime sous-dopé en électrons des cuprates et cette réduction amplifierait les fluctuations de la phase du paramètre d'ordre supraconducteur [21]. Elle serait par conséquent, en vertu de la relation de proportionnalité de Uemura (cf. sous-section 1.3.2), à l'origine la diminution de la température critique T_c . Plusieurs tentatives ont été réalisées afin de faire converger une solution comportant de l'AFM et de la d SC à partir de CT-HYB pour avoir des résultats à température finie, mais aucune n'a été concluante. Jusqu'à présent, aucune phase mixte comportant l'AFM et la d SC n'a été trouvée avec les solveurs d'impureté de type CTQMC [23] et cela représente un grand défi. Cependant, l'effet de la frustration de spin¹ à température finie sur la rigidité superfluide, la température critique supraconductrice ainsi que le paramètre d'ordre supraconducteur a été étudié et est discuté à la section 6.2.

Il est à noter que tous les résultats sur la rigidité superfluide montrés ont été obtenus ayant choisi les constantes des paramètres du réseau (a, b, c), la charge électrique e , la constante de Planck \hbar , la constante de Boltzmann k_B et le terme de saut premier-voisin t égales à 1. Pour pouvoir comparer des quantités physiques avec l'expérience, i. e., la longueur de pénétration λ , il faut effectuer une analyse dimensionnelle afin d'exprimer ces dernières dans le système d'unités SI. Dans certains graphiques à $T = 0$, à quelques valeurs de ρ_s sont associées des valeurs de λ afin de comparer à l'expérience (cf. eq.(5.5)). On note *pér.* G le schéma de périodisation de la fonction de Green, *pér.* M pour désigner

Typiquement, chacune des figures présentées a nécessité des dizaines d'heures de temps de calculs. Tous les programmes utilisés sont optimisés, car tous les gains en performance, aussi minimes soient-ils, peuvent réduire le temps de calcul de quelques heures.

¹. La frustration de spin apparaît sur l'amas 2×2 lorsque le terme de saut au deuxième voisin est inclus dans les calculs, soit lorsque $t' \neq 0$.

le schéma de périodisation du cumulant et *tr.* le schéma où l'on trace sur la fonction de Green.

RÉSULTATS À TEMPÉRATURE NULLE

Dans la présente section, les résultats de ρ_s issus des calculs utilisant l'ED sont montrés. La rigidité superfluide selon tous les axes de la maille élémentaire des cuprates a été évaluée. Dans le cadre de la théorie des liaisons fortes, deux ensembles de termes de saut reproduisant la structure de bande électronique associée à différents composés sont considérés. Ils sont tabulés à la [sous-section 1.4.1](#) (tab.1.1). Dans l'article de FOLEY et al. [23], aucune coexistence AFM+*d*SC n'a été trouvée pour l'ensemble de paramètres YBCO du côté dopé aux trous. Pour ce composé, la coexistence n'apparaît que du côté dopé en électrons. En revanche, de la coexistence a été trouvée sur un petit domaine de dopage en trous pour l'ensemble de paramètres associé aux composés LSCO, en plus d'avoir été trouvée du côté dopé en électrons. On suppose une maille élémentaire (fig.1.2) comportant deux plans CuO_2 , bien que cela ne change pas la relation entre T_c et ρ_s [77] — elle est universelle. Les paramètres du modèle de Hubbard (1.1) sont normalisés à l'énergie du terme de saut premier-voisin $t \sim 250\text{meV}$. On rappelle que la valeur du terme de saut interplan à l'éq.(1.2) qui a été choisie est $t_{bi} = 10\text{meV}$ [45, 53]. Le couplage entre les plans CuO_2 change selon les différents composés, que ce soit des cuprates de la famille YBCO ou LSCO [44].

On montre dans le corps de ce mémoire, dans l'ordre, les résultats² sur ρ_{zz} ainsi que ρ_{\parallel} pour le schéma *pér. G* (eq.(4.26)). Les données des autres schémas, soient *pér. M* et *tr.*, sont présentées et analysées à la [section L.1](#) de l'[Appendice L](#). Qualitativement, les schémas *pér. M* et *tr.* changent similairement l'effet de la coexistence sur ρ_s . Ces deux schémas semblent moins efficaces lorsque la frustration de spin sur la plaquette 2×2 est élevée. En ce qui concerne le calcul de ρ_s selon l'axe *c* dans le régime pur *d*SC, on utilise la formule (5.40), alors que dans le régime mixte, c'est plutôt l'éq.(5.37) qui est sollicitée. Dans le régime pur *d*SC, ρ_{\parallel} est évaluée en ayant recours à l'éq.(5.39), alors que l'éq.(5.36) prend la relève lorsqu'il y a compétition de phase. Les formules eq.(5.37) et eq.(5.36) sont uniquement utilisées en régime mixte, dans l'état *d*SC+AFM. Lorsqu'on utilise la formule (5.37) avec des solutions de l'état pur *d*SC en sommant sur les vecteurs d'onde dans la zone de Brillouin originale, on retrouve les mêmes résultats pour ρ_{zz} à un facteur 2 près par rapport au cas où l'on aurait utilisé l'éq.(5.40). En effet, dans un système AFM, contrairement à un système pur *d*SC, il faut diviser par 2 le résultat de la somme effectuée dans la zone de Brillouin originale (BZ) pour ne pas surdénumérer les états

Le programme utilisé pour calculer ρ_s est écrit en Julia et est disponible sur GitHub à l'adresse suivante : <https://github.com/oliviersimard>.

2. La rigidité superfluide selon l'axe *c* est notée ρ_{zz} (ou ρ_{\perp}) et celle intra-plan ρ_{\parallel} .

quantiques³. On montre à l'Appendice N des résultats sur ρ_s dans l'état pur d SC calculés avec les formules en régime coexistence (5.36) et (5.37) en sommant sur la BZ. La grille de fréquences de Matsubara $i\omega_n$ utilisée a 500 éléments, c'est-à-dire que $n = \{0, \dots, 499\}$. Pour sommer sur les fréquences de Matsubara, une température fictive de $\beta = 500/t$ a été utilisée afin de contourner les difficultés associées à l'intégration sur l'axe imaginaire. On montre à l'Appendice M que la rigidité superfluide converge rapidement en fonction de β et en fonction de la taille de la grille de fréquences $i\omega_n$.

Dans le but de comprendre autant que possible toutes les composantes affectant ρ_{zz} , l'effet du terme de saut t_\perp (éq.(1.2)) été évalué en retirant le coefficient $(\cos k_x - \cos k_y)^4$ de l'éq.(1.2) pour tous les ensembles de paramètres de liaison forte et tous les schémas de périodisation, dans le régime de coexistence ainsi que dans le régime pur. Une sélection de figures montrant cet effet est présentée dans le corps de ce mémoire et à la section L.1 de l'Appendice L.

Il fut mentionné à la section 5.1 que la bidimensionnalité du système empêche la brisure de symétrie $U(1)$ associée à l'apparition de la supraconductivité, en vertu du théorème de Mermin-Wagner. Ce dernier aspect, conjugué à la taille limitée de l'amas, signifie que l'amplitude du paramètre d'ordre d SC $\langle D \rangle$ correspond à la formation de paires de Cooper locales. Ainsi, les dômes supraconducteurs $\langle D \rangle$ ne délimitent *aucunement* la région du diagramme de phase garantissant la cohérence de l'état supraconducteur, puisque des paires locales peuvent se former et fluctuer sans être cohérentes. Autrement dit, la température critique supraconductrice évaluée en CDMFT est la température champ-moyen. Il en va de même pour la brisure de symétrie $SO(3)$ associée à l'AFM : le paramètre d'ordre AFM $\langle M \rangle$ fait état des fluctuations AFM, lorsqu'elles apparaissent, et n'assure pas la cohérence de cet état.

La différence entre les régimes pur et mixte est dans la paramétrisation des bains et dans les symétries du système [23]. Dans l'état pur, les symétries imposées sur les bains et la plaquette évacuent la possibilité que l'ordre AFM puisse s'installer. Toutefois, en relaxant les symétries imposées au système amas-bain, la quantité de degrés de liberté augmente et la compétition entre l'AFM et la supraconductivité d SC est admise, car on laisse la possibilité à l'AFM d'émerger. Le régime de coexistence peut seulement apparaître dans le régime mixte de la paramétrisation des bains. En effet, un système pur d SC a une symétrie C_{2v} sur la plaquette, alors que le régime mixte a plutôt une symétrie réduite à C_2 . Puisque les symétries diffèrent, les représentations irréductibles des fonctions de Green diffèrent. De plus, par état de coexistence, on entend le fait que l'état comprend l'existence simultanée de plus d'un paramètre d'ordre : dans ce cas-ci l'AFM et la d SC.

La zone de Brillouin réduite AFM est 2 fois plus petite que celle originale.

En retirant le facteur $(\cos k_x - \cos k_y)^2$ de t_\perp , on ôte la pondération du pseudo-gap. On conserve toujours le terme en $\cos k_z$ afin de lier les plans l'un à l'autre selon l'axe z .

On peut confondre les mots régime et état lorsqu'on parle du régime de coexistence.

3. Voir en particulier les figs.N.3, N.4 et N.5.

Présentation des figures

Dans les figures qui suivent, tous les dopages pour lesquels apparaissent à la fois des données associées à $\langle M \rangle$ et à $\langle D \rangle$ constituent des dopages dont les calculs ont été effectués dans le régime mixte, c'est-à-dire en permettant en principe aux deux symétries d'être brisées. La rigidité superfluide calculée dans le régime mixte et celle calculée dans le régime pur sont indiquées respectivement par des points verts et noirs. Lorsque des points noirs et verts se superposent, cela signifie que seule la dSC est stable pour ces dopages dans le régime mixte. Si toutefois ρ_s est nulle en régime mixte, cela signifie que l'AFM a dominé sur la dSC — cela se produit principalement dans le régime sous-dopé en électrons. Lorsque l'interaction de Coulomb locale U dépasse une certaine valeur critique U_c , la transition de Mott apparaît à demi-remplissage ($n = 1$) et la supraconductivité γ disparaît (figs. 6.1, 6.2, 6.3, 6.7, 6.8 et 6.9), puisque c'est alors un isolant de charge. Le côté où $n < 1$ correspond au côté dopé en trous alors que le côté $n > 1$ correspond au côté dopé en électrons. Une asymétrie entre ces deux côtés se révèle à travers $\langle D \rangle$ et ρ_s , notamment. Cette asymétrie est principalement due à la structure de bande électronique, car le modèle de Hubbard est symétrique particule-trou lorsque $t'' = t' = 0$. Les sous-figures placées dans les figures principales tracent le comportement de l'amplitude des paramètres d'ordre supraconducteur $\langle D \rangle$ et antiferromagnétique $\langle M \rangle$ en fonction de la densité de particules n .

Seuls les résultats de ρ_s obtenus avec la périodisation de la fonction de Green *pér. G* sont montrés dans le corps principal de cet ouvrage. La raison justifiant ce choix est que l'on estime que le schéma *pér. G* élimine plus efficacement l'effet de la brisure de symétrie sous translation issue de la dimension finie de l'impureté. La sous-section 6.1.4 élabore sur cet avis en analysant les différents schémas de périodisation.

À la sous-section 4.2.3, il fut mentionné qu'il existe deux sous-ensembles équivalents de vecteurs du super-réseau réciproque \mathbf{K} , soit $\mathbf{K}_y = \{(0, 0), (0, \pi)\}$ et $\mathbf{K}_x = \{(0, 0), (\pi, 0)\}$, pour périodiser \mathcal{G}_c dans la zone de Brillouin réduite AFM (rBZ) (cf. fig. 4.1). À moins d'avis contraire, dans le régime de coexistence, toutes les fonctions de Green dans les schémas *pér. G* ainsi que *pér. M* ont été périodisées en utilisant l'ensemble associé à \mathbf{K}_y . Dans les schémas *pér. G* et *pér. M*, intervertir \mathbf{K}_x et \mathbf{K}_y ne change rien au calcul de ρ_{zz} , puisque la fonction de Green de l'amas est définie modulo \mathbf{K} . De plus, on ne devrait pas s'attendre à ce que $\rho_{xx} \neq \rho_{yy}$.

Rigidité superfluide interplan

Nonobstant le fait que le couplage interplan dans les cuprates soit faible, les porteurs de charge peuvent se propager d'un plan à l'autre, produisant un courant selon l'axe c . On peut alors calculer ρ_{zz} en vertu

de l'éq.(5.7). Les figures 6.1, 6.2, 6.3 et 6.4 comparent ρ_{zz} dans l'état pur dSC et dans l'état $dSC+AFM$ en fonction de la densité de particules n . Certaines longueurs de pénétration selon l'axe c , λ_c , obtenues à partir de l'éq.(5.5) sont montrées : ces dernières sont cohérentes avec la littérature [53, 83].

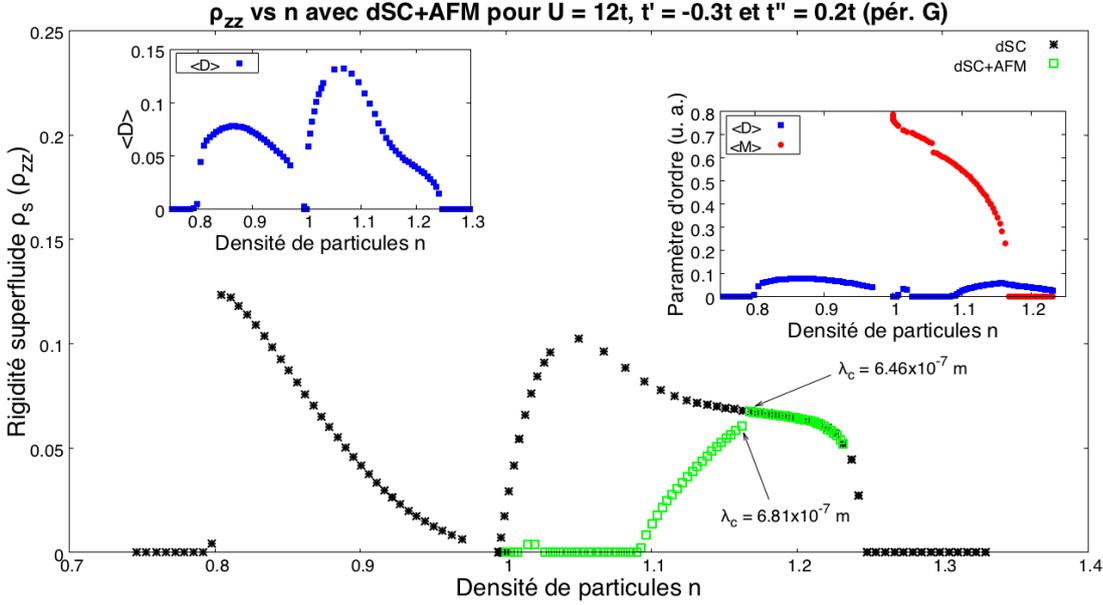


FIGURE 6.1 – Rigidity superfluide selon l'axe c (ρ_{zz}) en fonction de la densité de particules n en régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La sous-figure de gauche illustre l'amplitude du paramètre d'ordre dSC $\langle D \rangle$ en fonction de la densité de particules dans l'état pur. La sous-figure de droite illustre l'amplitude des paramètres d'ordre dSC $\langle D \rangle$ et AFM $\langle M \rangle$ dans le régime mixte. Dans la sous-figure de droite, les deux points bleus près de $n = 1$ où $\langle D \rangle \neq 0$ ne peuvent être considérées comme des solutions physiques étant donné qu'il s'agit de seulement 2 points. Le régime mixte est stable seulement du côté $n > 1$. Les carrés creux verts de la figure principale montrent ρ_{zz} calculée en régime mixte $dSC+AFM$ alors que les points noirs montrent ρ_{zz} calculée dans l'état pur dSC . Tous ces résultats ont été obtenus en périodisant la fonction de Green de l'amas issue de la CDMFT, comme indiqué par l'inscription *pér. G* dans le titre.

Les figures 6.1 et 6.2 montrent des résultats de coexistence obtenus avec les paramètres de bandes YBCO à $U = 12t > U_c$ et $U = 8t > U_c$, respectivement. Les figures 6.3 et 6.4 montrent des résultats de coexistence pour les paramètres de liaison forte des composés LSCO à $U = 6.55t > U_c$ et $U = 5t < U_c$, respectivement. Pour les paramètres *tight-binding* YBCO, au-delà du U_c , il est de constat que l'amplitude de $\langle D \rangle$ est plus grande du côté dopé en électrons, alors que ρ_{zz} est légèrement plus élevée du côté dopé en trous. Lorsque $n < 1$, comme le montrent les figures 6.1 et 6.2, $\langle D \rangle$ et ρ_{zz} diminuent en augmentant

U . Des études du poids spectral dans le pseudo-gap des cuprates montrent que l'interaction électronique doit être plus forte du côté dopé en trous que du côté dopé en électrons pour reproduire l'expérience [72, 81]. La rigidité superfluide ρ_{zz} a déjà été calculée par GULL et MILLIS [24] dans l'état pur en DCA à $U = 6t > U_c$ et $\beta = 60/t$ pour des paramètres de bandes légèrement différents lorsque $n < 1$. Ils obtiennent un comportement de la rigidité superfluide similaire, en ce que ρ_{zz} admet un maximum dans le régime surdopé, que cette valeur maximale colle avec celle qu'on obtient et que les régimes de dopage sur lesquels ρ_{zz} est définie se ressemblent.

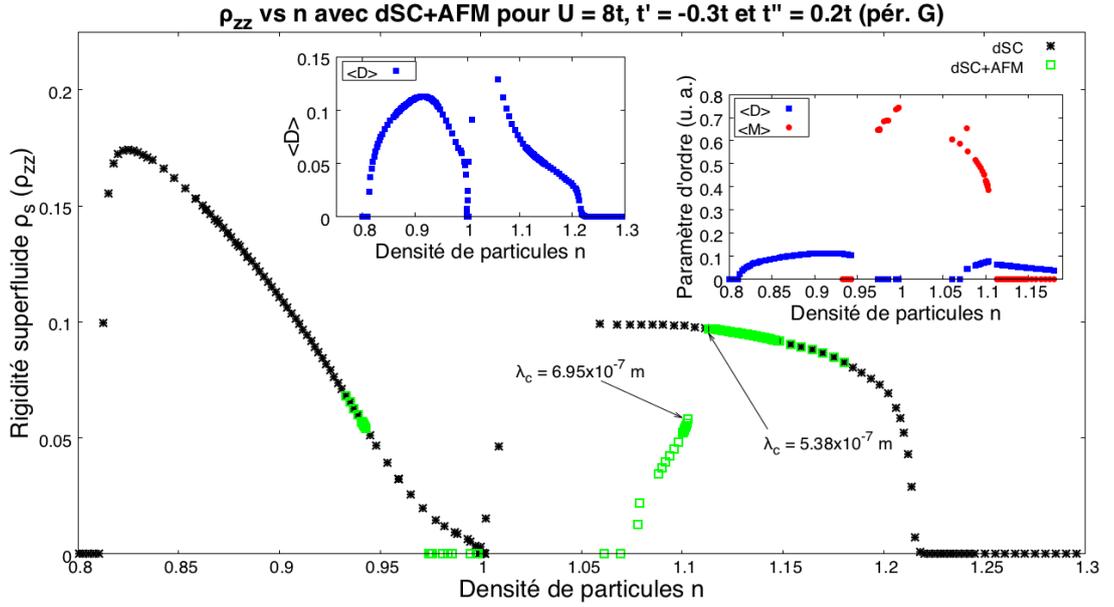


FIGURE 6.2 – ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La présentation des résultats est *idem* à la fig.6.1.

De plus, on remarque à partir des figures 6.1 et 6.2, et des figures 6.3 et 6.4, qu'augmenter l'interaction de Coulomb U augmente le recouvrement entre $\langle M \rangle$ et $\langle D \rangle$, c'est-à-dire la région de coexistence en dopage du côté dopé en électrons. Cela est observé pour tous les paramètres de bande (tab.1.1). Toutefois, du côté dopé en électrons dans le régime de coexistence, accroître U pour les paramètres de bande $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ repousse la suppression de $\langle D \rangle$ à dopage plus élevé, alors que pour les paramètres $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, le fait d'augmenter U élimine $\langle D \rangle$ à plus faible dopage.

La chute relative de ρ_s pour l'ensemble $\{t' = -0.3t, t'' = 0.2t\}$ à $U = 8t$ est plus grande que pour $U = 12t$. Quant à l'ensemble $\{t' = -0.17t, t'' = 0.03t\}$, diminuer U semble plutôt n'avoir aucun effet sur ρ_s . On trouve une diminution plus graduelle de ρ_s lorsque l'AFM apparaît à $U = 6.55t$ qu'à $U = 5t$. On ne peut d'ailleurs statuer sur la nature de la transition de phase associée à l'apparition de l'AFM

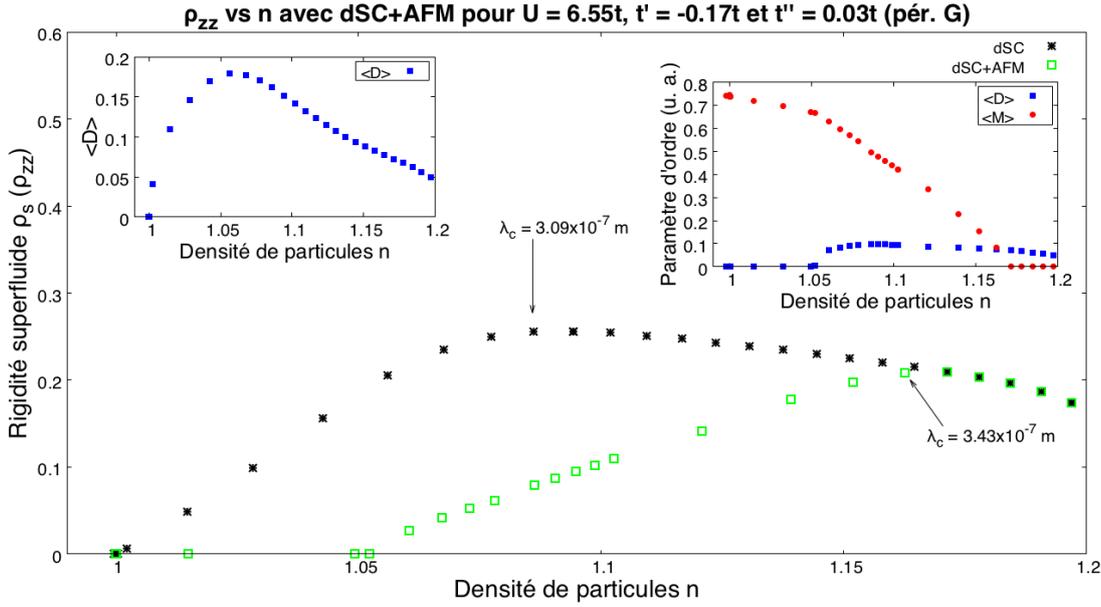


FIGURE 6.3 – ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. *Idem* à la fig.6.1.

($\langle M \rangle$), à savoir si elle est de premier ou de deuxième ordre. Il faudrait raffiner en dopage la région d'apparition de l'AFM et augmenter la taille de l'impureté pour pouvoir statuer sur la nature de la transition de phase avec certitude.

Dans les figures 6.1, 6.2, 6.3 et 6.4, on constate que, dans les régimes surdopés en trous, la chute de ρ_s semble plus soudaine à l'approche du dopage maximal que dans le régime surdopé en électrons. Cette réduction brutale dans le régime surdopé en trous est ce que l'on attendrait d'un supraconducteur conventionnel (BCS).

Effet du terme de saut t_{\perp}

On peut s'interroger sur l'effet du couplage de t_{\perp} sur ρ_s en calculant ρ_s sans la dépendance en $(\cos k_x - \cos k_y)^2$ de t_{\perp} . Ce terme de saut s'assure que l'effet du pseudo-gap ayant lieu dans le plan se répercute selon l'axe c de la maille élémentaire des cuprates, particulièrement dans la dépendance en \mathbf{k} du pseudo-gap. L'effet de t_{\perp} sur les autres schémas *pér. M* et *tr.* est discuté à la sous-sous-section L.1.1.1. Retirer cette dépendance aux vertex de courant réduit davantage la rigidité superfluide dans les schémas *pér. G* et *pér. M*, particulièrement dans le régime sous-dopé en électrons lorsqu'il y a coexistence (voir figs.6.5 et 6.6). De plus, en l'absence de cette dépendance de t_{\perp} , ρ_{zz} est plus aplatie et monotone en fonction du dopage dans le régime de coexistence du côté sous-dopé en électrons.

Le terme de saut t_{\perp} de l'éq.(1.2) prend une valeur maximale dans les portions de la zone de Brillouin où $\mathbf{k} = (0, \pi)$ ou $(\pi, 0)$. Ces portions

Lorsqu'on mentionne des résultats calculés sans t_{\perp} , on entend par là que la dépendance en $(\cos k_x - \cos k_y)^2$ de t_{\perp} est délaissée.

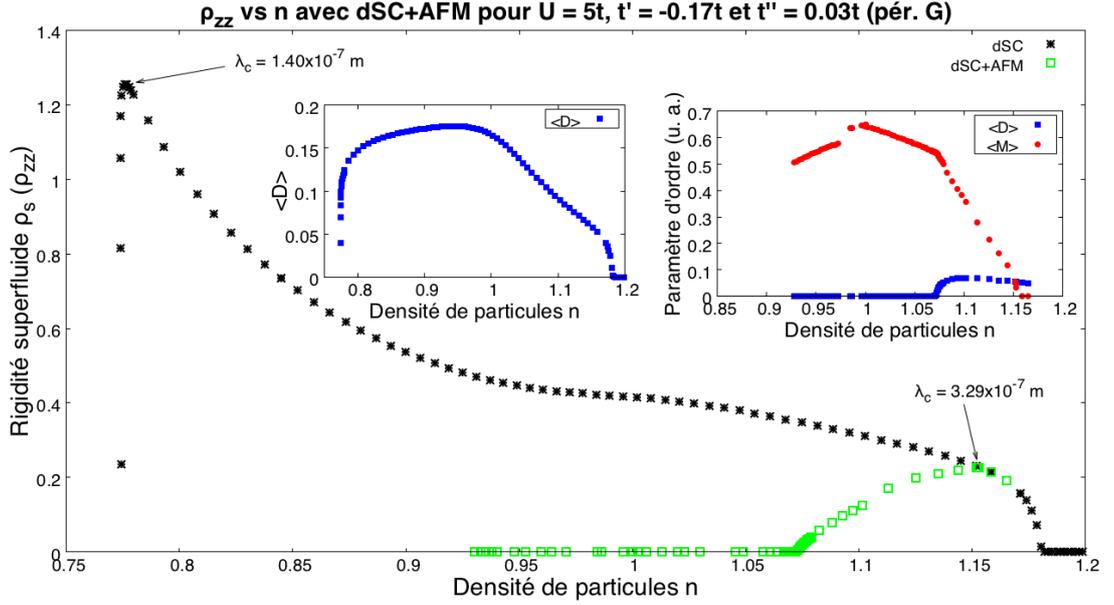


FIGURE 6.4 – ρ_{zz} en régimes de coexistence et pur en fonction de n sous la valeur critique U_c pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. *Idem* à la fig.6.1.

de la BZ sont souvent dénommées les régions antinodales, puisque pour ces valeurs de vecteur d'onde, le gap supraconducteur est maximal. La réduction de ρ_s survenant avec le retrait de $(\cos k_x - \cos k_y)^2$ de t_\perp peut être expliquée par le fait que l'on retire en même temps une pondération favorable à la rigidité superfluide des régions antinodales, là où le gap dSC est maximal. De plus, on remarque qu'en développant $(\cos k_x - \cos k_y)^2 = 1 - 2 \cos k_x \cos k_y + [\cos 2k_x + \cos 2k_y] / 2$, on obtient, de gauche à droite, les termes de saut premiers, deuxièmes et troisièmes-voisins d'un plan CuO_2 à l'autre (selon l'axe z). Le fait de retirer cette dépendance annulerait les contributions à ρ_{zz} des sauts deuxièmes-voisins et troisièmes-voisins lorsque les paires de Cooper sautent d'un plan à l'autre⁴ — ce serait pour cela que ρ_{zz} est plus affectée dans le régime de coexistence avec une réduction encore plus marquée.

Rigidité superfluide intra-plan

Puisque les différents plans constituant une maille élémentaire des cuprates sont faiblement couplés l'un à l'autre, et donc que la physique intra-plan détermine les propriétés selon l'axe c , on a pu s'affranchir des corrections de vertex de courant en calculant ρ_{zz} . Toutefois, l'histoire est différente pour les calculs de fonctions de corrélation à plusieurs points dans le plan cuivre-oxygène. Dans ce cas, il faut inclure

4. Voir la figure 5.4.

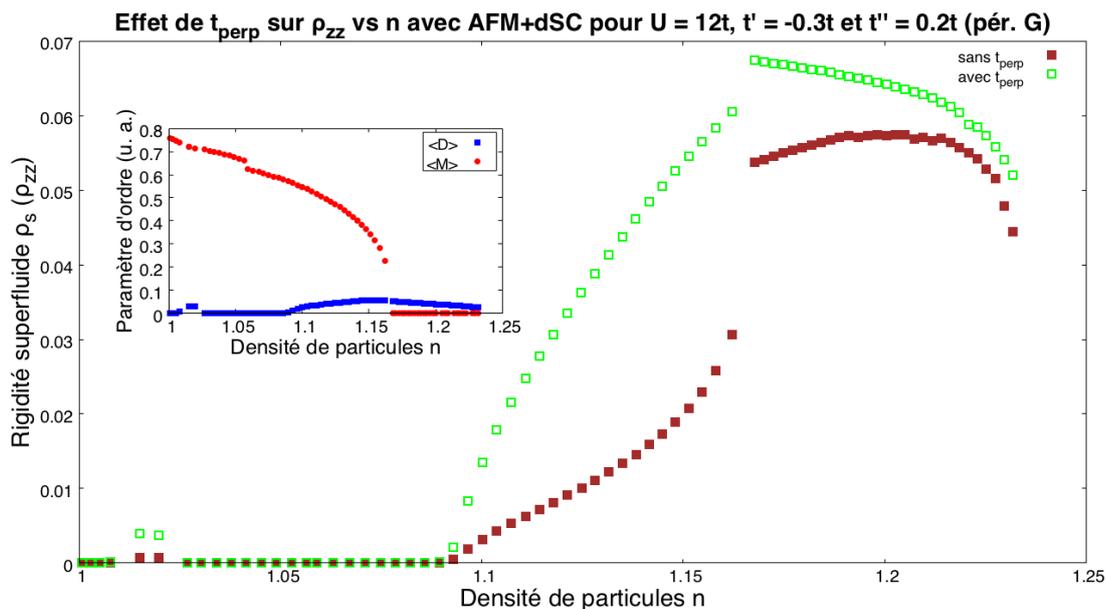


FIGURE 6.5 – Effet du terme de saut t_{\perp} (t_{perp}) sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La sous-figure de gauche illustre les amplitudes des paramètres d'ordre dSC $\langle D \rangle$ et AFM $\langle M \rangle$ en fonction de la densité de particules n , en régime mixte. Seulement le côté dopé en électrons y est montré. La figure principale présente en points rougeâtres ρ_{zz} calculée en l'absence de t_{\perp} en fonction de n , alors que les points creux verts illustrent ρ_{zz} avec t_{\perp} en fonction de n . Les points verts sont les mêmes que ceux à la fig.6.1.

les corrections aux vertex de courant causées par les fortes interactions ; elles ont pour effet de renormaliser les interactions elle-mêmes d'une manière autocohérente en plus d'avoir un effet *retardé*. Malgré le fait que ces corrections soient nécessaires afin d'avoir un traitement quantitatif rigoureux, on a voulu vérifier l'effet de la coexistence de phase sur la rigidité superfluide dans le plan. On s'attend à ce que le résultat qualitatif soit identique, soit que la coexistence de phase résulte en une diminution rapide de la rigidité superfluide, corrections de vertex ou pas.

Que l'on calcule ρ_s dans le régime de coexistence selon l'axe a ou b de la maille élémentaire, les résultats devraient être les mêmes. La véracité de la dernière affirmation se rapporte à la symétrie C_{2v} du plan CuO_2 . Toutefois, dans le régime $dSC+AFM$, les quantités ρ_{xx} et ρ_{yy} ne sont pas égales dans tous les schémas de périodisation et dans tous les régimes de paramètres. Les quantités croisées telles ρ_{xy} ou ρ_{yx} sont nulles en régime pur dSC et en régime de coexistence $dSC+AFM$, puisque l'on a invariance sous translation dans le temps et une topologie du système qui est triviale. Quelques valeurs de ρ_{\parallel} ont été converties en longueur de pénétration λ_{\parallel} à l'aide de l'éq.(5.5). Les valeurs de λ_{\parallel} immédiates suivant la chute de ρ_{\parallel} sont plus courtes

L'effet retardé signifie que les effets des interactions électroniques à un temps donné peuvent ne pas avoir de conséquences immédiates et qu'elles peuvent avoir des répercussions à des temps ultérieurs.

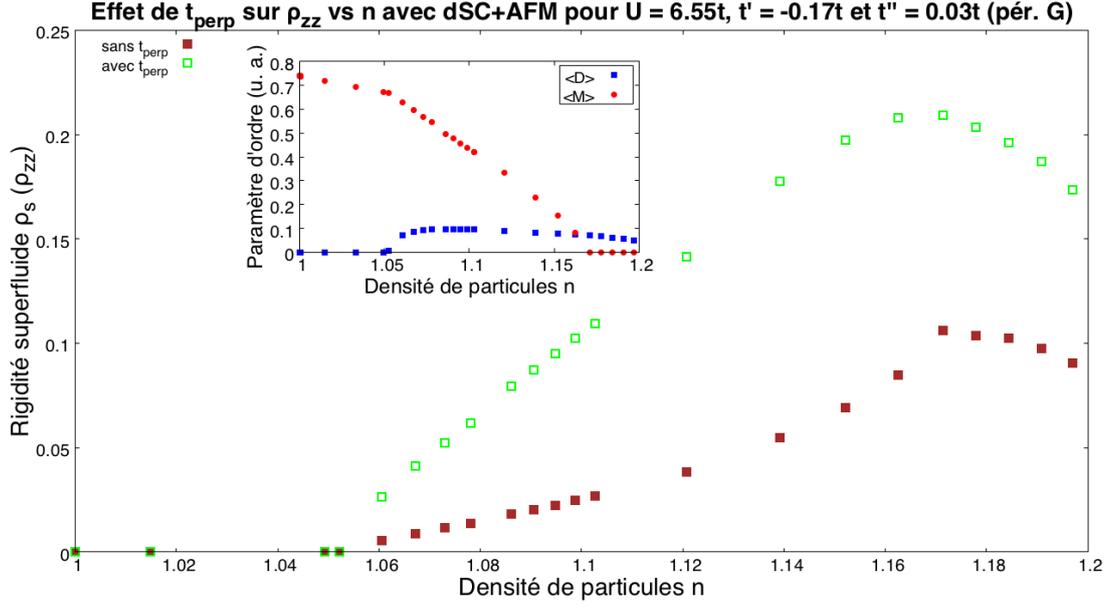


FIGURE 6.6 – Effet du terme de saut t_{\perp} (t_{perp}) sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. Les points verts sont les mêmes que ceux à la fig.6.3. La présentation est identique à la fig.6.5.

que celles de λ_c suivant la chute de ρ_{zz} , pour les mêmes paramètres. L'anisotropie est de l'ordre de $\lambda_{zz}(T=0)/\lambda_{\parallel}(T=0) \sim 25$ [53].

Les figures 6.7 et 6.8 illustrent la rigidité superfluide intra-plan (ρ_{xx} et ρ_{yy}) en fonction de la densité de particules n , respectivement pour $U = 12t > U_c$ et $U = 8t > U_c$, pour l'ensemble de paramètres de bandes $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Les figures 6.9 et 6.10 montrent ρ_{xx} et ρ_{yy} en fonction de n pour l'autre ensemble de paramètres de liaison forte $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, respectivement à $U = 6.55t$ et $U = 5t$. Tous ces différents ensembles de paramètres admettent une nette réduction de ρ_s aussitôt que $\langle M \rangle$ acquiert une valeur non-nulle. Contrairement à la sous-section 6.1.2, la chute relative de ρ_s à $U = 8t$ (fig.6.8) est aussi importante que celle à $U = 12t$ (fig.6.7), pour $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Également, les chutes relatives de ρ_s à $U = 6.55t$ et $U = 5t$ pour $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, lorsque $\langle M \rangle \neq 0$, sont similaires.

Dans les régimes pur et mixte, ρ_{\parallel} est calculée à partir de l'éq.(5.36). La formule de ρ_{\parallel} (5.39) aurait pu être utilisée sur les solutions obtenues dans le régime pur dSC. Ce qui explique ce choix est ce qui suit : bien que les formules (5.36) et (5.39) s'équivalent dans la limite où $\langle M \rangle \rightarrow 0$, les résultats numériques de ρ_{\parallel} issus de la périodisation de la \mathcal{G}_c diffèrent (voir la figure N.4). En effet, le calcul de ρ_{\parallel} semble exacerber les effets de la brisure de symétrie par translation et les différents schémas de périodisation auraient davantage de difficultés à rétablir cette invariance. Afin de vérifier l'accord entre les formules

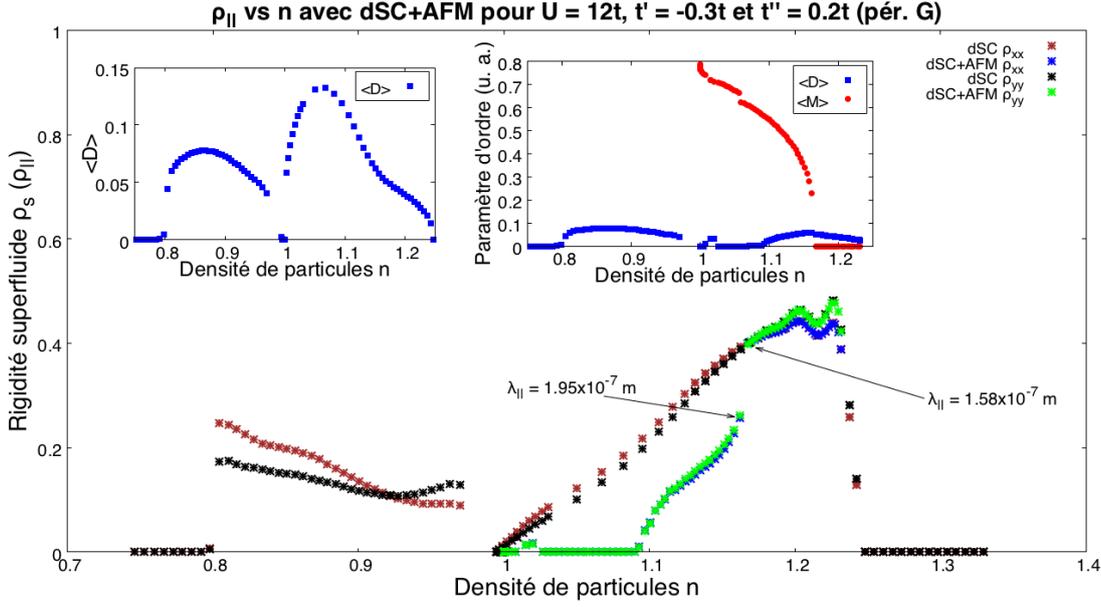


FIGURE 6.7 – Rigidité superfluide intra-plan ($\rho_{||}$) en fonction de la densité de particules n pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Le schéma de périodisation de la fonction de Green est utilisé et les corrections de vertex négligés. Les points verts de la figure principale décrivent ρ_{yy} , les points bleus ρ_{xx} et les points noirs, où il y a seulement de la supraconductivité, ρ_{xx} ou ρ_{yy} , tous en fonction de n . Les points bleus et verts sont difficiles à distinguer l'un de l'autre à cause du recouvrement. La sous-figure de gauche illustre le comportement de l'amplitude du paramètre d'ordre dSC en fonction de n . La sous-figure de droite illustre plutôt l'amplitude des paramètres d'ordre AFM $\langle M \rangle$ et dSC $\langle D \rangle$ calculés dans un régime mixte en fonction de la densité de particules par orbitale $3d_{x^2-y^2}$ de cuivre.

(5.36) et (5.39) lorsque $\langle M \rangle \rightarrow 0$, il suffit de bâtir la fonction de Green de l'éq.(5.36) à partir de la définition du hamiltonien (K.12), puis de porter le paramètre d'ordre AFM à zéro ($M \rightarrow 0$) : on retrouve l'éq.(5.39) en raison du fait que les dérivées partielles de la relation de dispersion premier-voisin $\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x}$ et $\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y}$ changent de signe en traversant la délimitation de la rBZ (zone en forme de diamant de la figure 4.1).

Les rigidités superfluides ρ_{xx} et ρ_{yy} calculées dans le régime pur dSC sont égales pour tous les paramètres considérés lorsqu'on emploie l'éq.(5.39), mais ce n'est pas le cas lorsque l'éq.(5.36) est employée (voir figs.6.7, 6.8, 6.9 et 6.10). Le fait que ρ_{xx} et ρ_{yy} soient égales dans le régime dSC en utilisant l'éq.(5.39) peut être expliqué ainsi : en vertu de la relation de dispersion éq.(5.35), la multiplication des vertex de courant de l'éq.(5.39) reste inchangée, que l'on effectue une dérivée seconde par rapport à x ou y . Les valeurs de ρ_{xx} (ou ρ_{yy}) peuvent être moindres que ρ_{zz} dans l'état dSC . Toutefois, la conversion des données en unités SI devrait rectifier le tir en raison du fait que $t_{bi} \sim \frac{t}{25}$ —

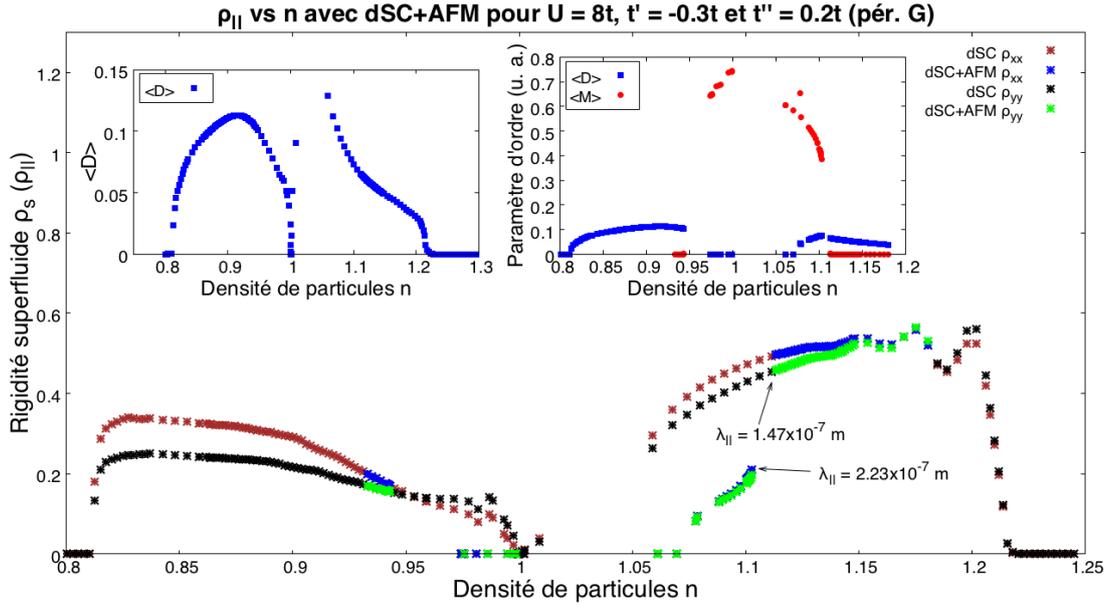


FIGURE 6.8 – $\rho_{||}$ en fonction de n pour $U = 8t, t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La présentation de la figure est *idem* à la fig.6.7.

on devrait s'attendre à ce que ρ_s selon l'axe c soit plus faible que la rigidité superfluide intra-plan, puisque les longueurs de pénétration magnétiques sont plus petites dans le plan que dans la direction perpendiculaire au plan [53].

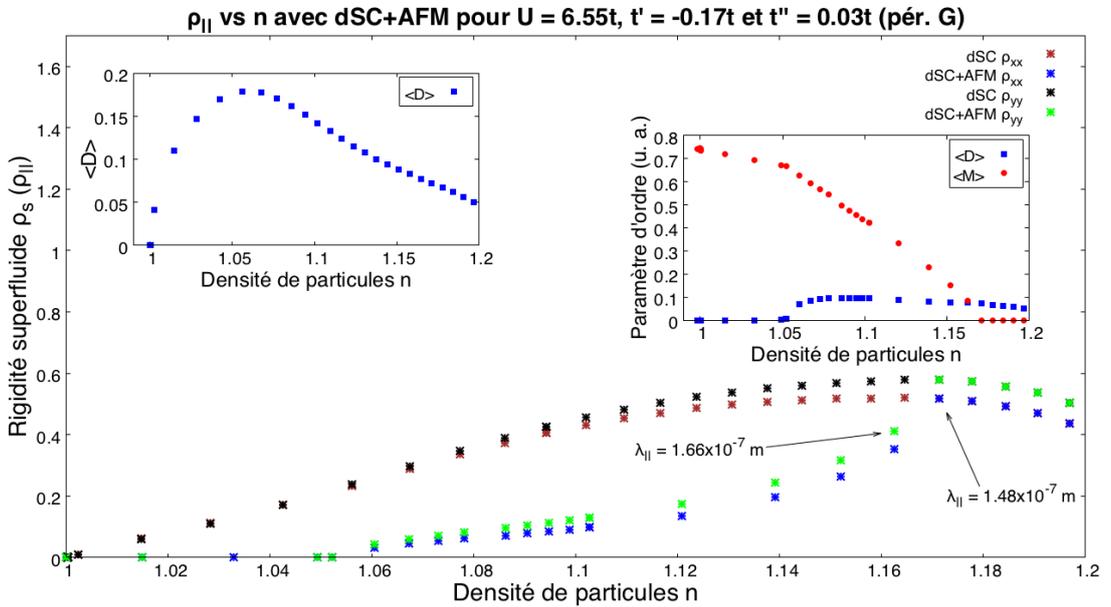


FIGURE 6.9 – $\rho_{||}$ en fonction de n pour $U = 6.55t, t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. *Idem* à la fig.6.7.

Similairement aux résultats de ρ_{zz} à la sous-section 6.1.2, dans les régimes mixte dSC+AFM ou pur dSC, $\rho_{||}$ ne suit pas le même profil

que celui du paramètre d'ordre dSC $\langle D \rangle$. De plus, dans l'état pur, les valeurs maximales de ρ_{\parallel} sont moins prononcées que celles des calculs selon l'axe c . Dans le régime de coexistence, si l'on compare les valeurs de ρ_{xx} et ρ_{yy} , on remarque que ces derniers ont des comportements très similaires et que leurs valeurs se rapprochent l'une de l'autre dans le régime de coexistence. Pour les paramètres de bande YBCO, les différences entre ρ_{xx} et ρ_{yy} sont plus importantes du côté dopé en trous.

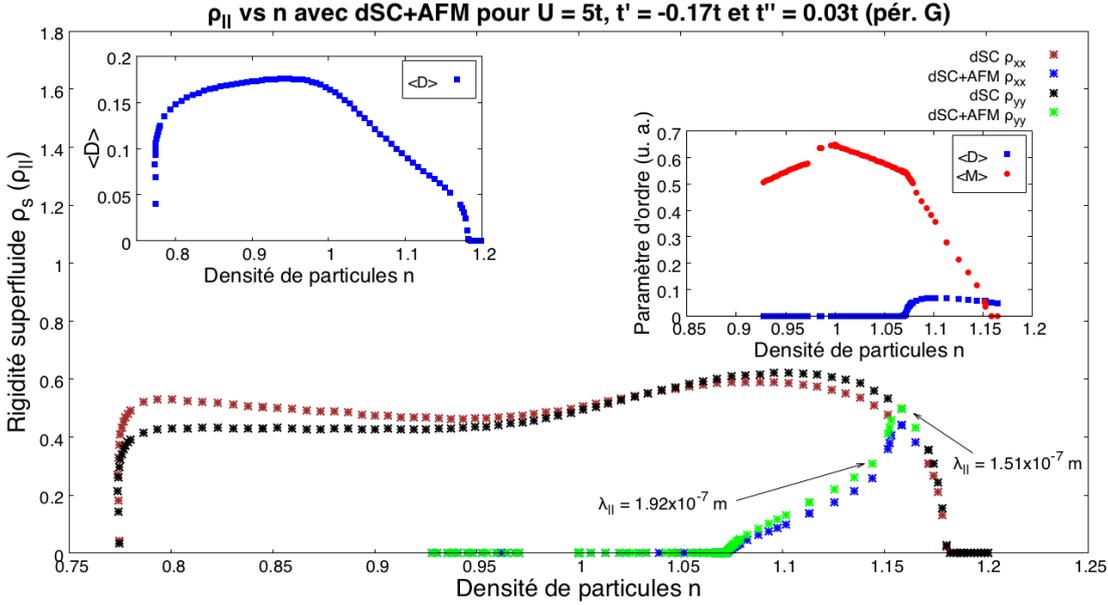


FIGURE 6.10 – ρ_{zz} en fonction de n pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$.
Idem à la fig.6.7.

Effet de la périodisation

Deux des trois schémas de périodisation présentés à la sous-section 4.2.3 constituent des procédures menant à la reconstruction du réseau original (plan CuO_2) à partir de l'amas 2×2 considéré. L'une d'entre elles périodise le cumulatif (*pér. M*), soit la portion locale de la fonction de Green \mathcal{G}_c comportant la self-énergie $\Sigma_c(i\omega_n)$. Cette dernière admettrait de meilleurs résultats lorsqu'on calcule des quantités à un corps, i. e., la densité de particules (4.29) [59]. Si l'on compare les résultats de la *pér. G* à la sous-section 6.1.2 avec ceux de la *pér. M* à la sous-section L.1.1, on constate que la *pér. G* atténue la diminution de ρ_s à faible dopage dans le régime sous-dopé en électrons. Du côté dopé en trous, on trouve un meilleur accord entre les deux schémas *pér. G* et *pér. M* que du côté dopé en électrons. La chute de ρ_s en *pér. M* serait accélérée à plus faible dopage dans le régime de coexistence. De plus, il semble qu'en *pér. M* la réduction soudaine de ρ_s dans le régime AFM+dSC soit plutôt une hausse soudaine.

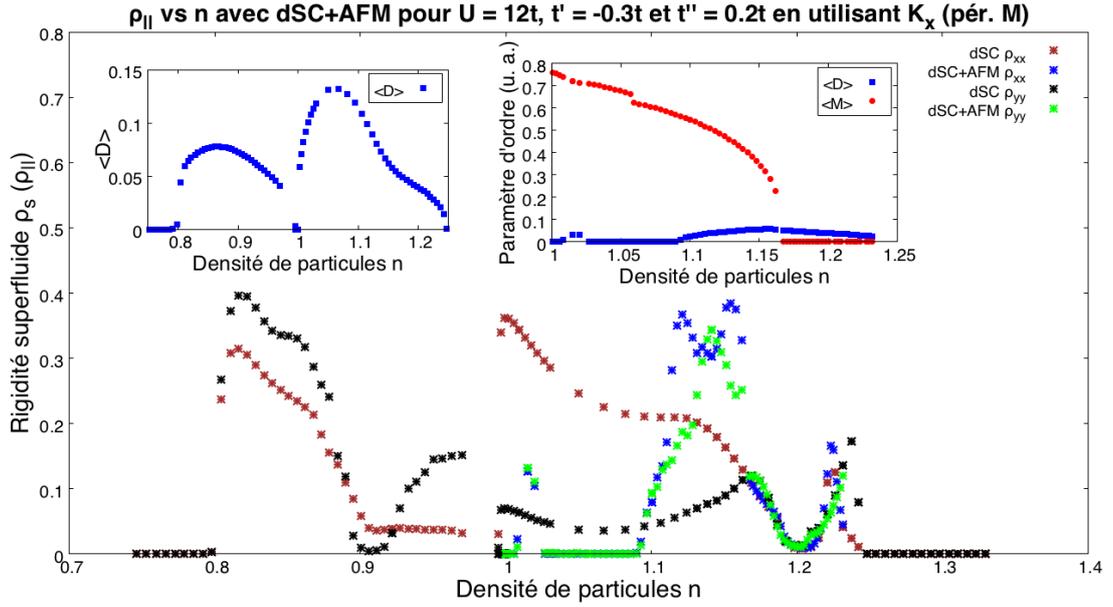


FIGURE 6.11 – ρ_{\parallel} en régimes de coexistence et pur en fonction de n pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Le vecteur $\mathbf{K}_x = \{(0, 0), (\pi, 0)\}$ est utilisé dans le schéma de périodisation du cumulants.

Les schémas de périodisation ont pour but d'effacer les effets de la brisure de symétrie de translation associée à la taille finie de l'impureté. Le schéma jugé le plus efficace est celui pour lequel la différence entre ρ_{xx} et ρ_{yy} est minimale et dont la différence entre les calculs de ρ_{zz} en régime pur utilisant les formules (5.37) et (5.40) se traduit par un facteur⁵ 2. Ainsi, une façon de vérifier lequel des schémas de périodisation est le plus efficace serait de calculer ρ_{xx} et ρ_{yy} en *pér. G* et *pér. M*. La figure 6.11 montre ρ_{\parallel} dans le schéma de périodisation du cumulants. L'effet d'invertir \mathbf{K}_x et \mathbf{K}_y est le même pour la périodisation de la fonction de Green, c'est-à-dire que ρ_{xx} et ρ_{yy} sont inchangés. Il est clair, si l'on compare les figures 6.7 et 6.11, qu'en *pér. M*, ρ_{xx} n'est pas semblable à ρ_{yy} . Un autre aspect suggère que la *pér. M* est moins efficace que la *pér. G* : lorsqu'on calcule ρ_{zz} en régime pur *dSC* avec la formule de coexistence (5.37) en intégrant sur la BZ en *pér. G*, on trouve un facteur 2 séparant lesdites données à celles calculées avec la formule en régime pur (5.40), mais ce n'est pas le cas⁶ pour tous les dopages en *pér. M*. Tout cela⁷ suggère que périodiser le cumulants est moins efficace que périodiser la fonction de Green lorsqu'on calcule ρ_s avec un amas 2×2 .

Le plan cuivre-oxygène a une symétrie C_{2v} en raison du fait que les paramètres du réseaux a et b sont égaux.

5. Ce facteur 2 apparaît si l'on utilise la formule en coexistence (5.37) en sommant sur la zone de Brillouin originale BZ. Si on somme sur la rBZ, aucun facteur ne différencie les éqs.(5.37) et (5.40).

6. Voir la figure N.3.

7. Les schémas *pér. M* et *tr.* admettent des résultats similaires.

RÉSULTATS À TEMPÉRATURE FINIE

Les résultats de ρ_s calculés à température finie sont exposés dans cette section. Les données ont été recueillies en utilisant un solveur d'impureté de type CTQMC dans le développement de la fonction d'hybridation (CT-HYB). À la [sous-section 6.1.4](#), on a justifié pourquoi la périodisation de la fonction de Green (*pér. G*) est plus efficace lorsque vient le temps de reconstituer le réseau complet à partir de l'amas. De la même façon, à température finie, la *pér. G* donne les résultats les plus probants, ceux les plus près de l'expérience. Ainsi, seuls les résultats calculés dans le schéma *pér. G* sont montrés dans ce mémoire pour ne pas le surcharger. Toutefois, un document séparé fait état des résultats obtenus dans la périodisation du cumulatif (*pér. cum*) et il peut être distribué à la demande. La rigidité superfluide calculée dans le plan ρ_{\parallel} à température finie fait aussi partie du document distribué à la demande.

La rigidité superfluide ρ_{\perp} a été évaluée en *pér. G* à la [sous-section 6.2.1](#). À température finie, la phénoménologie des cuprates introduite à la [sous-section 1.4.2](#) est toujours appliquée pour calculer ρ_{\perp} . Les régimes dopés en électrons et en trous sont tous deux considérés.

Les effets du terme de saut électronique au deuxième voisin t' sur l'amplitude du paramètre d'ordre supraconducteur $|\phi|$ dans l'état pur, la température critique supraconductrice T_{cm} et la rigidité superfluide ρ_s sont investigués dans ce qui suit. Ce terme de saut t' contribue à la frustration de spin sur l'amas 2×2 lorsque sa valeur absolue est augmentée, particulièrement lorsque la structure de bande électronique permet un emboîtement avec la zone de Brillouin réduite AFM (rBZ). L'effet de la frustration de spin sur la relation de proportionnalité de Uemura est également évalué.

Rigidité superfluide interplan

Tel que discuté à la [section 5.1](#), la transition de phase supraconductrice est caractérisée par l'apparition d'un paramètre d'ordre brisant la symétrie $U(1)$ du hamiltonien décrivant les électrons. Afin d'évaluer l'amplitude du paramètre d'ordre supraconducteur dans l'état pur, l'éq.(5.24b) est mise à contribution. L'amplitude $|\phi|$ est évaluée pour une plage de température et pour toutes les densités électroniques admettant une valeur de $|\phi|$ non nulle, tel que montré à la figure 6.12.

Plusieurs choses sont à constater à partir de la figure 6.12. Premièrement, l'augmentation de $|t'|$ augmente l'asymétrie entre les dômes supraconducteurs des deux côtés du demi-remplissage. Deuxièmement, du côté dopé en électrons, si l'on augmente $|t'|$, la *dSC* subsiste jusqu'à plus haute température que du côté dopé en trous [17]. Toutefois, les côtés $n > 1$ et $n < 1$ voient tous deux leur plage de dopage diminuer de la même façon lorsque $|t'|$ s'accroît. Finalement, il est à

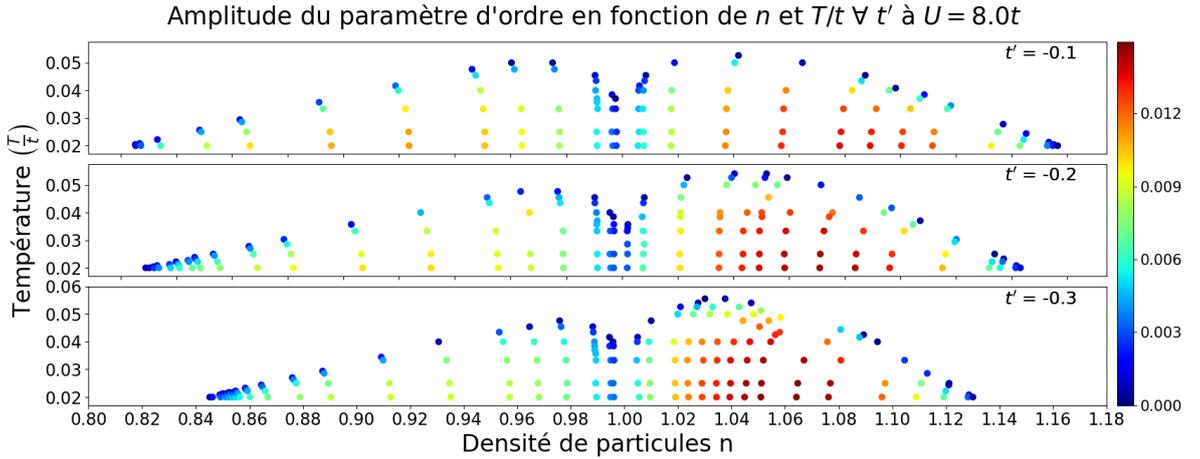


FIGURE 6.12 – Figure d’intensité de couleur de l’amplitude du paramètre d’ordre en fonction de n pour $U = 8t$ et $t' = \{-0.3, -0.2, -0.1\}$. À demi-remplissage ($n = 1$), on retrouve la transition de Mott. Les régimes dopé en trous et dopé en électrons sont présentés.

remarquer que les amplitudes $|\phi|$ dominent du côté $n > 1$ par rapport à celui $n < 1$, comme on peut le voir par grille de couleur.

Le profil délimitant les dômes supraconducteurs de la figure 6.12 représentent la température critique supraconductrice à laquelle les paires de Cooper se forment, soit T_{cm} . Il ne s’agit pas de la T_c associée à l’établissement d’un ordre supraconducteur macroscopique — cette température est plus faible que T_{cm} , puisque la cohérence de phase survient à plus faible température. Comme la T_c calculée correspond réellement à T_{cm} , on la notera T_{cm} . Ce profil est présenté à la fig.6.13. À la figure 6.13, la sous-figure de gauche montre le côté dopé en trous et celle de droite le côté dopé en électrons. L’effet d’augmenter $|t'|$ n’est pas le même selon si l’on se retrouve d’un côté ou de l’autre : du côté $n < 1$, l’augmentation de la frustration de spin réduit T_{cm} , alors que du côté $n > 1$, la T_{cm} est augmentée. De plus, les courbes de T_{cm} se superposent toutes l’une sur l’autre du côté $n < 1$, contrairement à $n > 1$ où les courbes se croisent peu après le dopage maximal p^* . Contrairement à l’expérience, ces calculs effectués à $U = 8t$ concluent que la température critique T_c devrait être plus élevée lorsque l’on dope le plan CuO_2 en électrons. Or, expérimentalement, une T_c plus élevée est observée en dopant les cuprates en trous. Les faits que les valeurs de l’interaction de Coulomb peuvent changer en modifiant le dopage [72], que ce soit T_{cm} et non T_c qui soit calculée, et qu’il y ait compétition de phase réduisant ρ_s du côté dopé aux électrons (cf. section 6.1) pourraient corriger ce désaccord avec l’expérience.

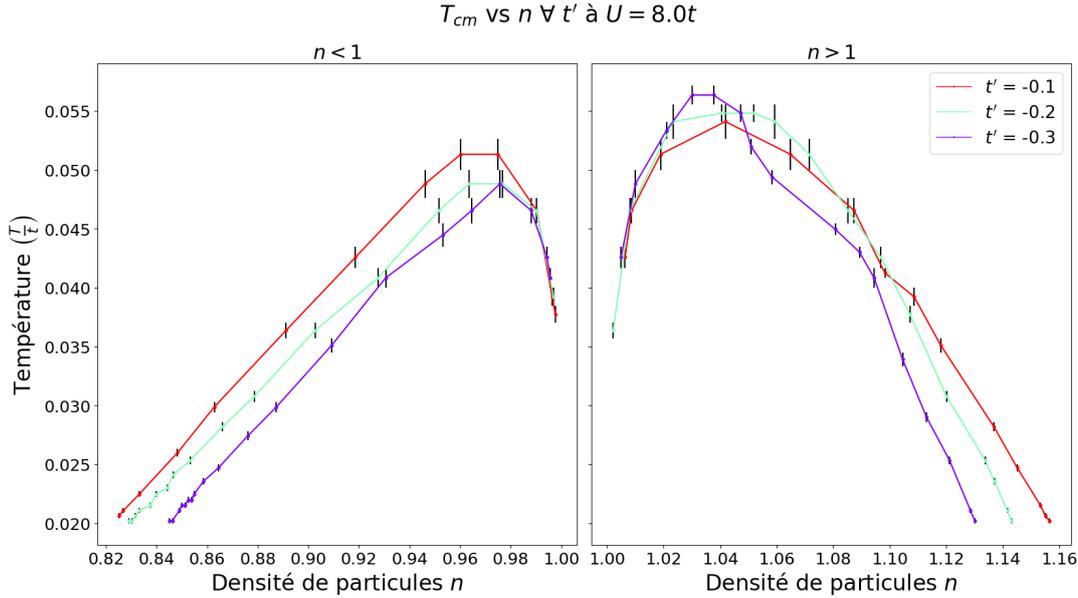


FIGURE 6.13 – T_{cm} en fonction de n pour $U = 8t \forall t'$. Les barres d'erreur sont issues de la résolution du balayage en température. Si l'on raffinaient en température, la valeur des barres d'erreur diminuerait. Les régimes dopés en électrons et en trous sont séparés l'un de l'autre par clarté. Augmenter la valeur de $|t'|$ fait en sorte qu'on accroît le changement en potentiel chimique lorsque la température augmente. Ce changement en μ est très important près de T_{cm} lorsque $t' = -0.3t$ et cela rend difficile la délimitation de T_{cm} (cf. fig.6.12).

Il a été mentionné⁸ que si l'on calcule ρ_s à la plus faible température disponible, on peut établir une borne supérieure à la valeur de T_c . À la figure 6.14, l'amplitude $|\phi|$ est présentée pour $\beta = 50/t$. Ces courbes sont des coupes à $\beta = 50/t$ de la fig.6.12. Le comportement qualitatif des courbes à la fig.6.14 est similaire à la fig.6.13, du côté $n < 1$ comme celui $n > 1$. En effet, du côté $n > 1$, accroître $|t'|$ a pour effet d'amplifier la valeur de $|\phi|$, contrairement au côté $n < 1$. Les courbes sont symétriques et se superposent lorsque $n < 1$. Elles se croisent lorsque $n > 1$, mais pas au même endroit. En vertu des figures 6.13 et 6.14, le fait que $|\phi|$ et T_{cm} ne suivent pas le même profil suggère que la force d'appariement varie beaucoup avec le dopage.

La figure 6.15 illustre l'amplitude de ρ_{\perp} en fonction de la température et de la densité électronique n pour toutes les valeurs de t' étudiées. Les effets de t' sur ρ_{\perp} sont équivalents à ceux sur $|\phi|$, puisqu'à toute valeur non-nulle de $|\phi|$ correspond une valeur non nulle⁹ de ρ_{\perp} . Les valeurs de ρ_{\perp} sont plus élevées du côté $n > 1$.

La figure 6.16 présente des coupes à $\beta = 50/t$ de ρ_{\perp} obtenues de la fig.(6.15). Du côté $n > 1$, l'augmentation de $|t'|$ augmente la valeur

8. Voir la section 1.2.

9. cf. éq.(5.43) où $|\phi| \rightarrow \Delta$.

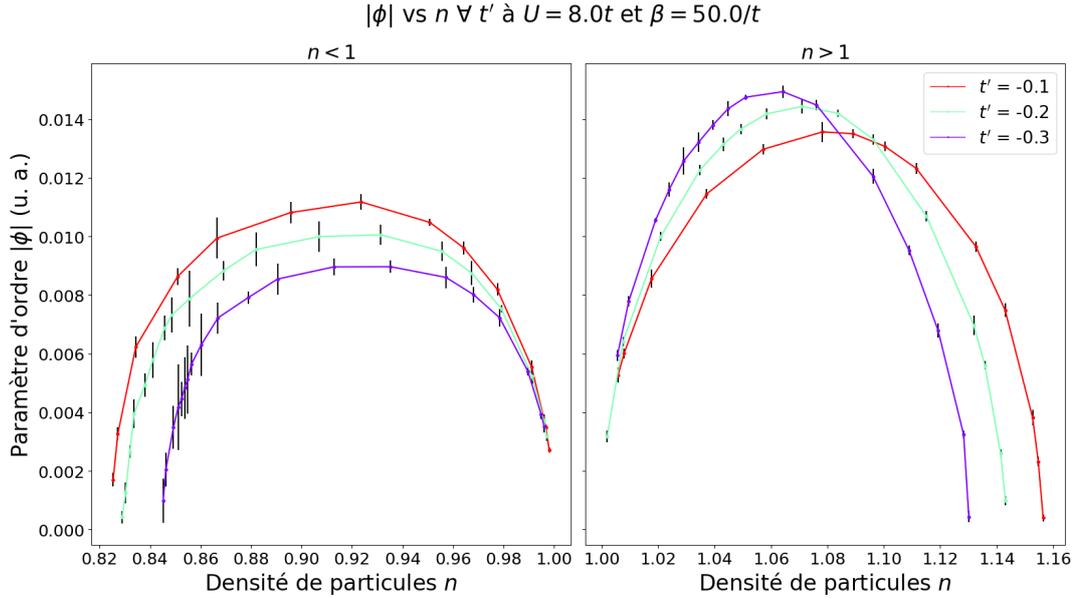


FIGURE 6.14 – Amplitude du paramètre d'ordre $|\phi|$ en fonction de n à $\beta = 50/t$ pour $U = 8t \forall t'$. Les barres d'erreur sont issues des oscillations des 10 dernières itérations de la solution convergée (fonction de Green \mathcal{G}_c). Si l'on augmentait le nombre d'itérations ou le nombre de processeurs en parallèle, la valeur des barres d'erreur diminuerait. Les régimes dopés en électrons et en trous sont séparés l'un de l'autre par clarté.

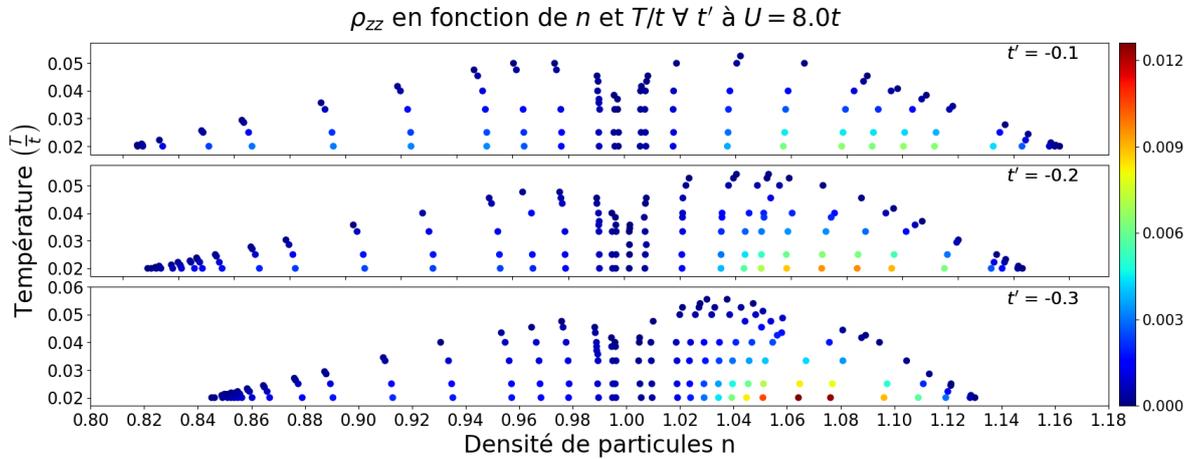


FIGURE 6.15 – Figure d'intensité de couleur de ρ_{\perp} en fonction de T et de n pour $U = 8t$ et $t' = \{-0.3, -0.2, -0.1\}$. À demi-remplissage ($n = 1$), on retrouve la transition de Mott. Les régimes dopés en trous et en électrons sont présentés.

maximale de ρ_{\perp} en plus de la déplacer à plus faible dopage (voir figs.6.15 et 6.16). Du côté $n < 1$, la diminution de $|t'|$ accroît la valeur maximale de ρ_{\perp} et ne semble pas en affecter la valeur en dopage.

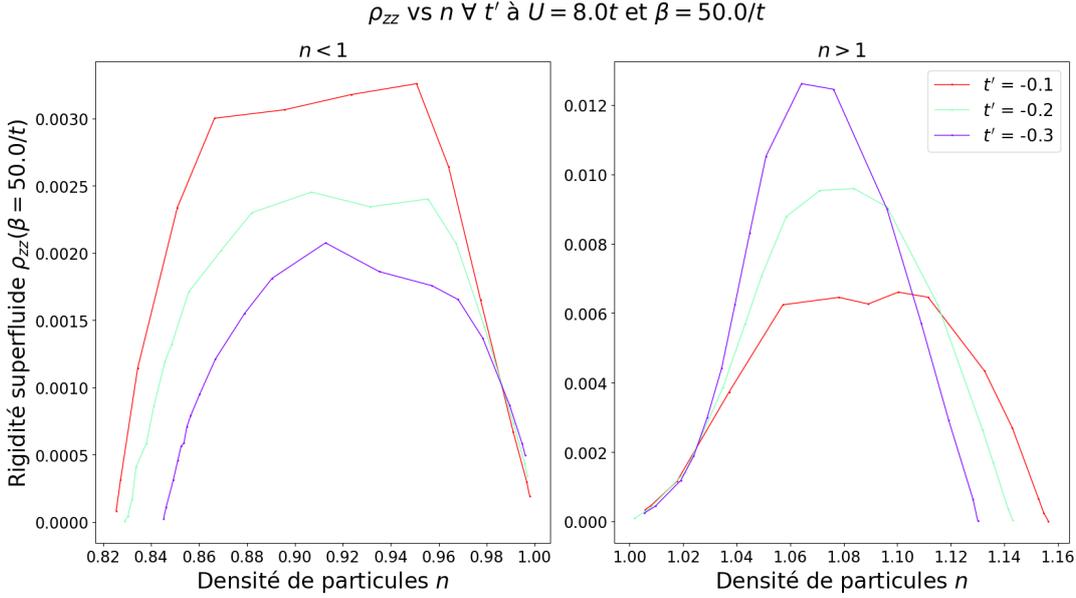


FIGURE 6.16 – ρ_{\perp} en fonction de n à $\beta = 50/t$ pour $U = 8t$ et $\forall t'$. Les régimes $n > 1$ et $n < 1$ sont séparés l'un de l'autre par clarté.

Il est de constat que ρ_{\perp} est faible dans les régions sous-dopées, là où la température T_{cm} est maximale (cf. figs.6.13 et 6.16). Il serait donc raisonnable de prétendre que les fluctuations de phase sont importantes dans les régions sous-dopées et que $T_c < T_{cm}$.

Ayant en possession les figures 6.13 et 6.16, il est possible de reproduire les figures de Uemura similaires aux figures 1.3, 1.4 et 1.5. La figure 6.17 illustre les figures de Uemura pour $n < 1$ et $n > 1$ à la plus faible température utilisée, soit $\beta = 50/t$. De manière similaire au comportement de T_{cm} en fonction de n , la figure de Uemura 6.17 lorsque $n > 1$ serait plus adéquate pour $n < 1$ en vertu de la figure 1.3. À $n < 1$ et $n > 1$, les régions surdopées admettent une relation liant T_{cm} et ρ_{\perp} qui est linéaire et cette relation semble robuste par rapport à t' . Toutefois, du côté surdopé en électrons, cette linéarité existe sur un plus grand régime de dopage plus $|t'|$ est grand. Du côté surdopé en trous, on trouve plutôt le comportement inverse : la relation linéaire liant T_{cm} à ρ_{zz} se prolonge sur un plus grand domaine de dopage lorsque $|t'|$ diminue. Cette relation linéaire est observée expérimentalement (fig.1.5).

S'il y avait de la compétition de phase dans le régime sous-dopé à température finie, les résultats à température nulle suggèrent que la relation de Uemura y serait moins abrupte, un peu à l'image de la relation dans la région surdopée. Il serait toutefois intéressant d'en voir l'effet quantitatif si l'on arrivait à faire converger des solutions du modèle de Hubbard dans le régime mixte.

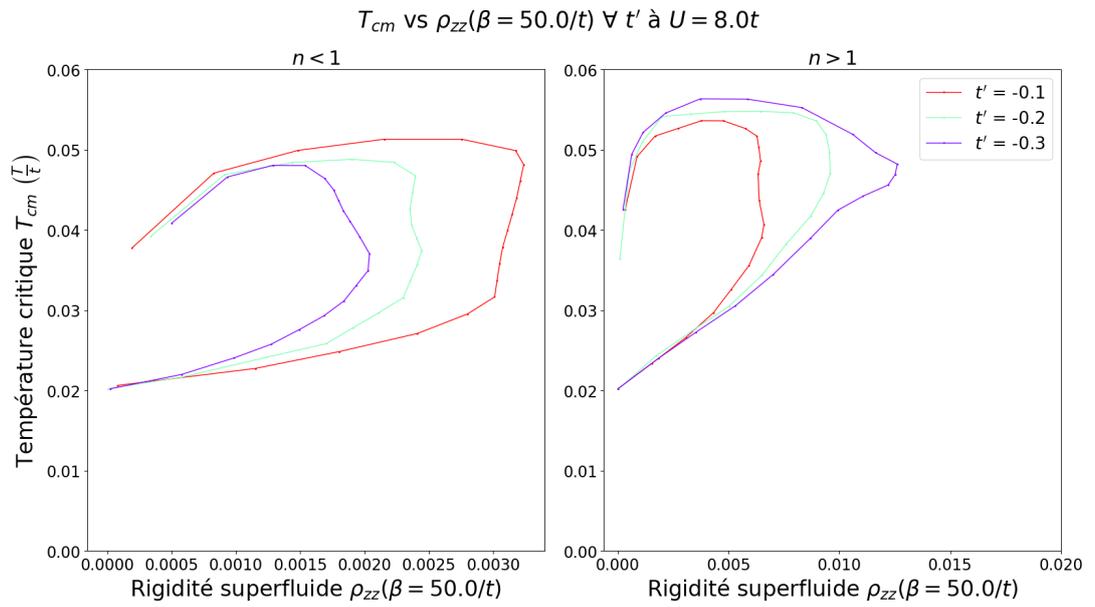


FIGURE 6.17 – Relation de proportionnalité de Uemura reliant T_{cm} à ρ_{\perp} pour tous les dopages considérés. Si l'on suit la courbe dans le sens horaire partant de la branche du haut, on se trouve à augmenter le dopage. La région sous-dopée est celle précédant la valeur maximale de ρ_{\perp} , alors que celle suivant cette valeur maximale correspond à la région surdopée.

Cinquième partie

CONCLUSION

CONCLUSION

La rigidité superfluide ρ_s est une quantité essentielle à la caractérisation d'un ordre supraconducteur. La rigidité superfluide a été calculée pour les cuprates supraconducteurs selon tous les axes cristallins, pour plusieurs valeurs d'interaction de Hubbard et différentes structures de bande, à température nulle comme à température finie. À température nulle, l'effet de la coexistence de phase sur la rigidité superfluide a été évaluée. À température finie, les effets de la structure de bande électronique sur la rigidité superfluide, l'amplitude du paramètre d'ordre supraconducteur et la température critique ont été investigués.

Premièrement, les valeurs de dopage où T_c , le paramètre d'ordre supraconducteur $|\phi|$ et la rigidité superfluide $\rho_s(T \rightarrow 0)$ sont maximales ne coïncident pas. Le fait qu'à température finie les valeurs de T_c et de $|\phi|$ n'aient pas le même profil signifie que la force d'appariement à l'origine de la formation des paires de Cooper varie substantiellement avec le dopage, c'est-à-dire avec la densité électronique par orbitale de cuivre dans le plan CuO_2 .

Deuxièmement, la faible valeur de $\rho_s(T \rightarrow 0)$ près de la transition de Mott implique que les fluctuations de phase classiques y contrôlent T_c [11, 21, 34, 40]. Ainsi, dans le régime sous-dopé des cuprates, la température champ-moyen T_{cm} correspondant à la formation locale des paires de Cooper serait plus élevée que celle à laquelle la cohérence de phase du paramètre d'ordre apparaît. La nature de la transition de phase dans le régime sous-dopé s'apparenterait à celle de Kosterlitz-Thouless [36] survenant, par exemple, dans les couches minces de supraconducteurs conventionnels [27]. On rappelle que cette cohérence de phase est essentielle à l'existence de l'état supraconducteur macroscopique.

Troisièmement, la relation entre la température critique T_c et la rigidité superfluide à faible température $\rho_s(T \rightarrow 0)$ dans le régime sur-dopé est linéaire et universelle, c'est-à-dire qu'elle est indépendante de la frustration de spin sur le réseau d'atomes du plan CuO_2 . Ce résultat est corroboré par des résultats expérimentaux sur des composés de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [12].

Quatrièmement, à température finie, l'augmentation de la frustration de spin, soit l'augmentation de $|t'|$, réduit l'étendue en dopage électronique du dôme supraconducteur, que l'on se situe du côté dopé en trous ou de celui dopé en électrons.

Finalement, à température nulle, il est clair que la coexistence de phase entre la supraconductivité de type d et l'antiferromagnétisme

commensurable est très néfaste pour la rigidité superfluide à faible température $\rho_{zz}(T \rightarrow 0)$.

En vertu des résultats théoriques discutés, une réduction nette de la rigidité superfluide concomitante à l'apparition de l'ordre antiferromagnétique devrait mener à une augmentation nette de la longueur de pénétration magnétique, dans le plan CuO_2 ou selon l'axe perpendiculaire. Ainsi, ce travail prédit que dans les régions où les fluctuations antiferromagnétiques se développent, les expériences devraient observer que la longueur de pénétration magnétique augmente abruptement. Cette réduction dépend fortement de l'interaction électronique et de la structure de bande électronique.

Dans un futur projet, il serait intéressant de pouvoir quantifier l'effet de la coexistence de phase entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité à température finie sur la rigidité superfluide. On serait alors en mesure de construire des figures de Uemura et d'étudier l'effet de la coexistence sur la relation entre T_c et ρ_s à température finie. Cela constituerait un test de plus à l'application des formules de la rigidité superfluide en régime de coexistence dérivées dans le cadre de cette maîtrise.

Sixième partie

APPENDIX

SOLUTION À L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER DANS LA REPRÉSENTATION D'INTERACTION

On dérive la solution à l'opérateur d'évolution $\hat{T}_I(t, t_0)$ à partir de l'éq.(2.16) et on la présente dans sa forme finale. Le super-opérateur d'ordonnement dans le temps \mathcal{T}_t est introduit naturellement dans le développement mathématique.

On intègre par partie l'éq.(2.16) en itérant une infinité de fois de manière récursive

$$\begin{aligned}
 \hat{T}_I(t, t_0) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \hat{T}_I(t', t_0) \\
 &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') + \frac{(-i)^2}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t'') \\
 &\quad + \frac{(-i)^3}{\hbar^3} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t'') \int_{t_0}^{t''} dt''' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t''') \\
 &\quad + \dots, \tag{A.1}
 \end{aligned}$$

qui itérée seulement au premier ordre donne

$$\hat{T}_I^{(1)}(t, t_0) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') + O(\delta \hat{\mathcal{H}}_I^2). \tag{A.2}$$

Dans l'éq.(A.1), les temps se succèdent ainsi par ordre chronologique : $t > t' > t'' > t''' > \dots$. Toutefois, ces variables temporelles sont muettes, mis à part t et t_0 définissant les bornes temporelles, et on peut les remanier en préservant l'ordre chronologique dans l'ordonnement. Pour ce faire, il faut définir un super-opérateur¹ d'ordonnement du temps \mathcal{T}_τ . Afin de donner un exemple concret, on remanie le terme représentant la deuxième itération du développement récursif de l'éq.(A.1) :

1. Le nom de super-opérateur lui est attribué car cet opérateur agit sur des opérateurs, les opérateurs $\hat{\mathcal{H}}_I$ en l'occurrence.

$$\begin{aligned}
\hat{T}_I^{(2)}(t, t_0) &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t'') \\
&\quad + O(\delta\hat{\mathcal{H}}_I^3) \\
&= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') \\
&\quad + \frac{1}{2!} \frac{1}{(i\hbar)^2} \left[\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t'') \theta(t' - t'') \right. \\
&\quad \left. + \int_{t_0}^t dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t'') \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') \theta(t'' - t') \right] + O(\delta\hat{\mathcal{H}}_I^3) \\
&= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') \\
&\quad + \frac{1}{2!} \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^t dt'' \mathcal{T}_\tau [\delta\hat{\mathcal{H}}_I(t') \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t'')] + O(\delta\hat{\mathcal{H}}_I^3).
\end{aligned} \tag{A.3}$$

) changement
de variable $t' \leftrightarrow t''$

En vertu de l'éq.(A.3), il est clair que la définition du super-opérateur d'ordonnancement agissant sur deux opérateurs d'interaction quelconque est la suivante :

$$\mathcal{T}_t [\hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t_2)] = \hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \zeta \hat{B}_I(t_2) \hat{A}_I(t_1) \theta(t_2 - t_1). \tag{A.4}$$

Si les opérateurs de l'éq.(A.4) sont des fermions, on a que $\zeta = -1$, et s'ils sont des bosons, on a plutôt que $\zeta = 1$. La généralisation de l'éq.(A.4) est donnée à l'éq.(5.16) de BRUUS et FLENSBERG [13]. À un ordre d'expansion infini ($\lim_{n \rightarrow \infty} O(\delta\hat{\mathcal{H}}_I^n)$), l'opérateur unitaire dans la représentation d'interaction (éq.(A.1)) s'écrit en fonction du super-opérateur \mathcal{T}_t , dans sa forme finale,

$$\begin{aligned}
\hat{T}_I(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n \mathcal{T}_t [\delta\hat{\mathcal{H}}_I(t_1) \cdots \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t_n)] \\
&= \mathcal{T}_t e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \delta\hat{\mathcal{H}}_I(t')}.
\end{aligned} \tag{A.5}$$

L'OPÉRATEUR DENSITÉ

Dans le but de dériver une expression pour l'opérateur densité, on doit faire intervenir la loi de la nature selon laquelle le mélange statistique physiquement valide et celui maximisant l'entropie $S[\hat{\rho}]$ définie comme

$$S[\hat{\rho}] = -k_B \text{Tr} [\hat{\rho} \ln \hat{\rho}], \quad (\text{B.1})$$

où k_B est la constante de Boltzmann. La trace $\text{Tr}[\dots]$ a la même définition qu'à l'éq.(2.23). On remarque de l'éq.(B.1) que l'entropie est une mesure logarithmique du nombre d'états pouvant être occupés par le système. Il faut toutefois maximiser l'entropie en ajoutant deux multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes sur l'opérateur densité $\hat{\rho}$:

$$\text{Max} [S[\hat{\rho}] - \zeta_1 \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{O}) - \zeta_0 \text{Tr} (\hat{\rho})]. \quad (\text{B.2})$$

On assume dans l'éq.(B.2) que la fonction $S[\hat{\rho}]$ est concave. Les multiplicateurs de Lagrange sont ζ_0 et ζ_1 . Les contraintes de l'éq.(B.2) sont que la trace de $\hat{\rho}$ est unitaire (ζ_0), d'après l'éq.(2.22), et que la moyenne d'une observable $\langle \hat{O} \rangle$ est constante (ζ_1), puisque le système est à l'équilibre thermodynamique. On utilise alors le principe variationnel pour accéder à la forme de $\hat{\rho}$ à partir des éqs.(B.1) et (B.2) :

$$\begin{aligned} -k_B \text{Tr} [\delta \hat{\rho} (\ln \hat{\rho} + \mathbb{1} + \zeta_1 \hat{O} + \zeta_0)] &= 0 \\ \implies \ln \hat{\rho} + \mathbb{1} + \zeta_1 \hat{O} + \zeta_0 &= 0 \\ \implies \hat{\rho} &= e^{-\zeta_1 \hat{O} - \zeta_0 - \mathbb{1}}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

La première contrainte agit sur ζ_0 :

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\hat{\rho}] &= \text{Tr} \left[e^{-\zeta_1 \hat{O} - \zeta_0 - \mathbb{1}} \right] \\ &= \text{Tr} \left[\frac{e^{-\zeta_1 \hat{O}}}{\mathcal{Z}} \right] = 1, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

où $\mathcal{Z} = e^{\zeta_0 + \mathbb{1}} = \text{Tr} [e^{-\zeta_1 \hat{O}}]$ est la fonction de partition du système auquel est associée $\hat{\rho}$. L'opérateur densité a donc la forme

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\zeta_1 \hat{O}}}{\mathcal{Z}}, \quad (\text{B.5})$$

où ζ_1 est proportionnel à l'inverse de la température $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$ et \hat{O} est remplacé par le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ normalisé par le potentiel chimique

μ parce qu'on travaille dans l'ensemble grand-canonique : $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{K} = \hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{n}$, où \hat{n} est l'opérateur de nombre de particule (densité). Par conséquent, $\hat{\rho}$ a la forme suivante :

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta\hat{K}}}{\mathcal{Z}}. \quad (\text{B.6})$$

LA DEUXIÈME QUANTIFICATION

La fonction de partition (éq.(2.32)) d'un système peut être exprimée en fonction des opérateurs d'échelle bosoniques ou fermioniques. Puisque les interactions électroniques constituent un des centres d'intérêt, on s'attarde au cas fermionique. On reprend encore une fois l'équation de Schrödinger (éq.(2.5)), mais cette fois-ci on y insère un ensemble complet d'états propres $\{|m\rangle\} \in \mathfrak{H}$ du hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ et on travaille en temps imaginaire :

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_m \langle \phi(t) | \partial_t |m\rangle \langle m | \phi(t) \rangle &= \sum_{m,m'} \langle \phi(t) | m' \rangle \langle m' | \hat{\mathcal{H}} | m \rangle \langle m | \phi(t) \rangle \\ \implies i\hbar \sum_m \phi_m^*(t) \partial_t \phi_m(t) &= \underbrace{\sum_{m,m'} \phi_m^*(t) \mathcal{H}_{m',m} \phi_m(t)}_{\mathcal{H}(\phi^*, \phi)}. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

On rappelle que l'énergie d'un système décrit par le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ dans l'état $|\phi\rangle$ est $\langle \phi | \hat{\mathcal{H}} | \phi \rangle$.

On constate alors que les fonctions d'onde ϕ et $i\hbar\phi^*$, interprétées comme champs fermioniques, sont conjuguées l'une de l'autre au même titre que les opérateurs de position \hat{R} et de quantité de mouvement \hat{P} :

$$\partial_t \phi_m(t) = \frac{\partial \mathcal{H}(\phi^*, \phi)}{i\hbar \partial \phi_m^*} \quad \partial_t \mathbf{r} = \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \quad (\text{C.2a})$$

$$i\hbar \partial_t \phi_m^*(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}(\phi^*, \phi)}{\partial \phi_m} \quad \partial_t \mathbf{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (\text{C.2b})$$

On peut donc promouvoir les fonctions d'onde ϕ et $i\hbar\phi^*$ au rang d'opérateurs $\hat{\phi}$ et $\hat{\phi}^\dagger$, respectivement, et cela constitue essentiellement la deuxième quantification. La règle d'anticommuation des opérateurs d'échelle est

$$\{\hat{\phi}(\mathbf{r}, t), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{r}', t')\} = i\hbar \delta(t - t') \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{C.3})$$

Il est donc clair qu'en fonction de ces opérateurs de champ fermionique — obéissant aux règles d'anticommuation — que la fonction de partition de l'éq.(2.32) devient, après la trace sur des états cohérents,

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\phi^\dagger, \phi] e^{-\int_0^\beta d\tau \int d^3r (\phi^\dagger \partial_\tau \phi + \mathcal{H}(\phi^\dagger, \phi))}. \quad (\text{C.4})$$

Les champs fermioniques $\phi^{(\dagger)}$ obéissent à l'algèbre de Grassmann et constituent les valeurs propres des opérateurs d'échelle $\hat{\phi}^{(\dagger)}$ lorsqu'on considère des états propres cohérents. Les états cohérents ainsi que l'algèbre de Grassmann sont expliqués à la [section H.1](#).

LA REPRÉSENTATION SPECTRALE AVEC INTERACTION

Une expression de la fonction spectrale décrivant un système interagissant est dérivée dans cette section de l'appendice, puisque l'éq.(2.48) n'est pas adéquate pour ces systèmes. Pour débiter, on sépare la *self-énergie* de la fonction de Green de l'éq.(2.43) en sa partie réelle et imaginaire. Il faut ensuite extraire la partie réelle de la fonction de Green résultante en vertu de l'éq.(2.51) pour obtenir

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\pi \left[(\omega - (E_n(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega)))^2 + (\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2 \right]}. \quad (\text{D.1})$$

On constate immédiatement de l'éq.(D.1) que la fonction spectrale est maximale lorsque $\omega - E_n(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = 0$. Les nouveaux pôles de la fonction de la fonction de Green sont les excitations associées aux quasiparticules. On suppose que ce maximum est atteint lorsque $\omega = \varepsilon_n(\mathbf{k})$, où $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ est la relation de dispersion des quasiparticules. En développant l'éq.(D.1) à proximité de ce maximum en fonction de ω jusqu'au premier ordre, on peut définir le poids spectral des quasiparticules

$$Z_{n,\mathbf{k}} \equiv \left(1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right)^{-1} \Big|_{\varepsilon_n(\mathbf{k})}, \quad (\text{D.2})$$

de telle sorte que le poids spectral de l'éq.(D.1) prend la forme :

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z_{n,\mathbf{k}}}{\pi} \times \left[\frac{-Z_{n,\mathbf{k}} \text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega)}{(\omega - E_n(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2 + (Z_{n,\mathbf{k}} \text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2} \right]. \quad (\text{D.3})$$

À partir de l'éq.(D.3), puisque la densité spectrale est une fonction strictement positive, on en déduit que $\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \leq 0$. En définissant le taux de diffusion des quasiparticules se propageant dans l'état propre de la portion sans interaction $\hat{\mathcal{H}}_0$ de $\hat{\mathcal{H}}$ comme suit

$$\Gamma_{n,\mathbf{k}}(\omega) \equiv -Z_{n,\mathbf{k}} \text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega),$$

le poids spectral électronique d'un système en interaction est, dans sa forme finale,

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}, \omega) = 2Z_{n,\mathbf{k}} \left[\frac{\Gamma_{n,\mathbf{k}}(\omega)}{(\omega - E_n(\mathbf{k}) - \text{Re}\Sigma(\mathbf{k}, \omega))^2 + \Gamma_{n,\mathbf{k}}^2(\omega)} \right] + 2\pi\mathcal{A}_{\text{inc}}. \quad (\text{D.4})$$

La forme du poids spectral des quasiparticules a la forme d'une Lorentzienne, et par soucis de normalisation de $\mathcal{A}_n(\mathbf{k}, \omega)$, il faut ajouter le facteur de 2π à l'éq.(D.4). Le poids de quasiparticule $Z_{n,\mathbf{k}} \leq 1$, de telle sorte que le reste du poids spectral est distribué dans la portion incohérente \mathcal{A}_{inc} .

LA FONCTION DE CORRÉLATION COURANT-COURANT

La fonction de corrélation courant-courant évaluant la réponse linéaire de la densité de courant paramagnétique d'un système soumis à un potentiel vecteur \mathbf{A} est dérivée. On débute la démonstration en portant l'éq.(2.17) dans l'éq.(2.64),

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \rangle_{n.e.} &= \left\langle \left(1 + i \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \right) \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \left(1 - i \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \right) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &= \langle \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \rangle + i \left\langle \int_{t_0}^t dt' \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &\quad - i \left\langle \int_{t_0}^t dt' \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}. \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

On suppose que la perturbation $\delta \hat{\mathcal{H}}$ du hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ couple la lumière à la matière au travers le vecteur potentiel électromagnétique \mathbf{A} . L'éq.(E.1) est directement liée à la rigidité superfluide. La rigidité superfluide a pour but de calculer les processus de relaxation de la fonction d'onde et comme il s'agit d'une quantité thermodynamique, la composante temporelle (le potentiel scalaire) du quadri-vecteur électromagnétique n'intervient pas. La perturbation, soit le couplage entre la densité de courant de charge $J_a^P(\mathbf{r}, t)$ et le vecteur potentiel $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, s'écrit :

$$\delta \hat{\mathcal{H}}_I(t') = - \int d^3 r' \hat{j}_i^P(\mathbf{r}', t') A_i(\mathbf{r}', t'). \quad (\text{E.2})$$

Dans ce cas, l'éq.(E.1) devient

$$\begin{aligned} \delta \langle \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \rangle &= i \int_{t_0}^t \int d^3 r' \langle \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \hat{j}_i^P(\mathbf{r}', t') \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} A_i(\mathbf{r}', t') \\ &\quad - i \int_{t_0}^t \int d^3 r' dt' \langle \hat{j}_i^P(\mathbf{r}', t') \hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t) \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} A_i(\mathbf{r}', t') \\ &= i \int_{t_0}^t \int d^3 r' \left\langle \left[\hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t), \hat{j}_i^P(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0} A_i(\mathbf{r}', t'). \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

On a utilisé le fait que les fluctuations de courant par rapport à l'équilibre sont décrites par $\delta \langle \hat{j}_a^P \rangle = \langle \hat{j}_a^P \rangle_{n.e.} - \langle \hat{j}_a^P \rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}$. L'éq.(E.3) est communément connue sous le nom de formule de Kubo. Le morceau essentiel de l'éq.(E.3) est la fonction de corrélation courant-courant :

$$\chi_{J_a J_i}^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{j}_a^P(\mathbf{r}, t), \hat{j}_i^P(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_{\hat{\mathcal{H}}_0}. \quad (\text{E.4})$$

Elle constitue la réponse paramagnétique du système électronique lors de la présence d'un potentiel vecteur. Toutefois, pour avoir l'invariance de jauge, il faut ajouter la contribution diamagnétique, soit le premier terme de l'(2.70) associée au courant diamagnétique \mathbf{J}_D . La fonction de corrélation éq.(E.4) est retardée puisque les systèmes physiques sont causals.

LA REPRÉSENTATION MIXTE

Les termes de saut inter-amas $\delta t(\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n)$ sont dérivés pour un amas carré de dimension 2×2 . La figure 5.2 fait référence à ces calculs : le vecteur du super-réseau $\tilde{\mathbf{r}}_1 = 2a\hat{\mathbf{x}}$, $\tilde{\mathbf{r}}_2 = 2a\hat{\mathbf{y}}$ et $\tilde{\mathbf{r}}_3 = 2a\hat{\mathbf{x}} + 2a\hat{\mathbf{y}}$. La collection de termes de saut inter-amas est écrite ci-dessous ¹

$$t_{ij}^{2a\hat{\mathbf{x}}} = \begin{matrix} \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},1,\sigma}^\dagger \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},2,\sigma}^\dagger \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},3,\sigma}^\dagger \\ \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},4,\sigma}^\dagger \end{matrix} \begin{bmatrix} \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},1,\sigma} & \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},2,\sigma} & \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},3,\sigma} & \hat{c}_{\tilde{\mathbf{k}},4,\sigma} \\ t'' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 & 0 & 0 \\ t e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} & t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} & t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} & 0 \\ 0 & 0 & t'' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} & 0 \\ t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} & 0 & t e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} & t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a} \end{bmatrix} \quad (\text{F.1a})$$

$$t_{ij}^{2a\hat{\mathbf{y}}} = \begin{bmatrix} t'' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 & 0 \\ t e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & t'' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 \\ t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & t e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 & t'' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} \end{bmatrix} \quad (\text{F.1b})$$

$$t_{ij}^{-2a\hat{\mathbf{x}}-2a\hat{\mathbf{y}}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a - 2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{F.1c})$$

$$t_{ij}^{-2a\hat{\mathbf{x}}+2a\hat{\mathbf{y}}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t' e^{-2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a + 2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{F.1d})$$

$$t_{ij}^{2a\hat{\mathbf{x}}-2a\hat{\mathbf{y}}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t' e^{2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a - 2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{F.1e})$$

$$t_{ij}^{2a\hat{\mathbf{x}}+2a\hat{\mathbf{y}}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & t' e^{2i\tilde{\mathbf{k}}_m^x a + 2i\tilde{\mathbf{k}}_m^y a} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{F.1f})$$

$$(\text{F.1g})$$

cf. éq.(4.2) du chapitre 4.

Il doit avoir 8 différents termes de saut inter-amas, puisqu'il y a 8 amas périphériques à celui positionné à $\tilde{\mathbf{r}}_0$ (cf. fig.5.2).

1. Il ne faut pas oublier d'ajouter ces termes à t_c .

L'hermiticité du hamiltonien de Hubbard entraîne que $\left(t_{ij}^{\Delta}\right)^{*} = t_{ji}^{\Delta}$, donc $t_{ij}^{-2a\hat{x},\hat{y}} = \left(t_{ji}^{-2a\hat{x},\hat{y}}\right)^{*}$, tel que convenu d'après l'éq.(F.1). La somme de l'ensemble des termes de l'éq.(F.1) constitue le terme $\delta t(\tilde{\mathbf{r}}_m - \tilde{\mathbf{r}}_n)$ de l'éq.(4.2) représenté dans la zone de Brillouin originale, soit le terme $\delta t(\tilde{\mathbf{k}})$ de l'éq.(4.7).

MONTE-CARLO QUANTIQUE EN TEMPS CONTINU CT-HYB

Dans cette section, on démontre la forme finale (4.23) associée à la fonction de partition échantillonnée avec l'algorithme CT-HYB [25].

On redéfinit $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$ de l'éq.(4.22) comme

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}} = \sum_{i\alpha,\sigma} \left(\theta_{i\alpha,\sigma} \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{\alpha,\sigma} + \theta_{i\alpha,\sigma}^* \hat{c}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{d}_{i,\sigma} \right) \equiv \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger.$$

Puisque $\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}$ consiste en le modèle de Hubbard et qu'il s'agit d'une interaction de nature densité-densité, il conserve le nombre de particules sur l'impureté. Par conséquent, parmi l'ensemble des combinaisons de termes issues de l'éq.(4.22), seuls ceux ayant un nombre égal de $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$ et de $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger$ engendrent une trace non-nulle. Donc, étant donné que seuls les ordres de développement paires en k donnent des résultats non-nuls, on associe par défaut un ordre de développement paire $k \rightarrow 2k$ ($k \geq 0$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_c = & \sum_k \frac{1}{(2k)!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_{2k} \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}} + \hat{\mathcal{H}}_b)} \mathcal{T}_\tau \left(\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_{2k}) + \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau_{2k}) \right) \right. \\ & \left. \times \left(\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_{2k-1}) + \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau_{2k-1}) \right) \cdots \left(\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_1) + \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau_1) \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{G.1})$$

Étant donné un ordre d'expansion k , il existe $(2k)!$ permutations, donc $(2k)!$ termes différents lorsqu'on multiplie les développements de $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$ entre eux dans l'éq.(G.1). Or, parmi ces $(2k)!$ termes figurent $k!$ termes pairs ainsi que $k!$ termes impairs. Le nombre de termes pairs (non-nuls) est donc $\frac{(2k)!}{k!k!}$ si l'on ne tient pas compte de l'ordre d'apparition des éléments ($\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}$ et $\hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger$) constituant les termes impairs et pairs. Ne comportant que les termes de puissance paire, l'éq.(G.1) devient

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_c = & \sum_k \frac{1}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \frac{1}{k!} \int_0^\beta d\tau'_1 \cdots \int_0^\beta d\tau'_k \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}} + \hat{\mathcal{H}}_b)} \mathcal{T}_\tau \times \right. \\ & \left. \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_k) \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_k) \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_{k-1}) \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_{k-1}) \cdots \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}(\tau_1) \hat{\mathcal{H}}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_1) \right]. \end{aligned} \quad (\text{G.2})$$

On peut alors réécrire l'éq.(G.2) comme :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_c = & \sum_k \frac{1}{(k!)^2} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \int_0^\beta d\tau'_1 \cdots \int_0^\beta d\tau'_k \times \\ & \sum_\sigma \sum_{\substack{i_1 \cdots i_k \\ \alpha_1 \cdots \alpha_k}} \sum_{\substack{i'_1 \cdots i'_k \\ \alpha'_1 \cdots \alpha'_k}} \theta_{i_k \alpha_k, \sigma} \theta_{i'_k \alpha'_k, \sigma}^* \cdots \theta_{i_1 \alpha_1, \sigma} \theta_{i'_1 \alpha'_1, \sigma}^* \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}} + \hat{\mathcal{H}}_b)} \mathcal{T}_\tau \times \right. \\ & \left. \hat{d}_{i_k}(\tau_k) \hat{c}_{\alpha_k}^\dagger(\tau_k) \hat{c}_{\alpha'_k}(\tau'_k) \hat{d}_{i'_k}^\dagger(\tau'_k) \cdots \hat{d}_{i_1}(\tau_1) \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{\alpha'_1}(\tau'_1) \hat{d}_{i'_1}^\dagger(\tau'_1) \right]. \quad (\text{G.3}) \end{aligned}$$

On constate que la trace est effectuée à la fois sur les opérateurs $\hat{d}^{(\dagger)}$ et $\hat{c}^{(\dagger)}$. On est toutefois en mesure de séparer la trace en deux pour que chacune agisse exclusivement sur chacun de ces opérateurs. Alors,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_c = & \sum_k \frac{1}{(k!)^2} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_k \int_0^\beta d\tau'_1 \cdots \int_0^\beta d\tau'_k \times \\ & \sum_\sigma \sum_{\substack{i_1 \cdots i_k \\ \alpha_1 \cdots \alpha_k}} \sum_{\substack{i'_1 \cdots i'_k \\ \alpha'_1 \cdots \alpha'_k}} \theta_{i_k \alpha_k, \sigma} \theta_{i'_k \alpha'_k, \sigma}^* \cdots \theta_{i_1 \alpha_1, \sigma} \theta_{i'_1 \alpha'_1, \sigma}^* \times \\ & \text{tr} \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}} \mathcal{T}_\tau \hat{d}_{i_k}(\tau_k) \hat{d}_{i'_k}^\dagger(\tau'_k) \cdots \hat{d}_{i_1}(\tau_1) \hat{d}_{i'_1}^\dagger(\tau'_1) \right] \times \\ & \text{tr} \left[e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_b} \mathcal{T}_\tau \hat{c}_{\alpha_k}^\dagger(\tau_k) \hat{c}_{\alpha'_k}(\tau'_k) \cdots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{\alpha'_1}(\tau'_1) \right]. \quad (\text{G.4}) \end{aligned}$$

Puisque les électrons $\hat{c}^{(\dagger)}$ sont non-interagissants, on peut employer le théorème de Wick. La fonction de partition du bain \mathcal{Z}_b s'écrit

$$\mathcal{Z}_b = \prod_\sigma \prod_\gamma \left(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\gamma, \sigma} - \mu)} \right).$$

Dans l'éq.(G.4), on retrouve le déterminant suivant :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\mathcal{Z}_b} \text{Tr} \left[\mathcal{T}_\tau e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_b} \sum_{\substack{\alpha_1 \cdots \alpha_k \\ \alpha'_1 \cdots \alpha'_k}} \theta_{i_k \alpha_k, \sigma} \theta_{i'_k \alpha'_k, \sigma}^* \cdots \theta_{i_1 \alpha_1, \sigma} \theta_{i'_1 \alpha'_1, \sigma}^* \right. \\ & \left. \times \hat{c}_{\alpha_k}^\dagger(\tau_k) \hat{c}_{\alpha'_k}(\tau'_k) \cdots \hat{c}_{\alpha_1}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{\alpha'_1}(\tau'_1) \right] \\ & = \det \Gamma_{\substack{i_1 \cdots i_k \\ i'_1 \cdots i'_k}}. \quad (\text{G.5}) \end{aligned}$$

On est donc en mesure d'écrire la fonction de partition complète de l'amas \mathcal{Z}_c :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_c = & \mathcal{Z}_b \sum_k \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_k \int_0^\beta d\tau'_1 \cdots d\tau'_k \sum_{\substack{i_1 \cdots i_k \\ i'_1 \cdots i'_k}} \text{tr} \left[\mathcal{T}_\tau e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{loc}}} \hat{d}_{i_k}(\tau_k) \hat{d}_{i'_k}^\dagger(\tau'_k) \right. \\ & \left. \times \cdots \hat{d}_{i_1}(\tau_1) \hat{d}_{i'_1}^\dagger(\tau'_1) \right] \det \Gamma_{\substack{i_1 \cdots i_k \\ i'_1 \cdots i'_k}}. \quad (\text{G.6}) \end{aligned}$$

INTÉGRALE DE CHEMIN GAUSSIENNE

L'objet de cette section de l'appendice est d'aboutir à une expression utile et compacte de l'énergie libre sans corrections de vertex $\mathcal{F}[\mathcal{G}]$ pouvant décrire toute fonction de corrélation à une particule. Pour ce faire, on considère une action fermionique quadratique en opérateur de champ \hat{d}_γ , avec γ désignant une collection de nombres quantiques associés aux degrés de liberté internes du champ quantique, i. e. le spin σ , la quantité de mouvement \mathbf{k} , l'orbitale atomique ν , etc. Ces opérateurs de champ peuvent bien-sûr être des spineurs existant dans un espace plus abstrait, i. e. l'espace d'isospin de la théorie BCS, pourvu que les opérateurs en question soient assujettis aux règles d'anticommution et que le hamiltonien soit hermitique. On présente dans un premier temps l'algèbre anticommutative de Grassmann afin de définir par la suite les états cohérents fermioniques¹. Ces états cohérents fermioniques s'avèrent très utiles, puisque ces derniers sont des états propres aux opérateurs de champ fermioniques ; les quanta d'excitation du champ sont donc des états propres dans la base des états cohérents.

ALGÈBRE DE GRASSMANN ET ÉTAT COHÉRENT

On énonce les propriétés les plus importantes de l'algèbre de Grassmann, que l'on invoquera dans d'éventuelles démarches mathématiques. Plusieurs ouvrages couvrent déjà ce sujet de manière exhaustive [18, 75, 86]. Le lecteur ou la lectrice est convié(e) à se référer à [75] afin d'approfondir sa compréhension. Le domaine d'applicabilité de cette algèbre dans le domaine de la physique de la matière condensée théorique se restreint principalement à celui de la description d'état cohérent fermionique. L'aspect particulier de cette algèbre repose sur son arithmétique anticommutative, comme le fait que les éléments de cette algèbre ζ et η anticommulent :

$$\zeta\eta = -\eta\zeta. \quad (\text{H.1})$$

Les règles de groupe auxquelles sont assujettis les nombres de Grassmann sont les mêmes que celles définissant l'algèbre générale, si l'on omet l'anticommutativité : l'algèbre de Grassmann est munie d'une loi de composition interne, d'un élément neutre et est associative. L'éq.(H.1) implique que $\eta * \eta = -\eta * \eta \implies \eta^2 = 0$ et, de manière équivalente, que $(\eta + \zeta)^2 = 0$. Ainsi, il s'ensuit que la fonction de Grassmann $f(\eta)$ la plus générale doive être linéaire, soit $f(\eta) = a + b\eta$,

Tout nombre de Grassmann η possède un élément conjugué η^\dagger , indépendants l'un l'autre. η ainsi que η^\dagger sont doués des mêmes qualités. Autrement dit, l'algèbre est non-abélienne.

1. Cette section s'inspire particulièrement de [75].

où $a, b \in \mathbb{C}$ sont des nombres éléments d'une algèbre commutative, i. e., l'algèbre générale.

Il faut maintenant définir les opérations d'intégration ainsi que de dérivation sur des fonctions grassmanniennes. On doit pouvoir, par définition d'une intégrale, effectuer un changement de variable :

$$\begin{aligned} \int d\eta f(\eta + \zeta) &= \int d\eta f(\eta) \\ \implies \int d\eta a + b(\eta + \zeta) &= \int d\eta a + b\eta \quad \curvearrowright \begin{array}{l} \text{changement de variable} \\ d(\eta + \zeta) = d\eta \end{array} \\ \implies \int d\eta b\zeta &= 0. \end{aligned} \quad (\text{H.2})$$

Donc, de l'éq.(H.2), on a que

Résultat important #1

$$\int d\eta = 0.$$

(H.3)

L'étude de la dérivée d'une fonction grassmannienne est plus directe :

$$\frac{df(\eta)}{d\eta} = \frac{d(a + b\eta)}{d\eta} = b. \quad (\text{H.4})$$

On utilise maintenant les résultats de l'éq.(H.2) et de l'éq.(H.4) pour montrer que

$$\int d\eta \frac{df(\eta)}{d\eta} = \int d\eta b = 0. \quad (\text{H.5})$$

Toutefois, il est possible de définir une fonction plus générale $f(\eta, \eta^\dagger) = k + a\eta + b\eta^\dagger + c\eta\eta^\dagger$. Dans ce cas, la dérivée totale s'écrit

$$\frac{\partial f(\eta, \eta^\dagger)}{\partial \eta} + \frac{\partial f(\eta, \eta^\dagger)}{\partial \eta^\dagger} = a + c\eta^\dagger + b - c\eta. \quad (\text{H.6})$$

Si maintenant on intègre l'expression de l'éq.(H.6), en vertu de l'éq.(H.5) et de l'éq.(H.3), on devrait obtenir un résultat nul :

$$\begin{aligned} &\int d\eta^\dagger \frac{\partial f(\eta, \eta^\dagger)}{\partial \eta} + \int d\eta \frac{\partial f(\eta, \eta^\dagger)}{\partial \eta^\dagger} \\ &= \int d\eta^\dagger [a + c\eta^\dagger] + \int d\eta [b - c\eta] \\ &= c \int d\eta^\dagger \eta^\dagger - c \int d\eta \eta \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{H.7})$$

On remarque que, pour que l'éq.(H.7) tienne, il suffit que

Résultat important #2

$$\int d\eta \eta = \int d\eta^\dagger \eta^\dagger = 1.$$

(H.8)

Ainsi, la dérivée et l'intégrale sont les mêmes opérations, i. e., $\partial_\eta \eta = \int d\eta \eta = 1$. On ajoute à cela le fait que tout nombre de Grassmann anticommute avec tout opérateur de champ fermionique, i. e., $\hat{d}_\gamma \eta = -\eta \hat{d}_\gamma$. Bien entendu, les nombres de Grassmann commutent avec les nombres ordinaires.

Comme mentionné précédemment, un état cohérent $|d_\gamma\rangle$ ($\langle d_\gamma|$) est un état propre aux opérateurs d'échelle \hat{d}^\dagger (\hat{d}). Cela signifie qu'on a l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\begin{aligned} \hat{d}_\gamma |d_\gamma\rangle &= d_\gamma |d_\gamma\rangle \\ \langle d_\gamma| \hat{d}_\gamma^\dagger &= \langle d_\gamma| d_\gamma^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{H.9})$$

où d_γ (d_γ^\dagger) est la valeur propre de \hat{d}_γ^\dagger (\hat{d}_γ). Partant de l'état du vide $|0\rangle$, on peut définir l'état cohérent $|d_\gamma\rangle$ ($\langle d_\gamma|$) afin qu'il respecte l'éq.(H.9), comme suit :

$$\begin{aligned} |d_\gamma\rangle &= e^{\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma} |0\rangle = \left(1 + \hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma\right) |0\rangle \\ \langle d_\gamma| &= \langle 0| e^{d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma} = \langle 0| \left(1 + d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma\right), \end{aligned} \quad (\text{H.10})$$

On considère toujours un nombre de Grassmann d_γ indépendant de son conjugué d_γ^\dagger .

de telle sorte que l'application de l'opérateur d'annihilation (création) sur un état cohérent (état cohérent conjugué) donne, utilisant les faits que $\{\hat{d}_\gamma, \hat{d}_{\gamma'}^\dagger\} = \delta_{\gamma, \gamma'}$ et que, par exemple, $\hat{d}_\gamma d_\gamma = -d_\gamma \hat{d}_\gamma$ et $d_\gamma^2 = 0$,

$$\begin{aligned} \hat{d}_\gamma |d_\gamma\rangle &= \hat{d}_\gamma \left(1 + \frac{(\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma)}{1!} + \frac{(\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma)^2}{2!} + \dots\right) |0\rangle \\ &= \left(d_\gamma + 2d_\gamma \frac{(\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma)}{2!} + 3d_\gamma \frac{(\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma)^2}{3!} + \dots\right) |0\rangle \\ &= d_\gamma \left(1 + \frac{(\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma)}{1!} + \frac{(\hat{d}_\gamma^\dagger d_\gamma)^2}{2!} + \dots\right) |0\rangle \\ &= d_\gamma |d_\gamma\rangle \\ \langle d_\gamma| \hat{d}_\gamma^\dagger &= \langle 0| \left(1 + \frac{(d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma)}{1!} + \frac{(d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma)^2}{2!} + \dots\right) \hat{d}_\gamma^\dagger \\ &= \langle 0| \left(d_\gamma^\dagger + 2\frac{(d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma)}{2!} d_\gamma^\dagger + 3\frac{(d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma)^2}{3!} d_\gamma^\dagger + \dots\right) \\ &= \langle 0| \left(1 + \frac{(d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma)}{1!} + \frac{(d_\gamma^\dagger \hat{d}_\gamma)^2}{2!} + \dots\right) d_\gamma^\dagger \\ &= \langle d_\gamma| d_\gamma^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{H.11})$$

Cela justifie donc l'apparition des nombres de Grassmann dans les actions définissant des systèmes fermioniques. Cela justifie de plus la relation de dispersion surcomplète des états cohérents fermioniques :

$$\begin{aligned} \mathbb{1} &= |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| = \sum_{\gamma} \int dd_{\gamma}^{\dagger} dd_{\gamma} |d_{\gamma}\rangle \langle d_{\gamma}| + d_{\gamma} |d_{\gamma}\rangle \langle d_{\gamma}| d_{\gamma}^{\dagger} \\ &= \sum_{\gamma} \int dd_{\gamma}^{\dagger} dd_{\gamma} e^{-d_{\gamma}^{\dagger} d_{\gamma}} |d_{\gamma}\rangle \langle d_{\gamma}|, \end{aligned}$$

où $|0\rangle$ représente l'état vide et $|1\rangle$ l'état rempli.

FONCTIONNELLE D'ÉNERGIE LIBRE

On reprend l'objectif principal de l'Appendice H, celui étant de déterminer la forme de l'expression de l'énergie libre sans correction de vertex en tant que fonctionnelle de fonction de Green. Pour ce faire, on suppose alors un hamiltonien quadratique complètement général de la forme $\hat{\mathcal{H}} = \hat{d}_{\gamma}^{\dagger} H_{\gamma\delta} \hat{d}_{\delta}$, où $H_{\gamma\delta}$ consiste en une matrice. L'action correspondante S s'écrit alors :

$$S = \int_0^{\beta} d\tau d_{\gamma}^{\dagger} (\partial_{\tau} + H_{\gamma\delta}) d_{\delta}, \quad (\text{H.12})$$

où les opérateurs fermioniques sont transmutés par leur nombre de Grassmann respectif $\hat{d}^{\dagger} (\hat{d}) \rightarrow d^{\dagger} (d)$; ceux-ci correspondent à la valeur propre de l'état cohérent fermionique. Les nombres de Grassmann ont une dépendance en temps imaginaire héritant de celle des opérateurs d'échelle et $d_{\gamma} (d_{\delta}^{\dagger}) \rightarrow d_{\gamma}(\tau) (d_{\delta}^{\dagger}(\tau))$. Puisque les opérateurs fermioniques sont antipériodiques en temps imaginaire, les fonctions grassmanniennes le sont également $d_{\gamma}(\tau) (d_{\gamma}^{\dagger}(\tau)) = -d_{\gamma}(\tau + \beta) (-d_{\gamma}^{\dagger}(\tau + \beta))$, signifiant que les fonctions grassmanniennes peuvent se décomposer comme suit :

$$d_{\gamma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_{\gamma}(iv_n) e^{-iv_n \tau}. \quad (\text{H.13})$$

On est alors en mesure de discrétiser le temps imaginaire, et donc discrétiser l'expression pour l'action (H.12) :

$$S = \sum_{\substack{\gamma, \tau \\ \delta, \tau'}} d_{\gamma}^{\dagger}(\tau) M_{\gamma\delta}(\tau, \tau') d_{\delta}(\tau'), \quad (\text{H.14})$$

où $M_{\gamma\delta}(\tau, \tau')$ peut être conçue comme une matrice :

$$M_{\gamma\delta}(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') (\partial_{\tau'} d_{\gamma, \delta} + H_{\gamma\delta}). \quad (\text{H.15})$$

On peut effectuer une transformée de Fourier sur l'éq.(H.15) afin de passer du temps imaginaire τ aux fréquences de Matsubara $i\omega_n$ en employant l'éq.(H.13). L'action (H.12) devient alors

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{n''=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_{\gamma}^{\dagger}(iv_{n'}) e^{iv_{n'}\tau} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} (\partial_{\tau'} \delta_{\gamma,\delta} + H_{\gamma\delta}) \times \\
 &\quad d_{\delta}(i\omega_n) e^{-iv_{n''}\tau'} \\
 &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{n''=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\tau,\tau'} \sum_{\gamma\delta} d_{\gamma}^{\dagger}(iv_{n'}) e^{iv_{n'}\tau} e^{-i\omega_n(\tau-\tau')} \times \\
 &\quad (-iv_{n''}\delta_{\gamma,\delta} + H_{\gamma\delta}) d_{\delta}(iv_{n''}) e^{-iv_{n''}\tau'} \\
 &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{n''=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\tau} e^{(iv_{n'}-i\omega_n)\tau} \sum_{\tau'} e^{(i\omega_n-iv_{n''})\tau'} \sum_{\gamma\delta} d_{\gamma}^{\dagger}(iv_{n'}) \times \\
 &\quad (-iv_{n''}\delta_{\gamma,\delta} + H_{\gamma\delta}) d_{\delta}(iv_{n''}) \\
 &= \frac{1}{\beta^2} \sum_{n''=-\infty}^{\infty} \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \beta_{\delta_{iv_{n'},i\omega_n}} \beta_{\delta_{i\omega_n,iv_{n''}}} \sum_{\gamma\delta} d_{\gamma}^{\dagger}(iv_{n'}) \times \\
 &\quad (-iv_{n''}\delta_{\gamma,\delta} + H_{\gamma\delta}) d_{\delta}(iv_{n''}) \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma\delta} d_{\gamma}^{\dagger}(i\omega_n) \underbrace{(-i\omega_n\delta_{\gamma,\delta} + H_{\gamma\delta})}_{M_{\gamma\delta}(i\omega_n)} d_{\delta}(i\omega_n). \tag{H.16}
 \end{aligned}$$

On peut alors interpréter l'expression de l'action (H.16) comme une équation matricielle. La fonction de partition du système \mathcal{Z} devient, avec l'éq.(H.16) :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D} [d^{\dagger}, d] \exp \left[- \int_0^{\beta} d\tau d_{\gamma}^{\dagger} (\partial_{\tau} \delta_{\gamma,\delta} + H_{\gamma\delta}) d_{\delta} \right] \\
 &= \iint \prod_{\alpha} da_{\alpha}^{\dagger} da_{\alpha} \exp \left[- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\gamma\delta} d_{\gamma}^{\dagger}(i\omega_n) M_{\gamma\delta} d_{\delta}(i\omega_n) \right]. \tag{H.17}
 \end{aligned}$$

On désire maintenant transformer l'expression (H.17) dans une base où la matrice $M_{\gamma\delta}$ est diagonale. Pour ce faire, on suppose que les vecteurs $d_{\gamma}^{\dagger}(i\omega_n) = a_{\alpha}^{\dagger}(i\omega_n) U_{\alpha\gamma}^{\dagger}$ et $d_{\delta}(i\omega_n) = U_{\delta\alpha'} a_{\alpha'}(i\omega_n)$, où les matrices unitaires U diagonalisent $M_{\gamma\delta}$:

$$d_{\gamma}^{\dagger} M_{\gamma\delta} d_{\delta} = a_{\alpha}^{\dagger} U_{\alpha\gamma}^{\dagger} M_{\gamma\delta} U_{\delta\alpha'} a_{\alpha'} = a_{\alpha}^{\dagger} m_{\alpha} \delta_{\alpha,\alpha'} a_{\alpha'}. \tag{H.18}$$

Pour alléger la notation, les dépendances redondantes en $i\omega_n$ dans l'éq.(H.18) ont été omises. Les valeurs propres de $M_{\gamma\delta}$ sont m_{α} . Le jacobien d'une transformation unitaire consiste en le déterminant de la matrice identité ($\det[U_{\delta\alpha} U_{\alpha\gamma}^{\dagger}] = \det[\mathbb{1}] = 1$) signifiant que cette transformation ne change rien à l'intégrale de chemin gaussienne :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} &= \iint \prod_{\lambda} da_{\lambda}^{\dagger} da_{\lambda} \times \frac{\delta [d^{\dagger}, d]}{\delta [a^{\dagger}, a]} \exp \left[- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}(i\omega_n) m_{\alpha} a_{\alpha}(i\omega_n) \right] \\
 &= \iint \prod_{\lambda} da_{\lambda}^{\dagger} da_{\lambda} \times \begin{vmatrix} U_{\lambda\gamma}^{\dagger} & 0 \\ 0 & U_{\delta\lambda} \end{vmatrix} \exp \left[- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}(i\omega_n) m_{\alpha} a_{\alpha}(i\omega_n) \right] \\
 &= \prod_{\lambda} \iint da_{\lambda}^{\dagger} da_{\lambda} \exp \left[- \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}(i\omega_n) m_{\alpha} a_{\alpha}(i\omega_n) \right]. \tag{H.19}
 \end{aligned}$$

Il s'agit alors d'une intégrale gaussienne qui peut être évaluée en vertu de la [section H.1](#) :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \prod_{\lambda} \iint da_{\lambda}^{\dagger} da_{\lambda} \left[1 - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger}(i\omega_n) m_{\alpha} a_{\alpha}(i\omega_n) \right] \\ &= \prod_{\lambda} m_{\lambda}. \end{aligned} \quad (\text{H.20})$$

On a utilisé les règles de sélection dans l'éq.(H.20). Or,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \prod_{\alpha} m_{\alpha} = \det [M_{\gamma\delta}] = \det [\partial_{\tau}\delta_{\gamma\delta} + H_{\gamma\delta}] \\ &\stackrel{T.F.}{=} \det [-\mathcal{G}(i\omega_n)^{-1}]. \end{aligned} \quad (\text{H.21})$$

De cette façon, puisque l'énergie libre $\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}$, on a :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}] = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\det [-\mathcal{G}(i\omega_n)^{-1}] \right], \quad (\text{H.22})$$

faisant en sorte que la fonctionnelle d'énergie libre sans correction de vertex adaptée aux fonctions de corrélations à une particule s'écrit

Énergie libre

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}] = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\ln \left[\begin{array}{c} -\mathcal{G}^{-1} \quad -1 \\ -\mathcal{G}_{\infty}(i\omega_n) \end{array} \right] \right].$$

(H.23)

La trace $\text{Tr}[\dots]$ comprend la somme sur toutes les variables définissant la fonction de Green, i. e., les fréquences de Matsubara $i\omega_n$, la quantité de mouvement \mathbf{k} et le spin σ , ainsi que la trace sur l'espace de Nambu² tr , de telle sorte que $\text{Tr}[\dots] \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n \sum_{\sigma} \text{tr}[\dots]$. Il est possible de sommer sur les fréquences de Matsubara dans l'éq.(H.22) dans le plan complexe en étendant les intégrales de contour jusqu'à l'infini et en employant le théorème des résidus. Toutefois, la normalisation \mathcal{G}_{∞} est nécessaire afin que le contour de l'intégral à l'infini ne puisse contribuer et elle s'écrit :

$$-\mathcal{G}_{\infty}(i\omega_n)^{-1} = \lim_{E \rightarrow \infty} (E - i\omega_n). \quad (\text{H.24})$$

Cette constante est discutée au chapitre 68.2 de [75]. En dérivant l'énergie libre par rapport au potentiel vecteur, le terme (H.24) ne contribue pas et c'est la raison pour laquelle cette normalisation n'est mentionnée qu'ici. On suppose dans cet exercice que $H_{\gamma\delta} \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}}$, autrement dit que le hamiltonien passe d'une fonction matricielle à une fonction scalaire. Également, étant donnée l'antipériodicité des fonctions de Green

². Cet espace peut être de dimension arbitraire. On traite en particulier les espaces de Nambu de dimensions 2, 4 et 8.

fermioniques en temps imaginaire, la sommation sur les fréquences de Matsubara peut se restreindre à une sommation avec $\tau = 0^-$, de telle sorte que

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\ln \left[\frac{-\mathcal{G}(i\omega_n)^{-1}}{-\mathcal{G}_\infty(i\omega_n)^{-1}} \right] \right] \\ &= -\frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}, n} \left[\ln(\epsilon_{\mathbf{k}} - i\omega_n) - \lim_{E \rightarrow \infty} \ln(E - i\omega_n) \right] e^{i\omega_n 0^+}. \end{aligned} \quad (\text{H.25})$$

Puisque que l'on étend l'intégrale de contour dans le sens antihoraire contournant la discontinuité le long de l'axe réel allant de $\omega = \epsilon_{\mathbf{k}}$ à $\omega \rightarrow +\infty$, on accumule une phase de 2π traversant la discontinuité. Tout d'abord, on réécrit l'éq.(H.25) en employant la fonction de convergence appropriée³ aux fermions $f(z)$, avec $z \equiv i\omega_n$, ne changeant pas la valeur des résidus aux pôles :

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \oint \frac{dz}{2\pi i} f(z) \left[\ln(\epsilon_{\mathbf{k}} - z) - \lim_{E \rightarrow \infty} \ln(E - z) \right]. \quad (\text{H.26})$$

Une discontinuité évidente apparaît lorsque $z = \epsilon_{\mathbf{k}}$. Le terme à l'équation (H.24) permet d'étendre le contour à l'infini. Pour contourner la discontinuité, on n'intègre pas directement sur l'axe réel, mais on repousse infinitésimalement les intégrales de contour dans les plans complexes inférieur et supérieur :

$$\mathcal{F} = -\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} f(\omega) [\ln(\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega + i\eta) - \ln(\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega - i\eta)]. \quad (\text{H.27})$$

De plus, de manière générale, on a que

$$e^{\ln z} = z = e^{\ln z + 2\pi i k} \Rightarrow \ln z = \ln z + 2\pi i k, \quad (\text{H.28})$$

où $k \in \mathbb{Z}$. Ainsi,

$$\ln(\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega + i\eta) - \ln(\epsilon_{\mathbf{k}} - \omega - i\eta) = 2\pi i \Theta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (\text{H.29})$$

où la fonction de Heaviside ne fait qu'assurer que $\omega \geq 0$, étant le domaine de validité de la fonction logarithmique, et $k=1$, puisqu'une seule *révolution* de l'intégrale de contour autour de la discontinuité suffit. Par conséquent, l'éq.(H.27) devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{\epsilon_{\mathbf{k}}}^{\infty} d\omega f(\omega) = \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{\epsilon_{\mathbf{k}}}^{\infty} d\omega \frac{\partial \ln(1 + e^{-\beta\omega})}{\partial \omega} \\ &= \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\ln(1 + e^{-\beta\omega}) \right] \Big|_{\epsilon_{\mathbf{k}}}^{\infty} = -\frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 + e^{-\beta\epsilon_{\mathbf{k}}}). \end{aligned} \quad (\text{H.30})$$

L'éq.(H.30) donne bien le résultat d'énergie libre auquel on s'attend d'un système fermionique sans interaction.

3. Voir [75] pour plus de détails.

L'ÉLECTRODYNAMIQUE QUANTIQUE SCALAIRE

L'action effective adéquate pour décrire un condensat de paires de Cooper provient de l'électrodynamique quantique scalaire (SQED). La théorie SQED est l'équivalent de l'électrodynamique quantique (QED), mais pour des champs scalaires complexes, donc pour des bosons chargés. L'électrodynamique quantique (QED) ordinaire décrit plutôt le couplage du champ électromagnétique aux fermions, à la matière. La SQED est la première théorie ayant réussi à concilier la mécanique quantique et la théorie de la relativité restreinte. Il existe des particules décrites par un champ scalaire complexe, donc de spin 0, pouvant se coupler au champ électromagnétique, et parmi ces dernières s'illustrent les paires de Cooper présentes dans les supraconducteurs. Les paires de Cooper ayant une symétrie d'appariement de type singulet constituent des bosons composites, puisque les électrons appariés ont des spins opposés. Ces bosons composites portent une charge élémentaire $e^* = 2e$. La charge e^* est prise positive, par opposition à la charge électrique de la paire de Cooper $-e^*$ qui est négative. Les équations du mouvement de paires de Cooper couplées au champ électromagnétique sont décrites par le lagrangien de la théorie SQED. On peut dériver l'action de Ginzburg-Landau du paramètre d'ordre supraconducteur à partir de l'action décrivant la théorie SQED et on le montre brièvement. L'action de la théorie SQED s'écrit [26, 62]¹ :

$$S[\phi, \phi^\dagger, A] = \int d^4x \left[\underbrace{\frac{\hbar^2 c^2}{2} (\mathcal{D}_\mu \phi)^\dagger \mathcal{D}^\mu \phi + \frac{m^2 c^4}{2} \phi \phi^\dagger}_{\mathcal{L}_{KG}} - \frac{u}{4!} (\phi \phi^\dagger)^2 - \underbrace{\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}}_{\mathcal{L}_{EM}} \right], \quad (\text{I.1})$$

où $\mathcal{D}_\mu = \left(\partial_\mu + i \frac{e^*}{\hbar} A_\mu \right)$ est le couplage minimal, $\phi^{(\dagger)}$ représente le champ scalaire complexe, m la masse des paires de Cooper, c la vitesse de la lumière et $d^4x = (cdt, d^3x)$. La dépendance du champ ϕ sur l'espace-temps est implicite. Le quadri-vecteur potentiel est $A^\mu = (\Phi/c, \mathbf{A})$, où Φ est le potentiel scalaire. La densité lagrangienne du champ électromagnétique \mathcal{L}_{EM} que l'on omettra par la suite est définie à partir du tenseur de Maxwell $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$. On utilise la signature du tenseur métrique suivante : $(-, +, +, +)$. La fonction de partition de la SQED $\mathcal{Z}[\lambda, \lambda^\dagger, j^\mu]$ s'écrit (cf. éqs.(2.34),(2.35))

Les unités de l'action relativiste sont $\hbar c$. Donc, l'expression de la fonction de partition est, par exemple, $\int \mathcal{D}[\phi, \phi^\dagger] e^{-\frac{i}{\hbar c} S[\phi, \phi^\dagger]}$. Le signe négatif de l'argument de l'exponentiel provient du fait que la signature du tenseur métrique $(-, +, +, +)$ a été choisie. On aurait pu choisir la signature $(+, -, -, -)$ et le signe de l'argument aurait été positif.

1. Les indices grecs, i.e., μ et ν , sont réservés pour décrire les indices de l'espace-temps, alors que les indices latins sont réservés pour les indices de l'espace euclidien.

$$\mathcal{Z}[\lambda, \lambda^\dagger, j^\mu] = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\phi^\dagger \int \mathcal{D}A^\mu e^{-\frac{i}{\hbar c} (S[\phi, \phi^\dagger, A] - \int_x \lambda^\dagger \phi - \int_x \phi^\dagger \lambda)}, \quad (\text{I.2})$$

où $\lambda^{(\dagger)}$ sont des champs sources utiles pour générer les fonctions de corrélation. L'action de l'éq.(I.1) est invariante de jauge locale $U(1)$, puisque l'éq.(I.1) comprend le couplage minimal. En effet, la dérivée covariante $\mathcal{D}_\mu \phi$, avec les transformations de jauge

$$\begin{aligned} A_\mu &\rightarrow A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu \Lambda(x) \\ \phi &\rightarrow \phi' = e^{i\frac{e^*}{\hbar} \Lambda(x)} \phi, \end{aligned}$$

est telle que la relation suivante est satisfaite :

$$(\mathcal{D}_\mu \phi)' = \left(\partial_\mu + i\frac{e^*}{\hbar} A'_\mu \right) \phi' = e^{i\frac{e^*}{\hbar} \Lambda(x)} \mathcal{D}_\mu \phi.$$

Le terme $\Lambda(x)$ est une fonction différentiable de l'espace-temps. Le coefficient u devant le terme d'interaction quartique est normalisé par le facteur $\frac{1}{4!}$ afin d'éviter que les diagrammes de Feynman topologiquement équivalents soient surdénombrés. Si l'on retirait le couplage minimal de l'éq.(I.1) (se traduisant par $\mathcal{D}_\mu \rightarrow \partial_\mu$) et que l'on supposait une solution de type onde plane² $\phi \rightarrow \frac{\phi_0}{\sqrt{E}} e^{-i\frac{p_\mu x^\mu}{\hbar}}$, la densité lagrangienne de Klein-Gordon \mathcal{L}_{KG} décrirait la relation de dispersion relativiste $-\frac{1}{\hbar^2} p_\mu p^\mu - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = \left(\frac{E}{\hbar c}\right)^2 - \frac{|\mathbf{p}|^2}{\hbar^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} = 0$. Les unités de ϕ sont $[\phi] = L^{-3/2} E^{-1/2}$, où L et E représentent respectivement les unités de longueur et d'énergie. Si l'on développe l'éq.(I.1) en omettant \mathcal{L}_{EM} , on obtient :

$$\begin{aligned} S[\phi, \phi^\dagger, A] &= c \int dt \int d^3r \left[\frac{\hbar^2 c^2}{2} \left(\partial_\mu + i\frac{e^*}{\hbar} A_\mu \right) \phi \left(\partial^\mu - i\frac{e^*}{\hbar} A^\mu \right) \phi^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \frac{m^2 c^4}{2} \phi \phi^\dagger - \frac{u}{4!} (\phi \phi^\dagger)^2 \right] \\ &= -c \int dt \int d^3r \left[\frac{\hbar^2 c^2}{2} \left| \left(\frac{1}{c} \partial_t + i\frac{e^*}{\hbar c} \Phi \right) \phi \right|^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\hbar^2 c^2}{2} \left| \left(\partial_i + i\frac{e^*}{\hbar} A_i \right) \phi \right|^2 + \frac{m^2 c^4}{2} \phi \phi^\dagger - \frac{u}{4!} (\phi \phi^\dagger)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{I.3})$$

Afin d'inclure les effets de la température, il faut passer en temps imaginaire en effectuant la transformation de Wick dans l'éq.(I.3). Cette transformation permet de calculer simultanément l'ensemble des configurations de champ possibles $\phi^{(\dagger)}$ compte tenu de la probabilité statistique thermodynamique et de la probabilité quantique

2. On suppose une solution de type onde plane puisque l'on s'intéresse à des bosons composites libres couplés au champ électromagnétique. La normalisation relativiste des états d'impulsion est $\mathbb{1} = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2E} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$, où E est l'énergie des particules. Le facteur $\frac{1}{2(2\pi)^3}$ est absorbé dans la constante ϕ_0 .

d'une configuration. Elle permet également de passer d'un espace de Minkowski à un espace euclidien. Cette transformation se traduit par la substitution des expressions suivantes : $t \rightarrow -i\hbar\tau$, et donc $\partial_t \rightarrow \frac{i}{\hbar}\partial_\tau$. Ainsi, la dérivée covariante devient, par exemple, $\partial_\mu \rightarrow (-\frac{i}{\hbar c}\partial_\tau, \partial_i)$, impliquant que $\partial_\mu\partial^\mu = \frac{1}{\hbar^2 c^2}\partial_\tau^2 + \partial_i^2$. En développant l'éq.(I.3) en temps imaginaire, on trouve

$$\begin{aligned} S[\phi, \phi^\dagger, A] &= -i\hbar c \int d\tau \int d^3x \left[\frac{1}{2} |\partial_\tau \phi|^2 + \frac{e^* \Phi}{2} (\phi \partial_\tau \phi^\dagger - \phi^\dagger \partial_\tau \phi) - \frac{(e^* \Phi)^2}{2} \phi^\dagger \phi \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2 c^2}{2} \left| \left[\left(\partial_i + i \frac{e^*}{\hbar} A_i \right) \phi \right] \right|^2 + \frac{m^2 c^4}{2} \phi \phi^\dagger - \frac{u}{4!} (\phi \phi^\dagger)^2 \right] \\ &= -i\hbar c \int d\tau \int d^3x \left[\frac{1}{2} |\partial_\tau \phi|^2 - J_\tau \Phi \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2 c^2}{2} \left| \left[\left(\partial_i + i \frac{e^*}{\hbar} A_i \right) \phi \right] \right|^2 + \frac{m^2 c^4}{2} \phi \phi^\dagger - \frac{u}{4!} (\phi \phi^\dagger)^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{I.4})$$

où $J_\tau = -\frac{e^*}{2} (\phi \partial_\tau \phi^\dagger - \phi^\dagger \partial_\tau \phi) + (e^*)^2 \Phi \phi^\dagger \phi$ est le terme temporel en temps imaginaire (J^0) du quadri-vecteur courant suivant

$$J^\mu = -\frac{i\hbar c e^*}{2} \left[\phi^\dagger \mathcal{D}^\mu \phi - (\mathcal{D}^\mu \phi)^\dagger \phi \right].$$

On note que J^μ est obtenu à partir du théorème de Noether en utilisant la densité lagrangienne \mathcal{L}_{KG} de l'éq.(I.1) :

$$J^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}_{KG}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \delta \phi + \frac{\partial \mathcal{L}_{KG}}{\partial (\partial_\mu \phi^\dagger)} \delta \phi^\dagger,$$

où $\delta \phi = i \frac{e^*}{\hbar} \phi$ et $\delta \phi^\dagger = -i \frac{e^*}{\hbar} \phi^\dagger$, parce qu'une transformation globale de groupe $U(1)$ du champ $\phi^{(\dagger)}$ s'exprime comme³ $\phi \rightarrow \phi' = e^{i \frac{e^*}{\hbar} \Lambda} \phi$. La constante Λ est globale. Ainsi, une transformation infinitésimale du groupe $U(1)$ sur ϕ est, i. e., $\phi' - \phi = (1 + i \frac{e^*}{\hbar} \Lambda + \dots) \phi - \phi \simeq i \frac{e^*}{\hbar} \Lambda \phi$. Maintenant, si l'on considère que le terme de champ ϕ correspond au paramètre d'ordre supraconducteur Ψ déjà mentionné, que $\Phi = 0$ et que $A_i = 0$, l'éq.(I.4) devient [39, 58] :

$$\begin{aligned} S[\Psi] &= \int d^3r \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2} |\partial_\tau \Psi(x)|^2 + \frac{\alpha}{2} |\partial_i \Psi(x)|^2 + \frac{\Xi}{2} |\Psi(x)|^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{u}{4!} |\Psi(x)|^4 \right], \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

où $\alpha \propto \hbar^2 c^2$ et $\Xi \propto m^2 c^4$. On retrouve cette dernière expression (éq.(I.5)) à la page 22 de la référence [58]. Le terme α a donc la dimensionnalité suivante : $\alpha = [J^2 \cdot m^2]$. Le facteur $-i\hbar c$ de l'éq.(I.4) est absorbé dans

L'action est réelle, i. e., composée de puissances paires du paramètre d'ordre, puisque le système est invariant sous un changement global de phase.

3. cf. SCHWICHTENBERG [62], p.137.

le préfacteur à l'action figurant dans la définition de la fonction de partition sous forme d'intégrale de chemin éq.(I.2). L'action complètement générale du paramètre d'ordre supraconducteur en présence d'un champ électromagnétique s'écrit alors

$$S[\Psi, A] = \int d^3r \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2} |\partial_\tau \Psi(x)|^2 - J_\tau \Phi(x) + \frac{\alpha}{2} \left| \left(\partial_i + i \frac{e^*}{\hbar} A_i(x) \right) \Psi(x) \right|^2 + \frac{\Xi}{2} |\Psi(x)|^2 + \frac{u}{4!} |\Psi(x)|^4 \right]. \quad (\text{I.6})$$

Le terme α dépend de la masse du condensat de paires de Cooper. Les coefficients Ξ et u sont des constantes de couplage déterminées microscopiquement (cf. L. FETTER et WALECKA [39], Ch.53). Obtenir les équations du mouvement associées au champ électromagnétique et au paramètre d'ordre à partir de l'éq(I.6) revient, respectivement, à calculer les dérivées fonctionnelles suivantes :

$$\mathbf{j} = \frac{\delta S[\Psi, A]}{\delta A_i(x)} = \frac{\alpha e^*}{\hbar} \text{Re} \{ \Psi(x) (\partial_i + i \frac{e^*}{\hbar} A_i(x)) \Psi^*(x) \} \quad (\text{I.7a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta S[\Psi, A]}{\delta \Psi(x)} &= \frac{\alpha}{2} \left(\partial_i + i \frac{e^*}{\hbar} A_i(x) \right)^2 \Psi^*(x) + \frac{\Xi}{2} \Psi^*(x) + \frac{u}{12} \Psi(x) \Psi^*(x)^2 \\ &+ \frac{1}{2} e^* \Phi(x) \partial_\tau \Psi^*(x) - (e^* \Phi(x))^2 \Psi^*(x) = 0. \end{aligned} \quad (\text{I.7b})$$

\mathbf{j} décrit la densité de courant ($m^{-3}s^{-1}$) sans dissipation, soit celle générée par les paires de Cooper dans le condensat.

L'éq.(I.7a) est celle décrivant la densité du super-courant dans le supraconducteur alors que la dernière équation éq.(I.7b) est une équation non-linéaire «à la Schrödinger». Or, étant donné que la rigidité superfluide est la réponse linéaire du courant au potentiel vecteur A_i et qu'elle est la quantité d'intérêt, on considère que $\Phi = 0$. Donc, si l'on développe le paramètre d'ordre dans l'action éq.(I.6) et qu'on sépare l'action $S[\Psi]$ en ses différentes contributions $S[|\Psi|]$ et $S[\theta]$, on obtient

$$S[|\Psi|] = \int d^3r \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2} (\partial_\tau |\Psi(x)|)^2 + \frac{\alpha}{2} (\partial_i |\Psi(x)|)^2 + \frac{\Xi}{2} |\Psi(x)|^2 + \frac{u}{4!} |\Psi(x)|^4 \right] \quad (\text{I.8a})$$

$$S[\theta] = \int d^3r \int_0^\beta d\tau \frac{|\Psi(x)|^2}{2} \left[|\partial_\tau \theta(x)|^2 + \alpha \left(\partial_i \theta(x) - \frac{e^*}{\hbar} A_i(x) \right)^2 \right]. \quad (\text{I.8b})$$

Puisqu'on considère que $\nabla_x |\Psi(x)|^2 \ll |\Psi(x)|^2 \nabla_x \theta(x)$, on peut factoriser $|\Psi(x)|^2$ de l'éq.(I.8b). Comme le module de l'amplitude du paramètre d'ordre supraconducteur élevé au carré est nul autre que la densité superfluide n_s , $S[\theta]$ devient

$$S[\theta] \simeq \frac{\rho_s}{2} \int d^3r \int_0^\beta d\tau \left[\frac{\hbar^2}{(e^*)^2 \alpha} |\partial_\tau \theta(x)|^2 + \left(\frac{\hbar}{e^*} \partial_i \theta(x) - A_i(x) \right)^2 \right]. \quad (\text{I.9})$$



On expose dans cette section quelques propriétés importantes de $\Omega[\mathcal{G}]$. On commence en constatant de l'éq.(5.9) que

$$\beta \frac{\delta \mathcal{F}[\phi]}{\delta \phi(1,2)} = \mathcal{G}(2,1). \quad (\text{J.1})$$

Ainsi, en vertu des équations (5.10) et (J.1), on a que

$$\beta \frac{\delta \Omega[\mathcal{G}]}{\delta \mathcal{G}(1,2)} = -\phi(2,1). \quad (\text{J.2})$$

La fonction de Green avec champ source ϕ s'écrit

$$\mathcal{G}(2,1)^{-1} = \mathcal{G}_0(2,1)^{-1} - \phi(2,1) - \Sigma(2,1). \quad (\text{J.3})$$

En utilisant les définitions éq.(5.9) et éq.(5.10), on est en mesure de calculer la dérivée partielle suivante, à fonction de Green constante,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \Omega[\mathcal{G}]}{\partial \lambda} \right|_{\mathcal{G}} &= \left. \frac{\delta \mathcal{F}[\phi]}{\delta \phi(\bar{1}, \bar{2})} \frac{\partial \phi(\bar{1}, \bar{2})}{\partial \lambda} \right|_{\mathcal{G}} + \left. \frac{\partial \mathcal{F}[\phi]}{\partial \lambda} \right|_{\mathcal{G}} - \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \phi(\bar{1}, \bar{2})}{\partial \lambda} \mathcal{G}(\bar{2}, \bar{1}) \right|_{\mathcal{G}} \\ &\quad - \frac{1}{\beta} \phi(\bar{1}, \bar{2}) \left. \frac{\partial \mathcal{G}(\bar{2}, \bar{1})}{\partial \lambda} \right|_{\mathcal{G}}. \end{aligned} \quad (\text{J.4})$$

Puisque l'on travaille à fonction de Green constante, l'éq.(J.4) devient simplement, en vertu de l'éq.(J.1),

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \Omega[\mathcal{G}]}{\partial \lambda} \right|_{\mathcal{G}} &= \lambda \frac{\partial \mathcal{F}[\phi]}{\partial \lambda} \frac{1}{\lambda} \\ &= \frac{1}{\lambda} \text{Tr} \left[\mathcal{T}_{\tau} Y[\phi] \lambda \hat{V} \frac{e^{-\beta \hat{K}}}{\mathcal{Z}_K} \right]_K = \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \hat{V} \rangle_K, \end{aligned} \quad (\text{J.5})$$

où $\langle \dots \rangle_K$ signifie que la moyenne est prise par rapport à \hat{K} . On a multiplié l'éq.(J.5) par $\frac{1}{\lambda} = 1$. De l'éq.(J.5), on peut écrire

$$\begin{aligned} \int_0^1 d\lambda \frac{\partial \Omega[\mathcal{G}]}{\partial \lambda} &= \Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=1} - \Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=0} \\ &= \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \hat{V} \rangle_K, \end{aligned} \quad (\text{J.6})$$

donc que

$$\Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=1} = \Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=0} + \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \hat{V} \rangle_K. \quad (\text{J.7})$$

Les expressions $\Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=1}$ et $\Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=0}$ représentent respectivement Ω pour lequel \mathcal{G} est évalué à $\lambda = 1$ (pleine interaction) et Ω pour lequel

\mathcal{G} est évalué à $\lambda = 0$, donc $\Sigma = 0$ (sans interaction). L'éq.(J.7) implique donc, portant l'éq.(J.3) dans l'éq.(5.10), que la fonctionnelle de Baym-Kadanoff avec interaction $\Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=1} \equiv \Omega[\mathcal{G}]$ s'exprime comme :

On utilise le fait que le terme $\text{Tr}[\Sigma\mathcal{G}] = 0$ lorsque $\lambda = 0$, autrement dit lorsqu'il n'y a aucune interaction \hat{V} .

$$\Omega[\mathcal{G}] = \Phi[\mathcal{G}] - \underbrace{\frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\left(\mathcal{G}_0^{-1} - \mathcal{G}^{-1} \right) \mathcal{G} \right] - \frac{1}{\beta} \text{Tr} \left[\ln \left(-\mathcal{G}^{-1} \right) \right]}_{=\Omega[\mathcal{G}]_{\lambda=0}}, \quad (\text{J.8})$$

où \mathcal{G}_0 est la fonction de Green sans interaction et $\Phi[\mathcal{G}]$ est la fonctionnelle de Luttinger-Ward (cf. éq.(5.12)). Ainsi, l'éq.(J.8) donne

On note que la fonctionnelle $\Phi[\mathcal{G}]$ ne dépend que du terme d'interaction quartique \hat{V} , sans égard au terme quadratique du hamiltonien.

$$\beta \frac{\delta \Omega[\mathcal{G}]}{\delta \mathcal{G}(1,2)} = -\phi(2,1) = \Sigma[\mathcal{G}](2,1) - \mathcal{G}_0(2,1) + \mathcal{G}(2,1). \quad (\text{J.9})$$

Étant donnée une fonction de Green sans interaction \mathcal{G}_0 , il existe une solution unique de la fonction de Green avec interaction $\mathcal{G}[\mathcal{G}_0]$ — de la *self-énergie* $\Sigma[\mathcal{G}]$ — calculée à l'aide d'un solveur d'impureté quantique¹. Lorsque le champ source de l'éq.(5.9) est nul, on retrouve l'équation de Dyson depuis l'éq.(J.9), soit la solution physique

$$\begin{aligned} \beta \frac{\delta \mathcal{F}[\phi=0]}{\delta \mathcal{G}(1,2)} &= \beta \frac{\delta \Omega[\mathcal{G}]_{\phi=0}}{\delta \mathcal{G}(1,2)} = \mathcal{G}(2,1)^{-1} - \mathcal{G}_0(2,1)^{-1} + \Sigma(2,1) = 0 \\ &\implies \mathcal{G}(2,1)^{-1} = \mathcal{G}_0(2,1)^{-1} - \Sigma[\mathcal{G}](2,1). \end{aligned} \quad (\text{J.10})$$

Lorsque ϕ est porté à 0, on retrouve l'équation de Dyson. La définition de l'énergie libre éq.(5.13) est donc celle physique. On reconnaît que le dernier terme de l'éq.(J.8) correspond à la forme de l'énergie libre de l'éq.(H.23).

1. Cela n'est toutefois pas toujours vérifié en pratique [37]

FORMULES DE LA RIGIDITÉ SUPERFLUIDE

Dans cette section de l'appendice, on démontre les formules de la rigidité superfluide (1) lorsqu'on trace sur la fonction de Green de l'amas et (2) lorsqu'on périodise la fonction de Green de l'amas ou le cumulatif dans la zone de Brillouin réduite AFM.

FORMULES EN TRAÇANT SUR L'AMAS

Pour débiter, on réécrit le hamiltonien $\mathcal{H}_{\bar{\mathbf{k}}}^{\alpha\beta;ab;rs}$ de l'éq.(5.27) dans la base de spineur de Nambu $\hat{\Psi}$ éq.(5.28), de telle sorte que le hamiltonien $\mathcal{H}_{\bar{\mathbf{k}}}^{\alpha\beta;ab;rs}$ s'écrit explicitement comme suit

$$\mathcal{H}_{\bar{\mathbf{k}}}^{\alpha\beta;ab;rs} = \begin{pmatrix} \Omega_{\bar{\mathbf{k}}} - M & \zeta_{\bar{\mathbf{k}}} & \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \Delta_s & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}} & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^x & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^y \\ \zeta_{\bar{\mathbf{k}}} & \Omega_{\bar{\mathbf{k}}} - M & \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}} & \Delta_s & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^y & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^x \\ \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \Omega_{\bar{\mathbf{k}}} + M & \zeta_{\bar{\mathbf{k}}} & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^x & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^y & \Delta_s & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}} \\ \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} & \zeta_{\bar{\mathbf{k}}} & \Omega_{\bar{\mathbf{k}}} + M & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^y & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^x & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}} & \Delta_s \\ \Delta_s^* & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}}^* & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{x*} & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{y*} & -\Omega_{-\bar{\mathbf{k}}} + M & -\zeta_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} \\ \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}}^* & \Delta_s^* & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{y*} & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{x*} & -\zeta_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\Omega_{-\bar{\mathbf{k}}} + M & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} \\ \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{x*} & \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{y*} & \Delta_s^* & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}}^* & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\Omega_{-\bar{\mathbf{k}}} - M & -\zeta_{-\bar{\mathbf{k}}} \\ \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^{y*} & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}}^{x*} & \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}}^* & \Delta_s^* & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\epsilon_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\zeta_{-\bar{\mathbf{k}}} & -\Omega_{-\bar{\mathbf{k}}} - M \end{pmatrix}. \quad (\text{K.1})$$

On a omis la phase $e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}_{ar}-\mathbf{R}_{bs})+\phi}$ associée au paramètre d'ordre M dans l'éq.(K.1), ne changeant rien au résultat final. De plus, on expose tous les types de symétrie de l'appariement supraconducteur possibles sur un amas 2×2 , soient s (Δ_s), d (Δ_d) et p (Δ_p). $\epsilon_{\bar{\mathbf{k}}}$, $\zeta_{\bar{\mathbf{k}}}$ et $\Omega_{\bar{\mathbf{k}}}$ sont respectivement les relations de dispersion premier-, deuxième- et troisième-voisin (cf. fig.5.3). Afin d'alléger toute cette notation, on pose que

$$T_{lmn} \equiv \sigma_{\alpha\beta}^l \tau_{ab}^m \tilde{\sigma}_{rs}^n,$$

faisant en sorte que l'éq.(K.1) devienne simplement (on suppose $\Delta^* = \Delta$)

$$\mathcal{H}_{\bar{\mathbf{k}}} = \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \left[\epsilon_{\bar{\mathbf{k}}} (T_{311} + T_{310}) + \zeta_{\bar{\mathbf{k}}} T_{301} + \Omega_{\bar{\mathbf{k}}} T_{300} + \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^x T_{110} + \Delta_{d,\bar{\mathbf{k}}}^y T_{111} + \Delta_{p,\bar{\mathbf{k}}} T_{101} \right] + \Delta_s T_{100} - MT_{330}. \quad (\text{K.2})$$

On note que la symétrie d impose que $\Delta_{d,\tilde{\mathbf{k}}}^x = -\Delta_{d,\tilde{\mathbf{k}}}^y$. Les doublets d'indices $\{\alpha, \beta\}$, $\{a, b\}$ et $\{r, s\}$ sont laissés implicites.

Pour déterminer l'expression de la rigidité superfluide lorsque l'on trace sur l'amas ρ^{tr} , il faut partir de l'éq.(5.8) en construisant la fonctionnelle d'énergie libre (éq.(5.16)). Le développement menant à la formule de la rigidité superfluide ρ^{tr} est très similaire au cas général à la sous-section 5.4.2. La seule différence apparaît dans la définition de la fonction de Green \mathcal{G} et elle intervient dans la forme de l'énergie libre :

$$\mathcal{F}[\mathcal{G}] = -\frac{1}{\beta N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, n} \text{tr} \left[\ln \left(\Sigma_c(i\omega_n) - \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) \right) \right], \quad (\text{K.3})$$

où

$$\mathcal{G} = \frac{1}{\underbrace{i\omega_n + \mu - \mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{k}}}}_{\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n)} - \Sigma_c(i\omega_n)} \quad (\text{K.4})$$

et $\mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{k}}}$ est celui de l'éq.(K.2). Encore une fois, la *self-énergie* de l'amas Σ_c est supposée indépendante du potentiel vecteur \mathbf{A} . On expose dans ce qui suit les grandes lignes de la démarche mathématique visant à déterminer ρ^{tr} . On commence par calculer le courant moyen

$$\langle j_a \rangle = -\frac{1}{V} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta A_a} :$$

Le quadrivecteur en fréquence de Matsubara dans la zone de Brillouin réduite (rBZ) est défini comme $\tilde{\mathbf{k}} \equiv (\tilde{\mathbf{k}}, i\omega_n)$.

$$\begin{aligned} \langle j_a \rangle &= \frac{1}{\beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\frac{1}{\Sigma_c(i\omega_n) + \mathcal{H}_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}} - (i\omega_n + \mu) \mathbb{1}} \left(\frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta A_a} [T_{311} + T_{310}] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta A_a} T_{301} + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta A_a} T_{300} \right) \right] \\ &= \frac{e}{\hbar \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(T_{300} [T_{311} + T_{310}] \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + T_{300} T_{301} \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} + T_{300} T_{300} \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} \right) \right] \\ &= \frac{e}{\hbar \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(\frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} [T_{011} + T_{010}] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} T_{001} + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} T_{000} \right) \right], \quad (\text{K.5}) \end{aligned}$$

où $\text{tr}[\dots]$ agit dans l'espace de Nambu (éq.(5.28)). La substitution de Peierls s'écrit dans l'éq.(K.5) comme suit : $\tilde{k}_i \rightarrow \tilde{k}_i = \tilde{k}_i - \frac{e}{\hbar} A_i T_{300}$. On a supposé dans l'éq.(K.5) que le système est invariant sous translation ¹

1. Cette supposition est toutefois grossière, puisque l'on sait que la longueur de cohérence dans les cuprates est de l'ordre du nanomètre, signifiant que la fonction d'onde des paires de Cooper ne peut moyennner le désordre à l'échelle atomique.

($\tilde{\mathbf{k}} = -\tilde{\mathbf{k}}$). Cela permet toutefois d'établir la notation compacte qu'on a utilisée dans l'éq.(K.5), par exemple :

$$\begin{aligned} \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}}}{\delta A_a} T_{301} &\rightarrow \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta A_a} T_{301} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} T_{001} \\ \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}}}{\delta A_a} T_{311} &\rightarrow \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta A_a} T_{311} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} T_{300}}}{\delta \tilde{k}_a} T_{011}. \end{aligned} \quad (\text{K.6})$$

Maintenant, si l'on calcule $\rho_{ab}^{\text{tr.}} = -\frac{\delta \langle j_a \rangle}{\delta A_b} \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}}$, on obtient

$$\begin{aligned} \rho_{ab}^{\text{tr.}} &= \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(\frac{\delta^2 \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}_i}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} [T_{311} + T_{310}] + \frac{\delta^2 \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}_i}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} T_{301} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\delta^2 \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} T_{300} \right) \right] \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} \\ &+ \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(\frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b} [T_{011} + T_{010}] + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b} T_{001} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b} T_{000} \right) \mathcal{G} \times \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_a} [T_{011} + T_{010}] + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_a} T_{001} + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_a} T_{000} \right) \right] \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}}. \end{aligned} \quad (\text{K.7})$$

De l'éq.(K.7), on est en mesure de distinguer la contribution diamagnétique (1^{er} terme) de celle paramagnétique (2^e terme) à la rigidité superfluide. On a tiré bénéfice de l'éq.(5.18) pour arriver à la composante paramagnétique de l'éq.(K.7). Aussitôt que les dérivées fonctionnelles par rapport à \mathbf{A} ont agité, on porte $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{0}$. Il est convenient d'invoquer la périodicité de la zone de Brillouin dans l'intégration du terme diamagnétique afin de regrouper sous une forme plus uniforme les composantes paramagnétique et diamagnétique de l'éq.(K.7), i. e. ²,

$$\begin{aligned} &\int \frac{d^3 \tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \frac{\delta^2 \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \text{tr} \left[\mathcal{G} [T_{311} + T_{310}] \right] \\ &= - \int \frac{d^3 \tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_a} \text{tr} \left[\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \tilde{k}_b} [T_{311} + T_{310}] \right]. \end{aligned} \quad (\text{K.8})$$

En profitant derechef de l'éq.(5.18), remplaçant cette fois-ci la dérivée fonctionnelle de \mathbf{A} par k_b , on arrive à l'expression finale de $\rho_{ab}^{\text{tr.}}$

2. On utilise le fait que $\frac{1}{NV} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \rightarrow \int \frac{d^3 \tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3}$.

$$\begin{aligned}
\rho_{ab}^{\text{tr}} = & \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \left[\frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_\epsilon \mathcal{G}T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{\epsilon'} \mathcal{G}T_{\epsilon'}] \right) \right. \\
& + \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_\epsilon \mathcal{G}T_{001}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{\epsilon'} \mathcal{G}T_{301}] \right) \\
& + \frac{\delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_\epsilon \mathcal{G}T_{000}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{\epsilon'} \mathcal{G}T_{300}] \right) \\
& + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{001} \mathcal{G}T_{001}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{301} \mathcal{G}T_{301}] \right) \\
& + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{001} \mathcal{G}T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{301} \mathcal{G}T_{\epsilon'}] \right) \\
& + \frac{\delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{001} \mathcal{G}T_{000}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{301} \mathcal{G}T_{300}] \right) \\
& + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{000} \mathcal{G}T_{000}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{300} \mathcal{G}T_{300}] \right) \\
& + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{000} \mathcal{G}T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{300} \mathcal{G}T_{\epsilon'}] \right) \\
& \left. + \frac{\delta \Omega_{\tilde{\mathbf{k}}} \delta \zeta_{\tilde{\mathbf{k}}}}{\delta \tilde{k}_b \delta \tilde{k}_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G}T_{000} \mathcal{G}T_{001}] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{300} \mathcal{G}T_{301}] \right) \right], \quad (\text{K.9})
\end{aligned}$$

où $T_\epsilon = T_{011} + T_{010}$ et $T_{\epsilon'} = T_{311} + T_{310}$ et $a, b \in \{x, y, z\}$. On rappelle que V est le volume de la maille élémentaire et que N est le nombre de mailles élémentaires. Calculer la rigidité superfluide dans le plan CuO_2 ($\rho_{\parallel,ab}^{\text{tr}}$) revient à contraindre les variables a et b à x et y dans l'éq.(K.9). Pour calculer ρ^{tr} selon l'axe c , les deux vertex de courant premiers-voisins du premier terme de l'éq.(K.9) sont chacun remplacé par la dérivée partielle par rapport à k_z du terme de saut (1.2) (cf. 5.4). L'éq.(K.9) devient, suite à la substitution de l'éq.(1.2) et l'intégration selon k_z ,

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{tr}} = \frac{4e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \tilde{t}_{\perp}^2(\tilde{\mathbf{k}}) (\text{tr} [\mathcal{G}T_\epsilon \mathcal{G}T_\epsilon] - \text{tr} [\mathcal{G}T_{\epsilon'} \mathcal{G}T_{\epsilon'}]). \quad (\text{K.10})$$

Les formules éqs.(K.9) et (K.10) permettent d'éliminer le rejet d'information causée par la procédure de périodisation (éq.(4.28)).

FORMULES EN PRÉSENCE D'AFM ET DE d_{SC}

Le hamiltonien de l'éq.(5.33) peut être réécrit dans la base de Nambu de l'éq.(5.38), auquel cas l'éq.(5.33) devient :

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k},\alpha,a}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta;ab} \hat{\Psi}_{\mathbf{k},\beta,b}, \quad (\text{K.11})$$

avec $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta;ab}$ s'écrivant

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta;ab} = \begin{pmatrix} \zeta_{\mathbf{k}} + \Omega_{\mathbf{k}} - M & \epsilon_{\mathbf{k}} & 0 & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \epsilon_{\mathbf{k}} & \zeta_{\mathbf{k}} + \Omega_{\mathbf{k}} + M & \Delta_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \Delta_{\mathbf{k}} & -\zeta_{\mathbf{k}} - \Omega_{\mathbf{k}} + M & -\epsilon_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}} & 0 & -\epsilon_{\mathbf{k}} & -\zeta_{\mathbf{k}} - \Omega_{\mathbf{k}} - M \end{pmatrix}. \quad (\text{K.12})$$

Le vecteur d'onde \mathbf{k} est celui de la zone rBZ. L'équation du gap supraconducteur peut être déduite de l'éq.(K.2) en laissant tomber les matrices $\tilde{\sigma}$ ou plus directement de l'éq.(5.33) : $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta (\cos k_x - \cos k_y)$. En temps ordinaire, les termes nuls de la matrice éq.(K.12) représenterait le gap supraconducteur local s . De manière générale, la valeur de ce gap local issue des calculs numériques n'est pas nulle, mais cette quantité peut être laissée de côté dans la dérivation de la formule de la rigidité superfluide. Dans ce cas-ci, de manière similaire à la section K.1, on utilise la notation suivante :

$$T_{lm} = \sigma_{\alpha\beta}^l \tau_{ab}^m, \quad (\text{K.13})$$

où les matrices σ et τ représentent l'ensemble complet de générateurs SU(2) dans leur représentation irréductible \mathbb{C}^2 . On rappelle que σ_0 est l'identité du groupe. Les matrices $\sigma_{\alpha\beta}^l$ agissent dans l'espace de spin et τ_{ab}^m agissent dans l'espace du sous-réseau AFM. En fonction des matrices à l'éq.(K.13), il est possible de réexprimer le hamiltonien éq.(K.12) :

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\bar{\zeta}_{\mathbf{k}} T_{30} + \epsilon_{\mathbf{k}} T_{31} + \Delta_{\mathbf{k}} T_{11} \right] - M T_{33}. \quad (\text{K.14})$$

Encore une fois, les doublets d'indices $\{\alpha, \beta\}$ et $\{a, b\}$ sont omis. Cette fois-ci, le terme $\bar{\zeta}_{\mathbf{k}}$ comprend les relations de dispersions deuxième- et troisième-voisin, alors que le terme $\epsilon_{\mathbf{k}}$ est encore la relation de dispersion premier-voisin. L'éq.(K.14) remplace l'éq.(K.2) dans l'éq.(K.4). À l'instar de l'éq.(K.5) de la section K.1, on débute les calculs de la rigidité superfluide dans le régime de coexistence AFM+ dSC en calculant la courant $\langle j_a \rangle$, mais cette fois-ci en utilisant la fonction de Green de l'amas périodisée :

$$\begin{aligned} \langle j_a \rangle &= \frac{1}{\beta V N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\frac{1}{\Sigma_c(i\omega_n) + \mathcal{H}_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}T_{30}} - (i\omega_n + \mu)\mathbb{1}} \times \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}T_{30}}}{\delta A_a} T_{30} + \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}T_{30}}}{\delta A_a} T_{31} \right) \right] \\ &= \frac{e}{\hbar \beta V N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(\frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}T_{30}}}{\delta \bar{k}_a} T_{00} + \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}-\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}T_{30}}}{\delta \bar{k}_a} T_{01} \right) \right]. \quad (\text{K.15}) \end{aligned}$$

Le terme V est le volume de la maille élémentaire AFM et N est le nombre de mailles élémentaires AFM. De manière équivalente à

l'éq.(K.6), la substitution de Peierls s'écrit $k_i \rightarrow \bar{k}_i = k_i - \frac{e}{\hbar} A_i T_{30}$, de telle sorte que

$$\begin{aligned} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}}}{\delta A_a} T_{30} &\rightarrow \frac{\delta \bar{\zeta}_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta A_a} T_{30} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_a} T_{00} \\ \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}}}{\delta A_a} T_{31} &\rightarrow \frac{\delta \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta A_a} T_{31} = -\frac{e}{\hbar} \frac{\delta \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_a} T_{01}. \end{aligned} \quad (\text{K.16})$$

En calculant $\rho_{ab}^{\text{per.}} = -\frac{\delta \langle j_a \rangle}{\delta A_b} \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}}$, on trouve

$$\begin{aligned} \rho_{ab}^{\text{per.}} &= \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(\frac{\delta \bar{\zeta}_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_b \delta \bar{k}_a} T_{30} + \frac{\delta \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_b \delta \bar{k}_a} \underbrace{T_{30} T_{01}}_{T_{31}} \right) \right] \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}} + \\ &\frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \text{tr} \left[\mathcal{G} \left(\frac{\delta \bar{\zeta}_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_b} T_{00} + \frac{\delta \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_b} T_{01} \right) \mathcal{G} \times \right. \\ &\left. \left(\frac{\delta \bar{\zeta}_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_a} T_{00} + \frac{\delta \epsilon_{\bar{\mathbf{k}}}}{\delta \bar{k}_a} T_{01} \right) \right] \Big|_{\mathbf{A}=\mathbf{0}}. \end{aligned} \quad (\text{K.17})$$

Puisque les dérivées fonctionnelles ont agité sur le potentiel vecteur, on peut maintenant le porter à être nul, soit $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{0}$. Ensuite, la périodicité de la zone de Brillouin entraîne que

$$\begin{aligned} &\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_b \delta k_a} \text{tr} [\mathcal{G} T_{30}] \\ &= - \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \text{tr} \left[\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta k_b} T_{30} \right]. \end{aligned} \quad (\text{K.18})$$

Utilisant encore l'éq.(5.18) pour réexprimer l'éq.(K.17), on trouve

$$\begin{aligned} \rho_{ab}^{\text{per.}} &= \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{00} \mathcal{G} T_{00}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{30} \mathcal{G} T_{30}] \right) \right. \\ &\quad + \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{00} \mathcal{G} T_{01}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{30} \mathcal{G} T_{31}] \right) \\ &\quad + \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \bar{\zeta}_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{01} \mathcal{G} T_{00}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{31} \mathcal{G} T_{30}] \right) \\ &\quad \left. + \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_b} \frac{\delta \epsilon_{\mathbf{k}}}{\delta k_a} \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{01} \mathcal{G} T_{01}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{31} \mathcal{G} T_{31}] \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{K.19})$$

Porter les variables a et b à x ou y permet de calculer $\rho_{||,ab}^{\text{per.}}$. En remplaçant les vertex de courant premiers-voisins dans l'éq.(K.19) par la dérivée partielle du terme de saut interplan (1.2) par rapport à k_z et en portant $a = b = z$, on obtient

$$\rho_{\perp,zz}^{\text{per.}} = \frac{e^2}{\hbar^2 \beta V N} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{t}_{\perp}^2(\mathbf{k}) \left(\text{tr} [\mathcal{G} T_{01} \mathcal{G} T_{01}] - \text{tr} [\mathcal{G} T_{31} \mathcal{G} T_{31}] \right). \quad (\text{K.20})$$

L'éq.(K.20) est la formule selon l'axe c pour laquelle on opte lorsqu'on périodise la fonction de Green ou le cumulante.

AUTRES SCHÉMAS DE PÉRIODISATION

Dans cette section de l'appendice, des résultats de la rigidité superfluide calculée dans d'autres schémas, soient ceux de la périodisation du cumulante (*pér. M*) et de la trace (*tr.*), sont montrés et brièvement discutés. Tous les schémas de périodisation de la fonction de Green de l'amas \mathcal{G}_c , ainsi que la *tr.*, ont été testés pour tous les différents paramètres considérés, à température nulle et finie. Toutefois, par soucis de concision, seules quelques figures ont été sélectionnées.

RÉSULTATS À TEMPÉRATURE NULLE

À la [section 6.1](#), ρ_s dans le schéma *pér. G* a été présentée. Qu'advient-il à ρ_s lorsqu'on opte pour un différent schéma de périodisation ? Périodiser le cumulante de la fonction de Green entraîne des valeurs de ρ_s plus faibles que si l'on périodisait la fonction de Green, dans le plan CuO_2 comme selon l'axe c . Par contre, dans l'état $d\text{SC}+\text{AFM}$, tracer sur \mathcal{G}_c admet les valeurs de ρ_s les plus élevées, tous schémas confondus. Lorsqu'on utilise le schéma *pér. M*, la formule [eq.\(5.37\)](#) est utilisée en régime $d\text{SC}+\text{AFM}$, alors que c'est plutôt l'[eq.\(5.40\)](#) dans le régime $d\text{SC}$. Si l'on trace sur \mathcal{G}_c , la formule utilisée dans le régime $d\text{SC}+\text{AFM}$ est l'[eq.\(5.31\)](#), alors que celle utilisée dans le régime $d\text{SC}$ est l'[eq.\(5.41\)](#).

Dans le schéma *tr.*, on ne présente pas les résultats $d\text{SC}$ et $d\text{SC}+\text{AFM}$ dans la même figure, puisque ces derniers diffèrent beaucoup l'un de l'autre. Que ce soit dans le régime mixte ou pur, lorsque seule la supraconductivité est la solution stable, les formules [eq.\(5.41\)](#) et [eq.\(5.31\)](#) donnent des résultats différents. Lorsque l'on trace sur \mathcal{G}_c , les espaces réciproques¹ rBZ et BZ ne sont plus considérés, car \mathcal{G}_c est représentée dans la srBZ, que l'on soit dans un régime pur $d\text{SC}$ ou dans un régime $d\text{SC}+\text{AFM}$. La forme de la zone de Brillouin réduite du super-réseau (srBZ) ne dépend que de la taille et de la configuration de l'amas. Elle ne dépend pas de la phase ($d\text{SC}+\text{AFM}$, $d\text{SC}$ ou AFM) dans laquelle la solution converge. Le schéma *tr.* ne fait aucune différence entre le régime de coexistence et celui pur.

Rigidité superfluide interplan

Lorsque l'on compare ρ_{zz} obtenue à l'aide de la *pér. M* à celle obtenue à l'aide de la *pér. G*, on constate que le schéma *pér. G* amplifie la réduction de ρ_{zz} aussitôt que l'AFM apparaît. Toutes les données

1. Voir la [fig.4.1](#).

en *pér.* M ne montrent pas une chute aussi importante de ρ_s qu'en *pér.* G . Les figures L.1 et L.2 montrent ρ_{zz} en fonction de la densité électronique pour $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ à $U = 12t$ et $U = 8t$, respectivement. En revanche, les figures L.3 et L.4 montrent ρ_{zz} en fonction de n pour les paramètres de bande $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$ à $U = 6.55t$ et $U = 5t$, respectivement. Puisque les résultats de ρ_{zz} dans l'état dSC calculés avec les formules (5.40) ou (5.37) ne s'équivalent pas à un facteur² 2 si l'on intègre sur la BZ, les données en régime mixte n'ayant que la dSC comme solution stable (points verts) ne se superposent pas exactement sur celles de ρ_{zz} en régime pur (points noirs) — par exemple, le côté sous-dopé en trous de la fig.L.2.

On rappelle que ρ_{zz} est calculée en régime mixte avec la formule (5.37), alors que ρ_{zz} en régime pur dSC est calculée à l'aide de la formule (5.40).

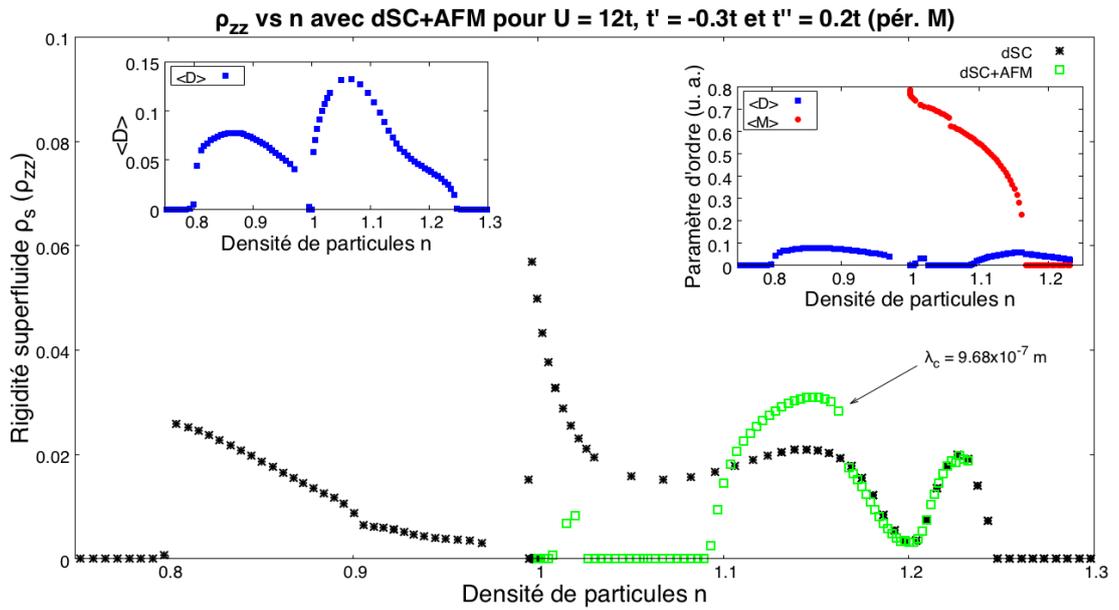


FIGURE L.1 – Rigidity superfluide selon l'axe c (ρ_{zz}) en fonction de la densité de particules n en régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La sous-figure de gauche illustre l'amplitude du paramètre d'ordre dSC $\langle D \rangle$ en fonction de la densité de particules dans l'état pur. La sous-figure de droite illustre l'amplitude des paramètres d'ordre dSC $\langle D \rangle$ et AFM $\langle M \rangle$ dans l'état mixte. Les carrés creux verts de la figure principale montrent la rigidité superfluide calculée en régime mixte $dSC+AFM$ alors que les points noirs montrent ρ_{zz} calculée dans l'état pur dSC . Tous ces résultats ont été obtenus en périodisant le cumuland de la fonction de Green.

À la figure L.5, où les paramètres $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$ sont utilisés, tous les schémas de périodisation y sont illustrés dans le régime pur dSC . Pour tous les ensembles de paramètres utilisés, la rigidité superfluide calculée dans le régime dSC lorsqu'on trace sur \mathcal{G}_c ($tr.$) est plus élevée³. Il vient ensuite la rigidité superfluide calculée

2. cf. figN.3.

3. La formule (5.41) est utilisée dans cette situation.

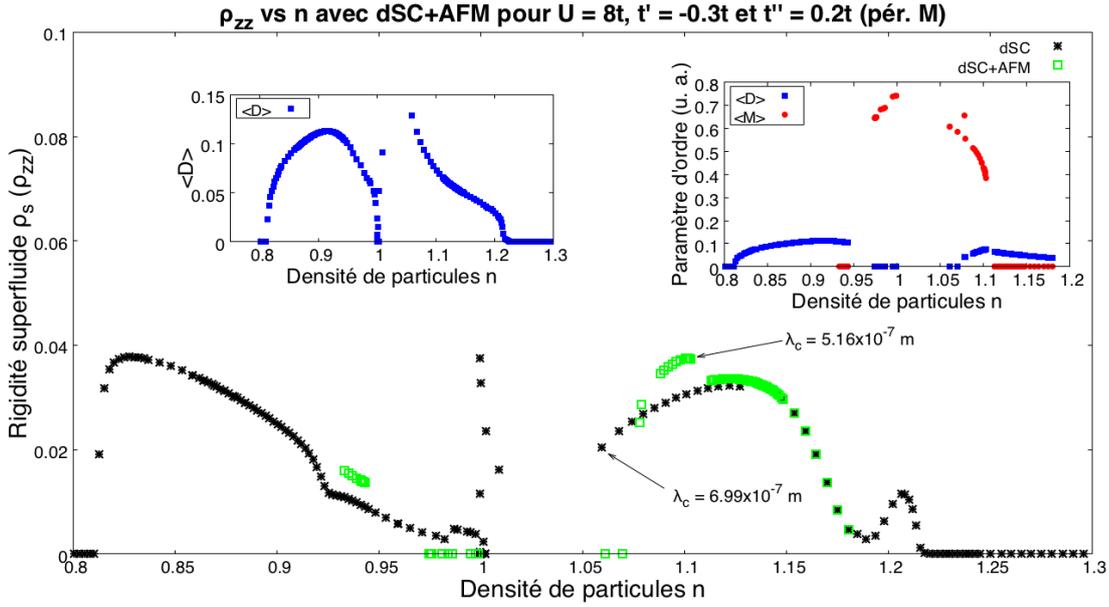


FIGURE L.2 – ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 8t, t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. *Idem* à la figure L.1.

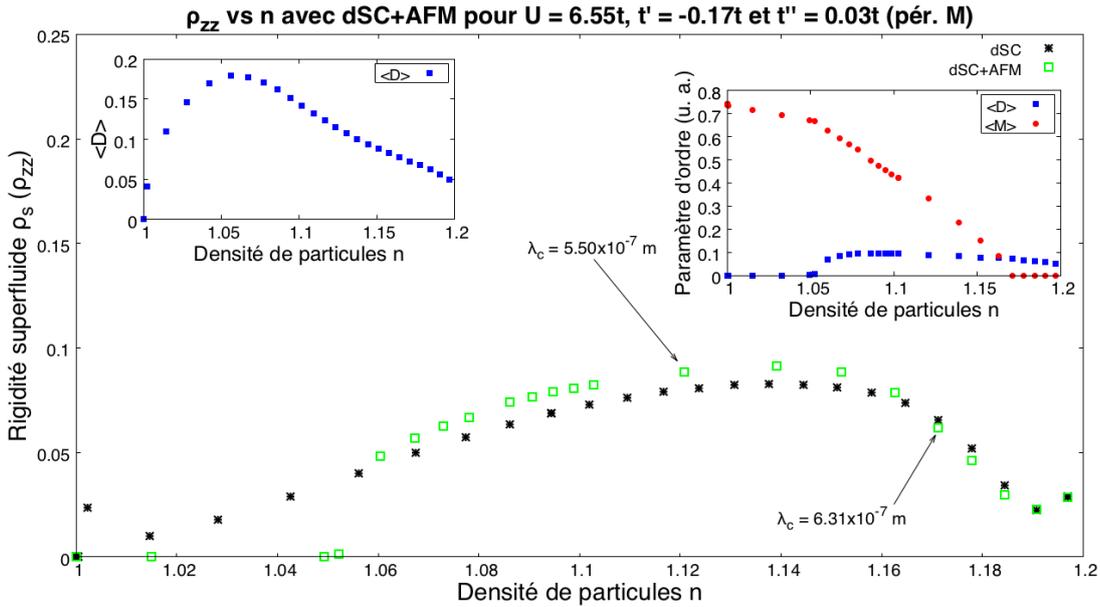


FIGURE L.3 – ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 6.55t, t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. La description de la figure est *idem* à la figure L.1.

en utilisant la *pér. G*. Dans le régime pur, dans tous les cas, la rigidité superfluide la plus faible est obtenue en *pér. M*.

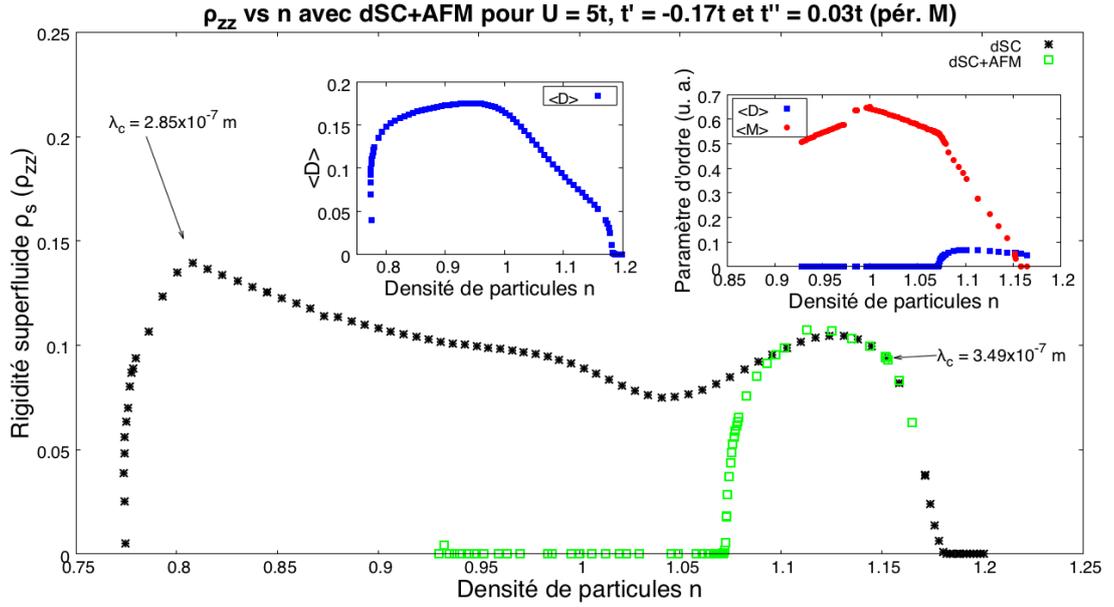


FIGURE L.4 – ρ_{zz} en fonction de n en régimes de coexistence et pur pour $U = 5t, t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. *Idem* à la figure L.1.

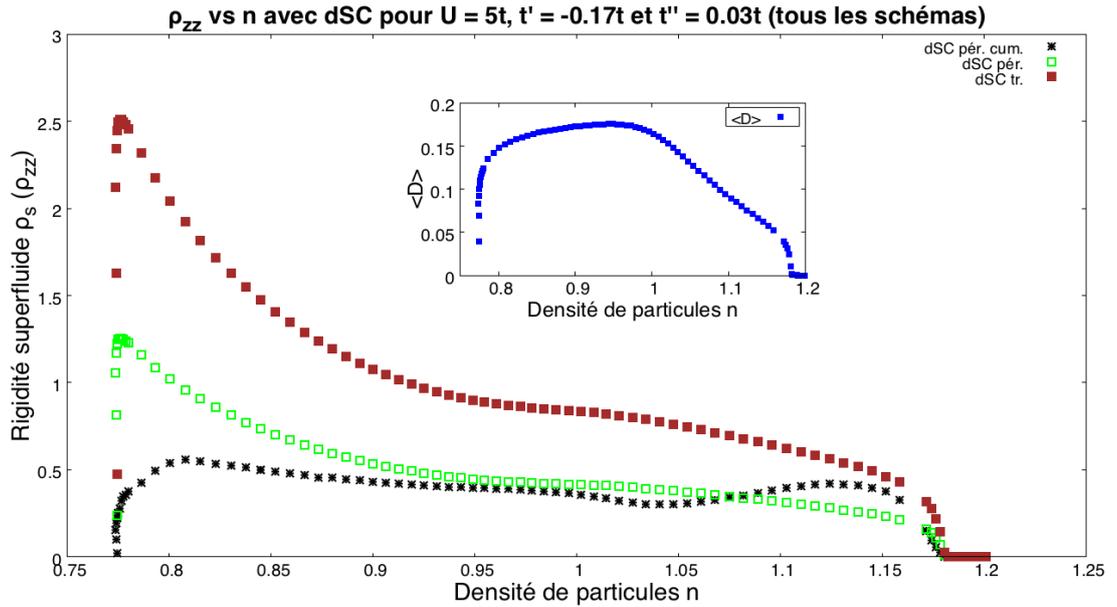


FIGURE L.5 – ρ_{zz} en fonction de n en régime pur dSC pour $U = 5t, t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. Tous les schémas sont montrés, soient *pér. G*, *pér. M* et *tr*. Les données de ρ_{zz} en *pér. M* sont multipliées par un facteur 4 par clarté.

Effet du terme de saut bicouche t_{\perp}

À la sous-sous-section 6.1.2.1, on a évalué l’effet du terme de saut bicouche t_{\perp} lorsque l’on périodise la fonction de Green. On expose quelques exemples montrant l’effet de la dépendance en \mathbf{k}_{\parallel} de t_{\perp} dans

les schémas *pér. M* (figs.L.6 et L.7) et *tr.* (figs.L.8 et L.9). Pour tous les différents paramètres, retirer la dépendance en k_{\parallel} des vertex de courant t_{\perp} diminue ρ_{zz} dans les schémas *pér. M.* et *tr.*

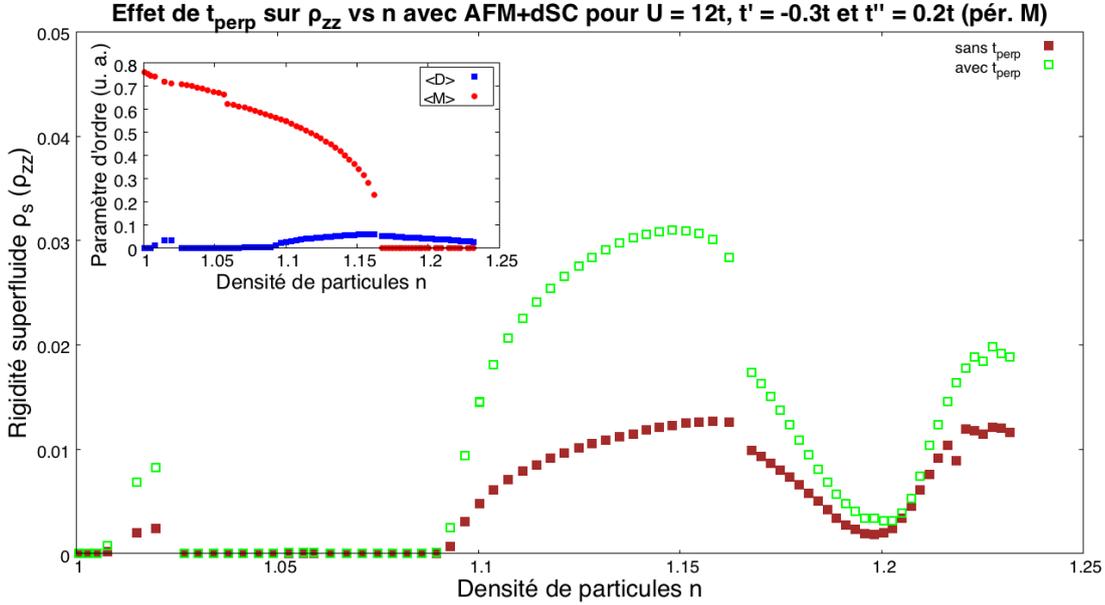


FIGURE L.6 – Effet du terme de saut bicouche t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Il peut être utile de comparer avec la figure L.1, car les points verts sont les mêmes données sur les deux figures. *Idem* à la figure 6.5.

Rigidité superfluide intra-plan

Les effets de la périodisation sont plus marqués lorsque vient temps de calculer ρ_{xx} ou ρ_{yy} . Les quantités ρ_{xx} ainsi que ρ_{yy} se distinguent plus l'une de l'autre lorsque l'on périodise le cumulant que lorsque la fonction de Green est périodisée. Il s'agit de comparer les figs.6.9 et L.10. Il ne devrait pas avoir de distinction entre ρ_{xx} et ρ_{yy} lors du calcul de la rigidité superfluide dans le plan CuO_2 . Pour cette raison, on soupçonne que la périodisation de Green *pér. G* effectue un meilleur travail pour rétablir l'invariance sous translation en reconstruisant le réseau avec l'amas. La *pér. M* semble mieux fonctionner pour calculer ρ_{zz} que pour calculer ρ_{\parallel} si l'on se fie à la sous-section 6.1.4.

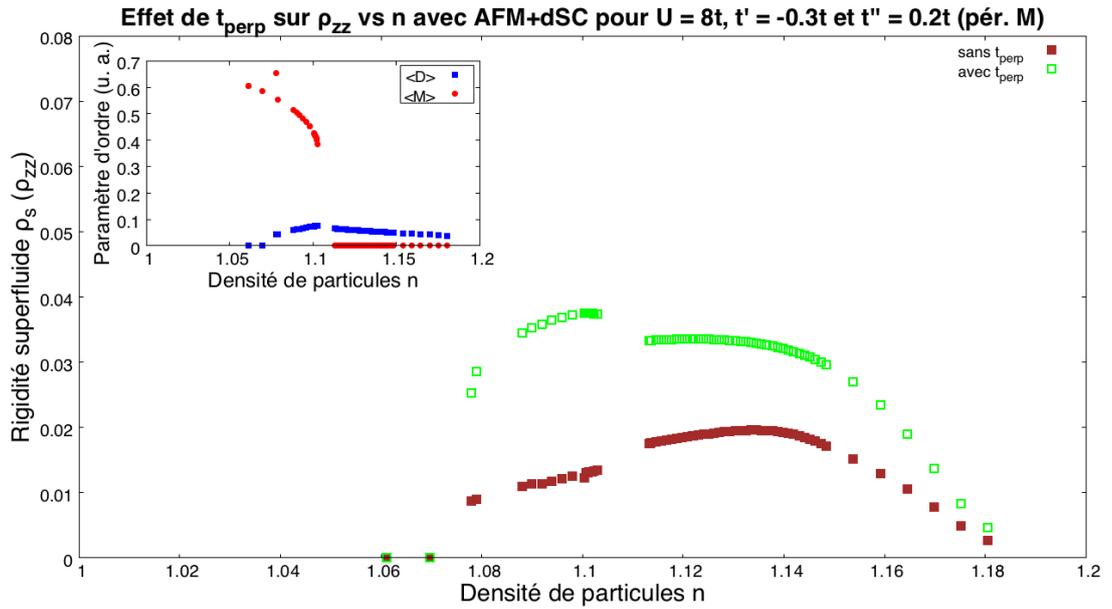


FIGURE L.7 – Effet du terme de saut bicouche t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Il peut être utile de comparer avec la figure L.2, car les points verts sont les mêmes données sur les deux figures. *Idem* à la figure 6.5.

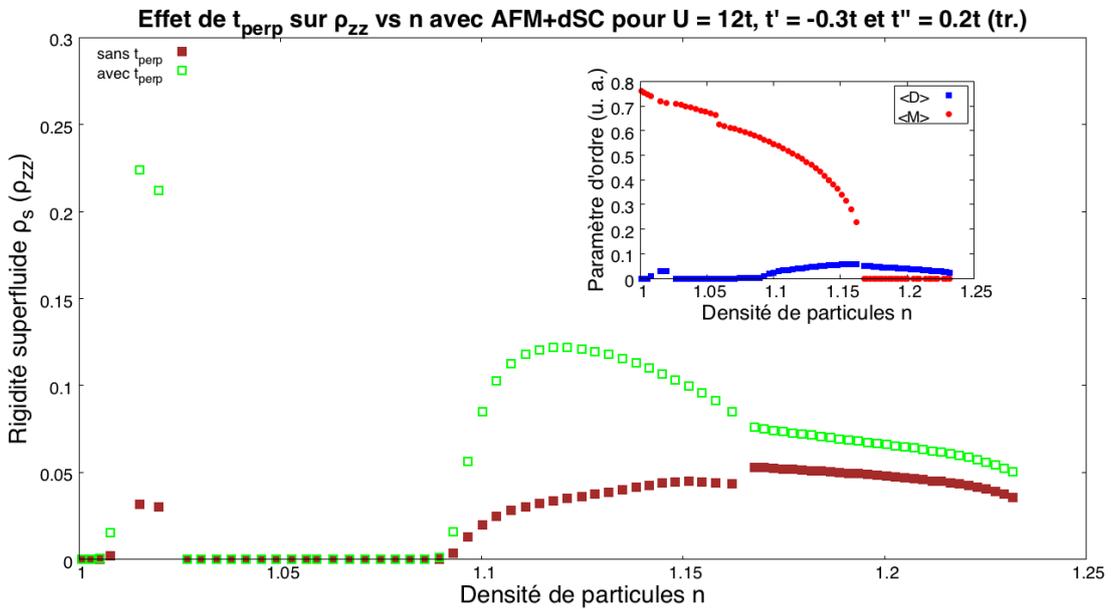


FIGURE L.8 – Effet du terme de saut bicouche t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Le schéma *tr.* est celui utilisé. *Idem* à la figure 6.5. Les valeurs sans t_{\perp} sont multipliées par un facteur $\frac{1}{2}$ en plus pour la clarté.

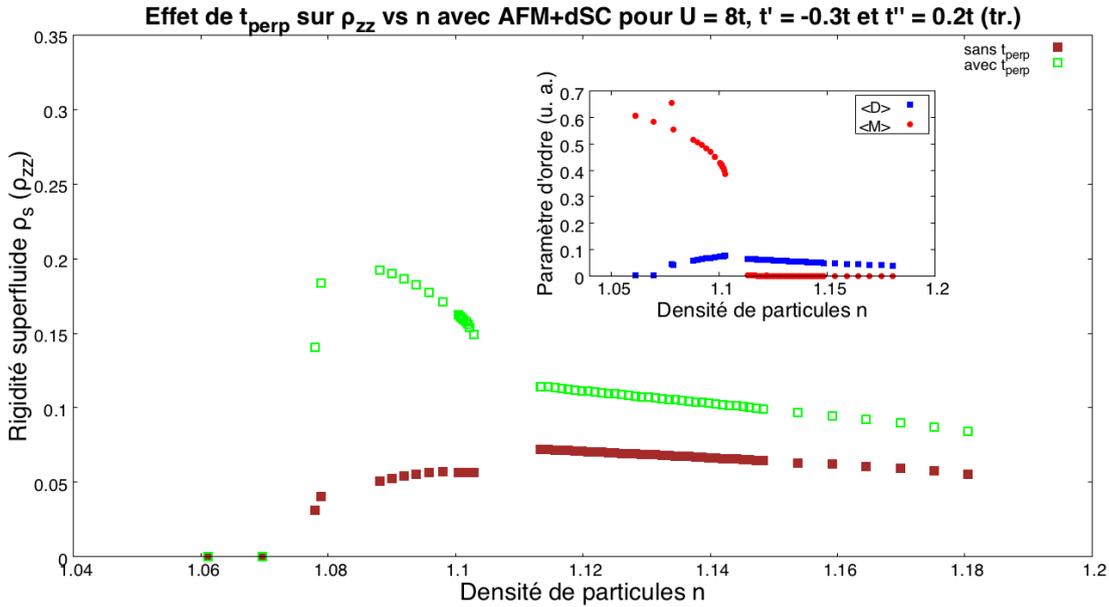


FIGURE L.9 – Effet du terme de saut bicouche t_{\perp} sur ρ_{zz} en régime de co-existence pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Le schéma *tr.* est celui utilisé. *Idem* à la figure 6.5. Les valeurs sans t_{\perp} sont multipliées par un facteur $\frac{1}{2}$ en plus pour la clarté.

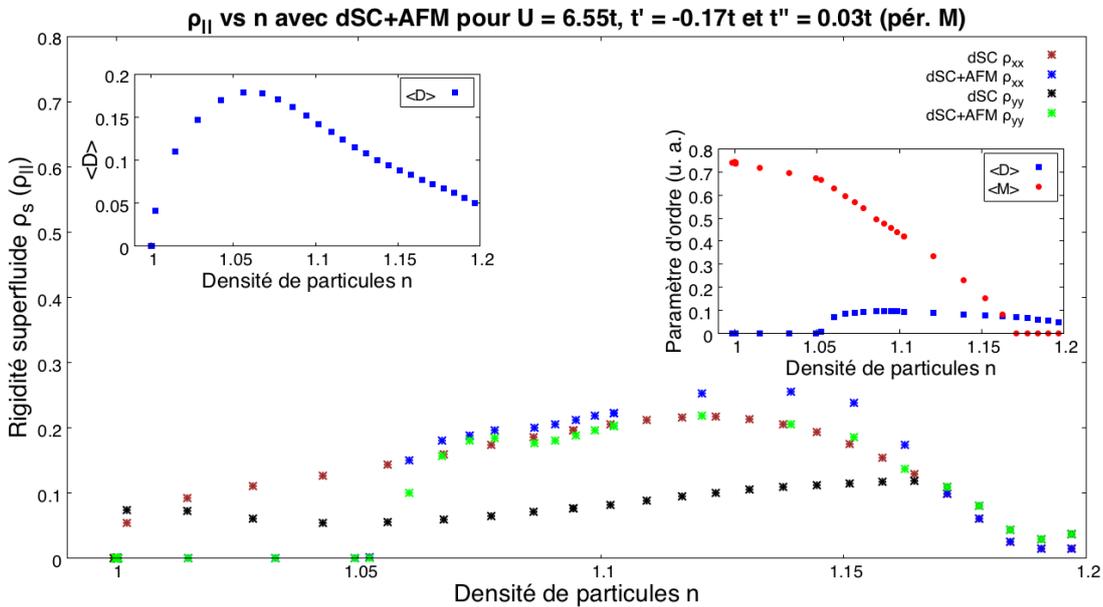


FIGURE L.10 – ρ_{\parallel} en fonction de n pour $U = 6.55t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$ dans le schéma *pér. cum.* La description est *idem* à la figure 6.7.

On montre dans cette partie de l'appendice que les données de la rigidité superfluide à $T = 0$ convergent en fonction de β ainsi qu'en fonction du nombre n de fréquences de Matsubara utilisé. Pour ce faire, quelques exemples sont illustrés.

Les fonctions de Green sont définies par une variété de nombres quantiques, comme le spin σ , le vecteur d'onde \mathbf{k} , etc. Elles sont aussi exprimées sur une grille de n fréquences de Matsubara fermioniques $i\omega_n$ pour avoir une résolution en énergie ω . Cette grille de fréquence est spécifiée par une température β et une énergie seuil associée à la fréquence de Matsubara la plus élevée n_{\max} ¹, comme suit :

$$i\omega_n = \frac{(2n + 1)\pi}{\beta}.$$

La rigidité superfluide est une quantité convergeant selon $\rho_s \propto \frac{1}{(i\omega_n)^4}$ (cf. éq.(5.43)); elle capture donc la physique de basse énergie près du niveau de Fermi.

CONVERGENCE EN β

La convergence en β est montrée pour un échantillon de paramètres utilisés. Pour l'intégralité des paramètres de bande et pour toutes les valeurs d'interaction, ρ_s converge en augmentant β . Tous les résultats de ρ_{zz} illustrés comprennent t_{\perp} — or, la convergence en β s'applique toujours sans t_{\perp} et elle est plus rapide. La rigidité superfluide obtenue en périodisant la fonction de Green converge plus rapidement en β que ρ_s obtenue en périodisant le cumulatif ou en traçant; cela est plus marqué dans le régime de coexistence $dSC+AFM$.

Toutes les données de ρ_{zz} ne semblent pas converger au même rythme. En effet, si l'on se fie aux figures M.1 et M.2 pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$, on peut constater que les données dans les régions sur-dopées convergent seulement sur une plus grande plage de température β . Ce phénomène est retrouvé, par exemple, pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$ aux figures M.4 et M.5. Cela peut être expliqué par le fait qu'à plus fort dopage, les corrélations électroniques sont plus faibles et la physique de basse énergie gagne en importance. En diminuant la température fictive, donc en augmentant β , la rigidité superfluide croît. C'est le comportement auquel on devrait s'attendre, puisqu'on réduit alors l'intervalle séparant les premières fréquences

¹. L'énergie seuil correspond à la fréquence de Matsubara avec la valeur maximale de n considérée, n_{\max} .

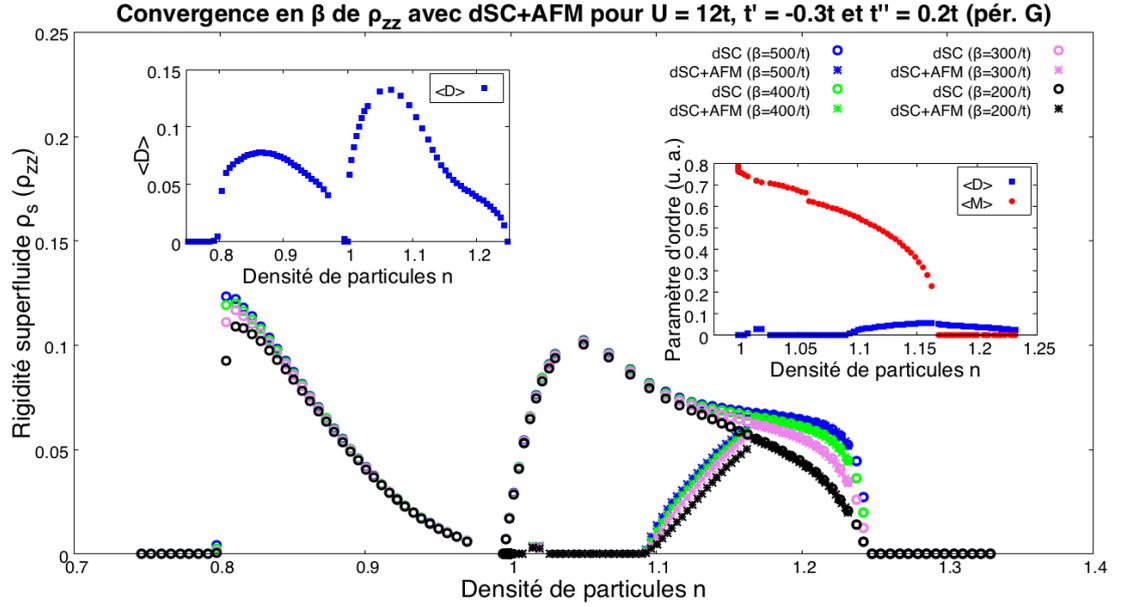


FIGURE M.1 – Convergence en β de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 12t, t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *pér. G*.

de Matsubara. Les corrélations quantiques à proximité du niveau de Fermi sont alors mieux capturées. Le nombre maximal de fréquences de Matsubara utilisé pour étudier la convergence en β est $n_{\max} = 500$.

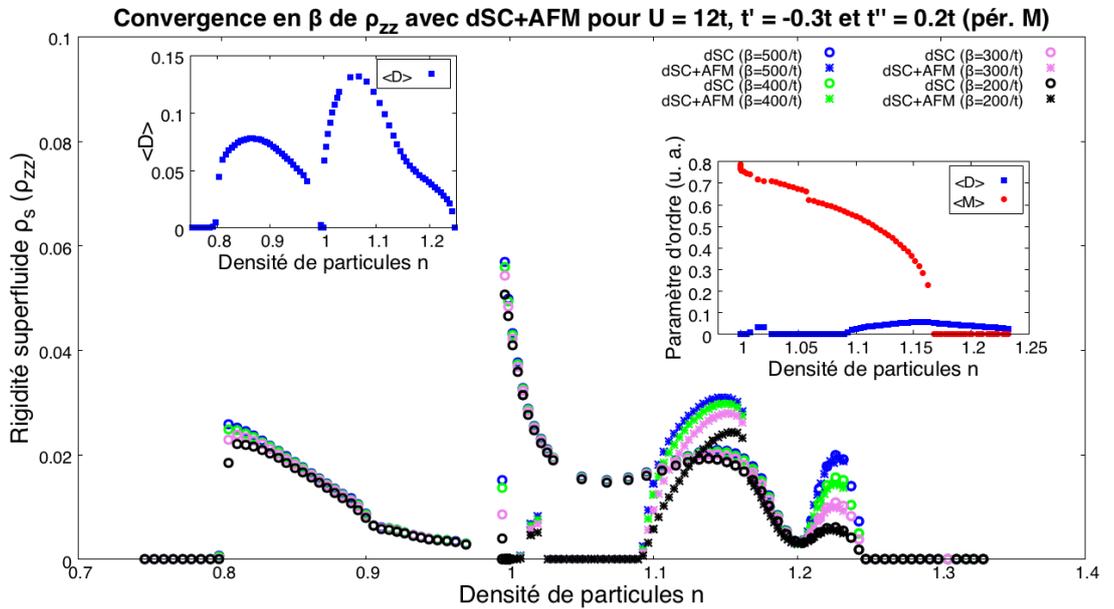


FIGURE M.2 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 12t, t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *pér. M*.

D'après les figures M.3 et M.6, il semble que diminuer la température fictive accentue les effets résiduels de la brisure de symétrie sous translation. Ainsi, une température fictive plus élevée atténuerait les effets de taille finie de l'amas sur ρ_s en traçant sur la fonction de Green \mathcal{G}_c . On note que la convergence est particulièrement lente pour $U = 5t$ (fig.M.6).

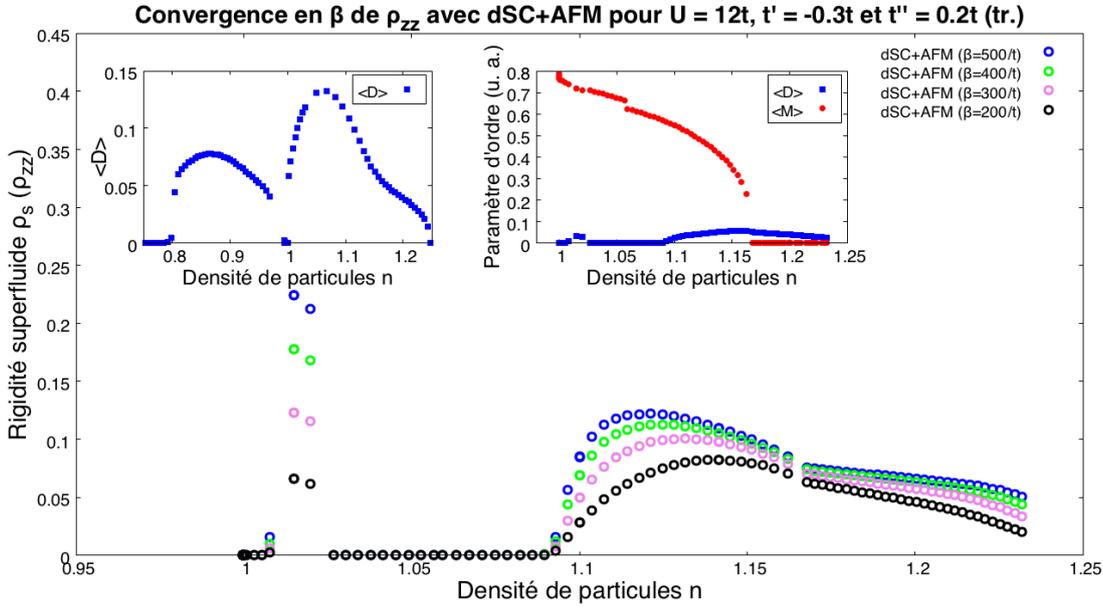


FIGURE M.3 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *tr*.

Les figures M.7 et M.8 montrent que la convergence en β tient également pour ρ_{\parallel} , peu importe les paramètres de liaison forte exposés dans le tableau 1.1.

CONVERGENCE EN n_{MAX}

Qu'arrive-t-il maintenant si l'on varie l'énergie seuil associée à $i\omega_{n_{\text{max}}}$, ou de manière équivalente, la taille de la grille en fréquences de Matsubara n_{max} ? Les figures M.9 et M.10 illustrent deux exemples pour deux différents schémas de périodisation *pér. G* et *pér. M*, respectivement. La température fictive β est fixée à $\beta = 500/t$ pour toutes les valeurs montrées. Pour ces deux figures, on peine à distinguer les données de ρ_{zz} calculées avec une valeur de $n_{\text{max}} = 50$ et plus; la rigidité superfluide est donc une quantité qui converge rapidement en fonction de la taille de la grille de fréquences de Matsubara. La convergence est montrée seulement pour des résultats de ρ_{zz} à $U = 12t$, bien qu'elle tienne également pour toute valeur d'interaction U , tout paramètre de liaison forte et tout axe de la maille élémentaire. On peut remarquer que la convergence en n_{max} est plus rapide du côté dopé

La taille de la grille de fréquences de Matsubara n_{max} correspond au nombre de fréquences de Matsubara utilisées.

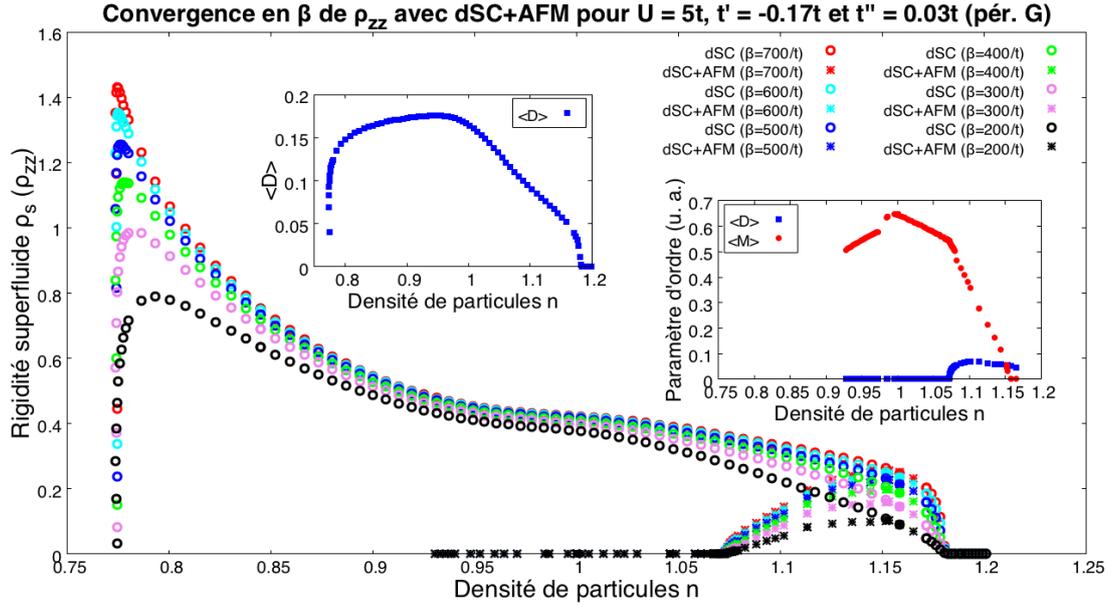


FIGURE M.4 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *pér. G*.

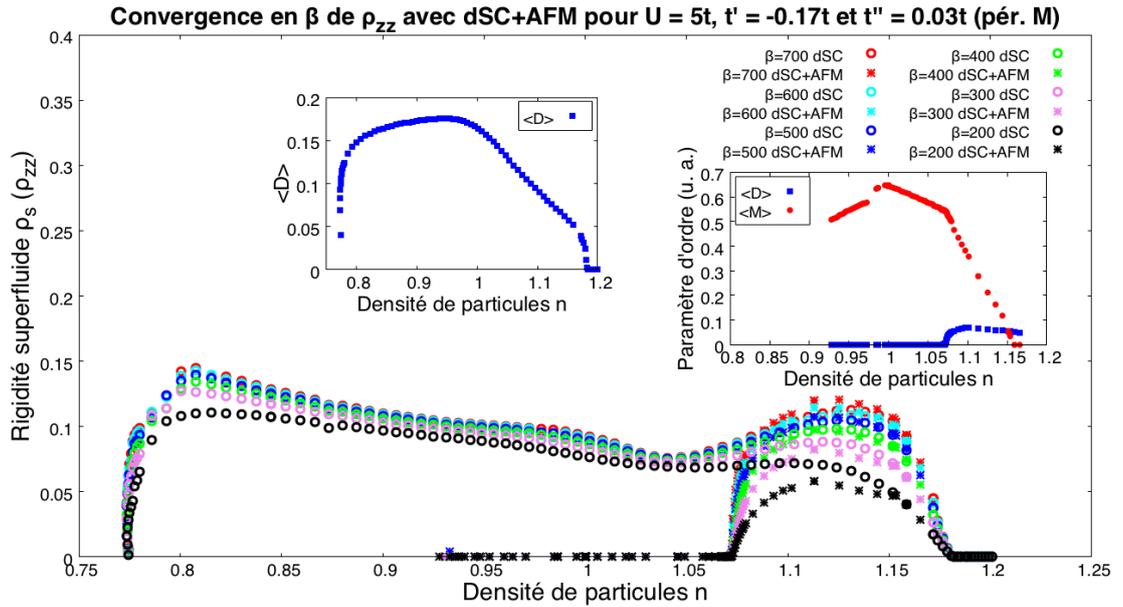


FIGURE M.5 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *pér. M*.

en trous que celui en électrons. De plus, il semble que la convergence de ρ_s en fonction de n_{\max} soit plus rapide du côté dopé en trous que de celui dopé en électrons.

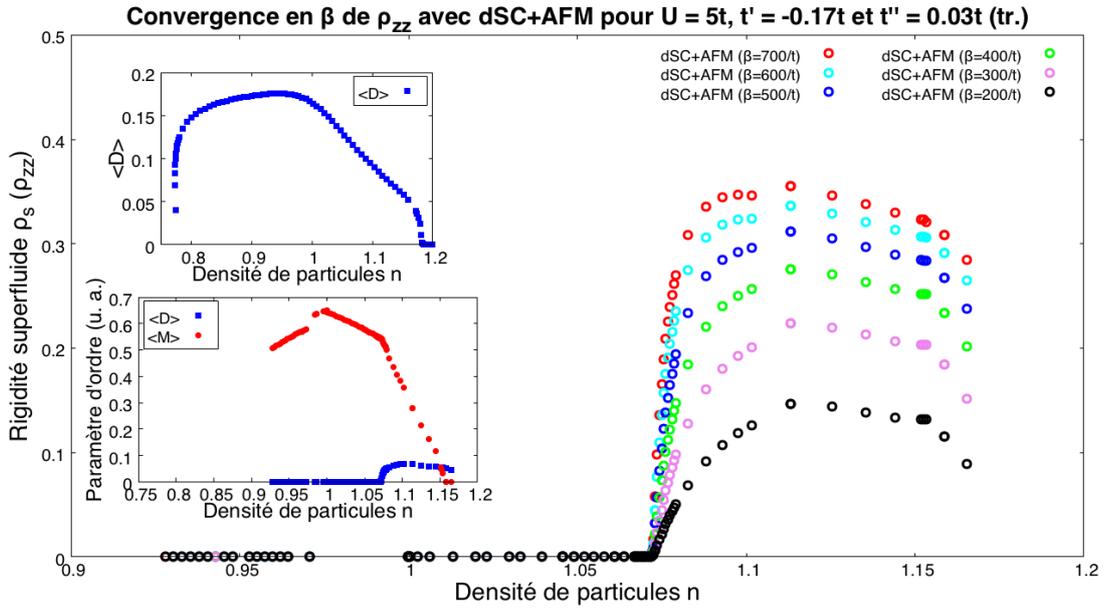


FIGURE M.6 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *tr*.

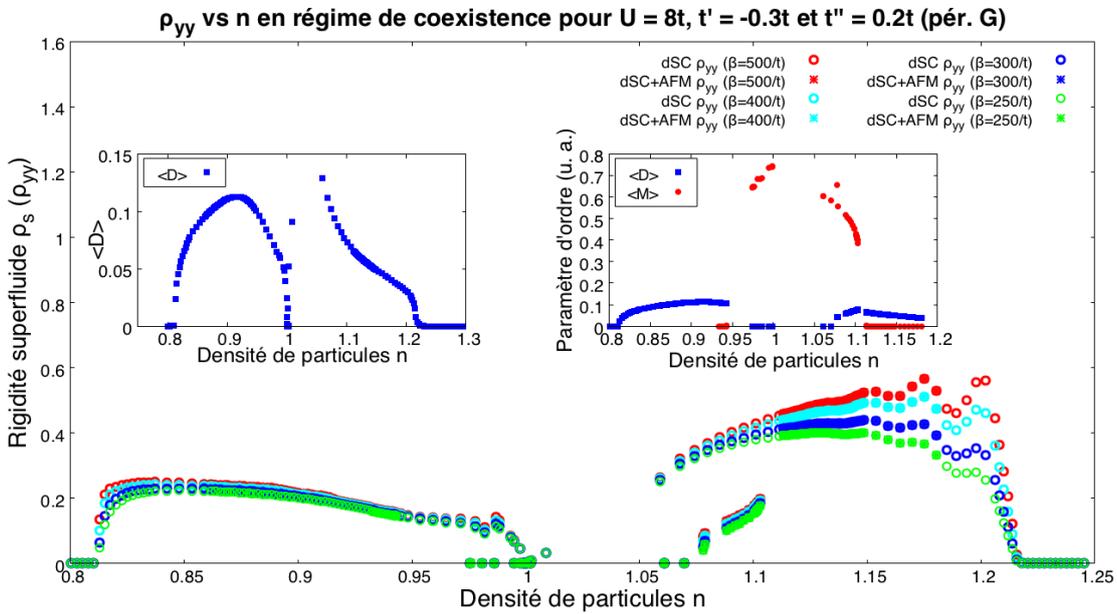


FIGURE M.7 – Convergence de ρ_{yy} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *pér. G*.

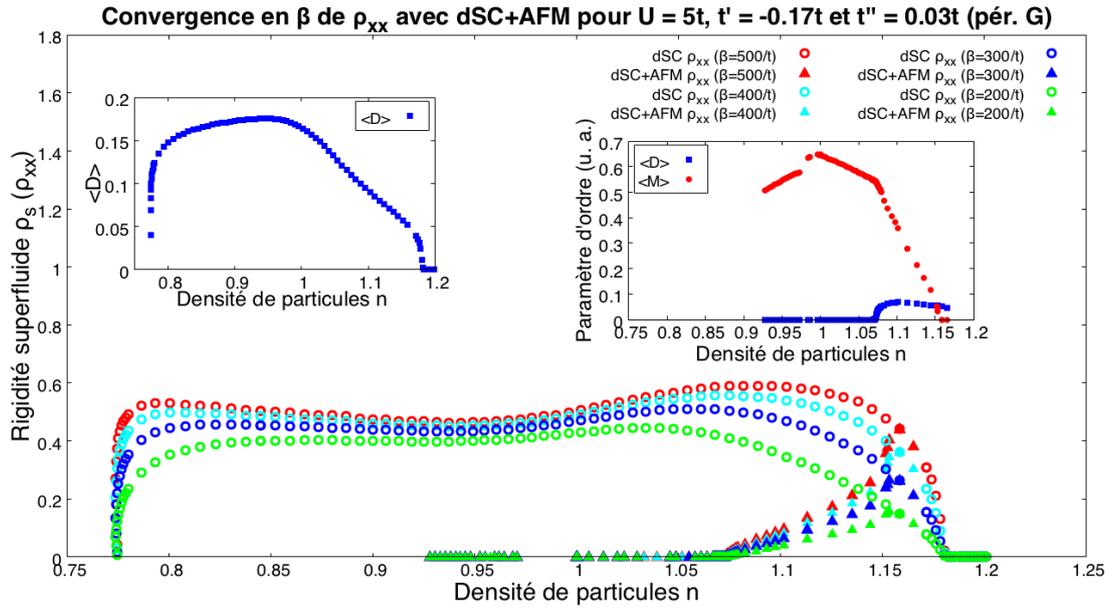


FIGURE M.8 – Convergence de ρ_{\parallel} en fonction de la densité de particules en régime de coexistence pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$. Tous ces résultats ont été obtenus dans le schéma *pér. G*.

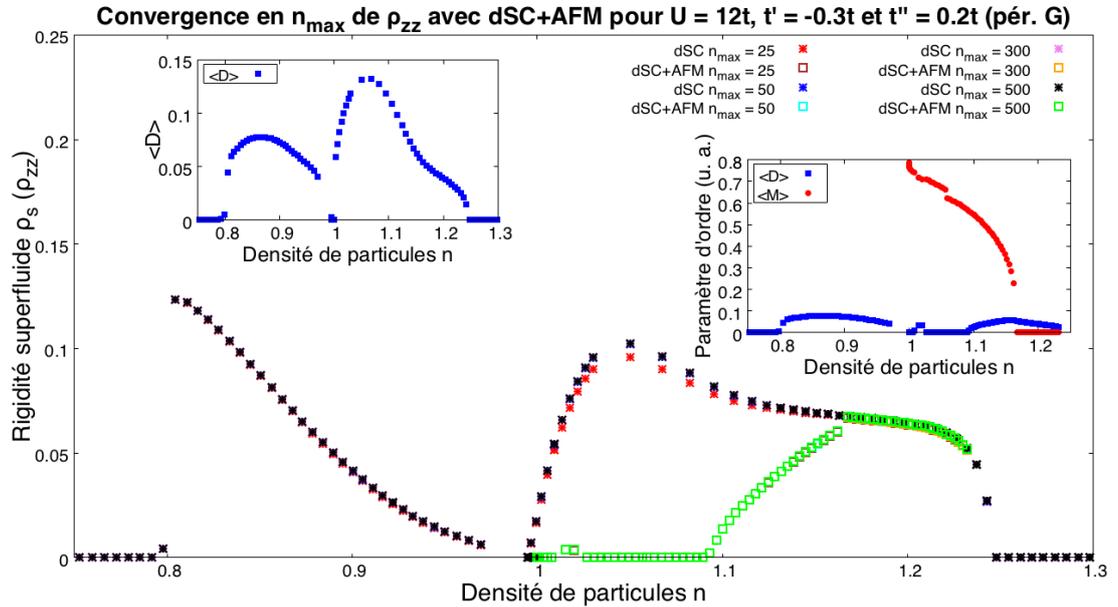


FIGURE M.9 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la taille de la grille de fréquences de Matsubara n_{\max} dans les régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La température fictive utilisée est la même pour toutes les valeurs, soit $\beta = 500/t$. La fonction de Green est périodisée *pér. G*. *Idem* à la fig.6.1.

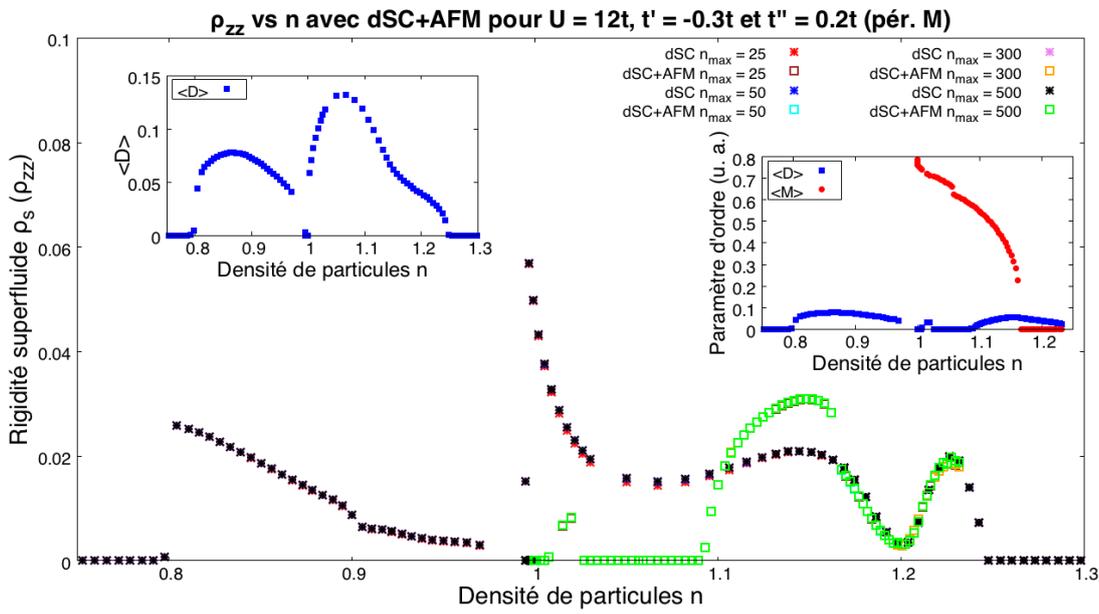


FIGURE M.10 – Convergence de ρ_{zz} en fonction de la taille de la grille de fréquences de Matsubara n_{max} dans les régimes de coexistence et pur pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. La température fictive est aussi fixée à $\beta = 500/t$. Le cumulatif de \mathcal{G}_c est périodisé *pér. M.* *Idem* à la fig.6.1.

Les détails des calculs de ρ_s dans l'état $dSC+AFM$ sont expliqués. À la [section L.1](#), il a été mentionné qu'aucune distinction n'est faite entre le régime pur dSC et celui $dSC+AFM$ dans le schéma *tr.* : ces deux régimes sont tous deux traités de la même façon dans l'espace des $\tilde{\mathbf{k}}$ (cf. [fig.4.1](#)). Dans le schéma *tr.*, les fonctions de Green \mathcal{G}_c sont toujours de dimension 8×8 pour l'amas 2×2 qui est considéré (voir, i. e., les eqs.(5.30) et (5.36)). Lorsqu'il y a périodisation d'une fonction de Green \mathcal{G}_c en régime mixte, on représente \mathcal{G}_c dans la zone rBZ, que ce soit une solution obtenue en régime pure dSC ou en régime de coexistence $dSC+AFM$ — cela signifie que l'éq.(5.37) est appliquée sans distinction entre les régimes dSC et $dSC+AFM$. Ce cas est donc l'analogie de la *tr.*, mais on travaille plutôt dans l'espace des vecteurs d'onde de la zone de Brillouin AFM réduite (rBZ). Les figures [N.1](#) et [N.2](#), respectivement pour les schémas *pér. G* et *pér. M*, montrent les résultats de ρ_{zz} obtenus en utilisant l'éq.(5.37) et en intégrant sur la zone BZ¹.

Dans le régime dSC , la formule (5.40), par exemple², est admissible uniquement dans l'état pur dSC . Comme mentionné, on peut toutefois traiter les phases dSC et $AFM+dSC$ du régime mixte sans distinction avec l'éq.(5.37). Si l'on décortique les contributions de l'éq.(5.36) terme par terme, on aurait les équivalences suivantes dans la base mixte (base orbitale) :

1.
$$4 \left(F_{AA}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{AA}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) + F_{AB}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{BA}^{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \right. \\ \left. + F_{AB}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{BA}^{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) + F_{BB}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{BB}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \right)$$
2.
$$4 \left(\left(F_{AB}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) + F_{BA}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) \right) \left(F_{AA}^{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) + F_{BB}^{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \right) \right. \\ \left. + \left(F_{AB}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) + F_{BA}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) \right) \left(F_{AA}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) + F_{BB}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \right) \right)$$
3.
$$4 \left(F_{AB}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{AB}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) + F_{BA}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{BA}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \right. \\ \left. + F_{AA}^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{BB}^{\downarrow\uparrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) + F_{AA}^{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}) F_{BB}^{\uparrow\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}) \right),$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde exprimé dans la zone de Brillouin antiferromagnétique (rBZ). A et B sont les deux sous-réseaux AFM. La

1. En intégrant sur la BZ, le facteur 2 dénombrant les états de spin est conservé, parce qu'on veut montrer ce qu'il arrive si l'on traite les données convergées dans l'état pur dSC avec la formule valide dans le régime de coexistence.

2. On aurait bien-sûr pu considérer l'éq.(5.41) ou (5.39) et rien n'aurait changé.

première série de termes (1.) correspond à tous les processus de diffusion de paires de Cooper entre deux plans CuO_2 préservant l'état initial de chacune des paires — les nombres quantiques A, B et \uparrow, \downarrow sont inchangés par rapport à l'état initial de la paire de Cooper. La deuxième série de termes (2.) représente l'ensemble des processus de diffusion de paires de Cooper entre deux plans CuO_2 par lesquels l'un des électrons appariés change de sous-réseau AFM par rapport à l'état initial. Finalement, l'ensemble de termes (3.) correspond aux processus de diffusion entre deux plans CuO_2 par lesquels les deux électrons appariés changent de sous-réseau AFM par rapport à l'état initial. Dans la limite où $\langle M \rangle \rightarrow 0$, les équations applicables dans le régime pur $d\text{SC}$ et celles applicables dans le régime mixte $d\text{SC}+\text{AFM}$ doivent être égales³ selon l'axe c .

On définit un facteur de normalisation évalué en utilisant les formules de ρ_s dans le régime $d\text{SC}+\text{AFM}$ avec des fonctions de Green \mathcal{G}_c ayant convergé dans un régime pur $d\text{SC}$ — cela entraîne le fait que l'on périodise des solutions de l'état pur $d\text{SC}$ dans la rBZ. Ce facteur de normalisation ferait le pont entre les formules valides en régime pur $d\text{SC}$ et celles valides en régime de coexistence. Il devrait avoir une valeur constante de 2 pour tous les paramètres considérés. Des exemples de facteurs de normalisation sont présentés sous forme de points rouges aux graphiques N.3 et N.4.

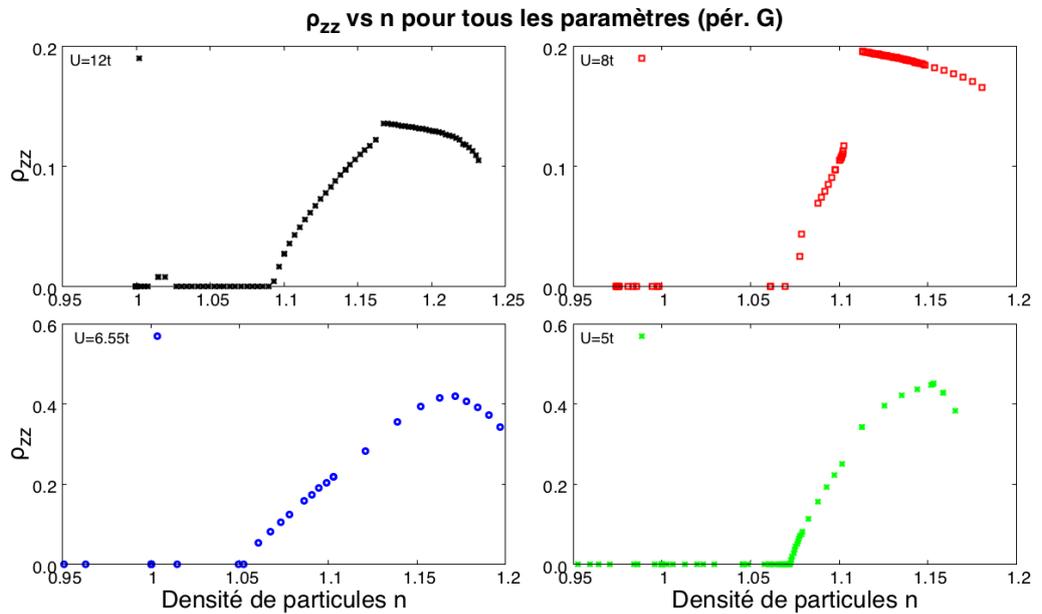


FIGURE N.1 – Calcul de ρ_{zz} en fonction de n dans le régime mixte utilisant uniquement la formule en régime de coexistence (5.37) et intégrant sur la BZ pour tous les paramètres U, t', t'' considérés. La périodisation *pér. G* est utilisée avec le terme de saut t_{\perp} .

3. Cela sert de critère pour déterminer lequel des schémas de périodisation entre *pér. G* et *pér. M* est le plus efficace.

Dans le cas d'un régime pur dSC , on ne retrouve que cette contribution, puisqu'il n'existe aucun sous-réseau et les quatre orbitales électroniques constituant l'impureté d'Anderson 2×2 sont équivalentes :

$$\rho_{\perp,zz}^{SC} \propto 4F_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{k})F_{\uparrow\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}, -\mathbf{k}), \quad (N.1)$$

où $F^{(\dagger)}$ correspond à la fonction de Green anormale déjà introduite à la sous-section 5.4.2. Les vecteurs d'onde \mathbf{k} sont exprimés dans la zone de Brillouin originale BZ. Pour arriver à l'éq.(N.1), il faut imposer la condition selon laquelle $\Delta = \Delta^*$, ce qui est valide dans le cas d'un système invariant par inversion du temps.

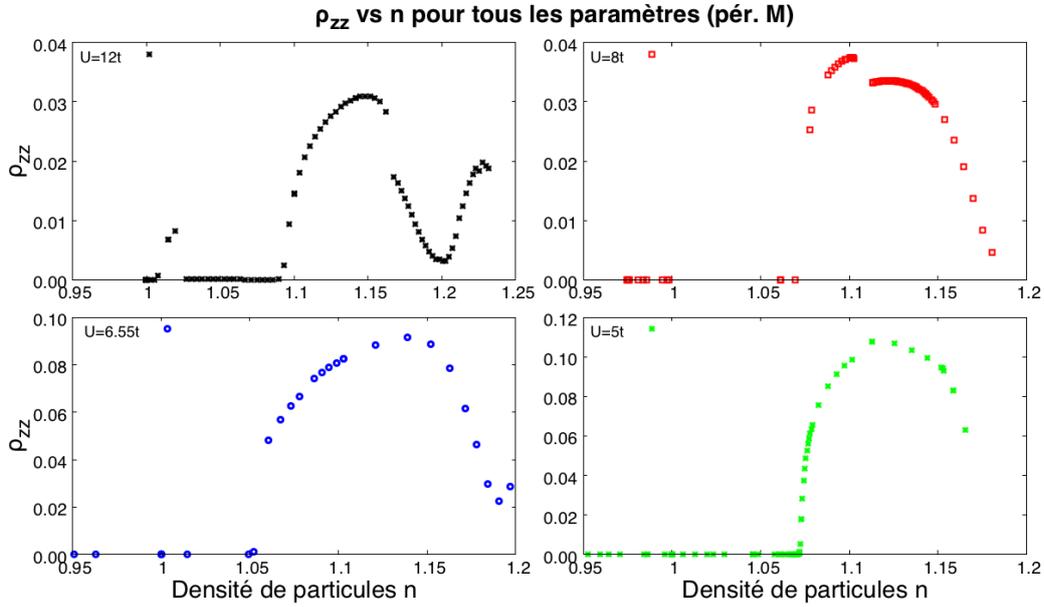


FIGURE N.2 – Calcul de ρ_{zz} en fonction de n dans le régime mixte utilisant uniquement la formule en régime de coexistence (5.37) et intégrant sur la rBZ pour tous les paramètres U, t', t'' considérés. La périodisation *pér. M* est utilisée avec le terme de saut t_{\perp} . En *pér. M*, utiliser la formule de coexistence sur des solutions en régime dSC ne colle pas aux résultats obtenus employant la formule dédiée au régime pur, même en intégrant sur la rBZ.

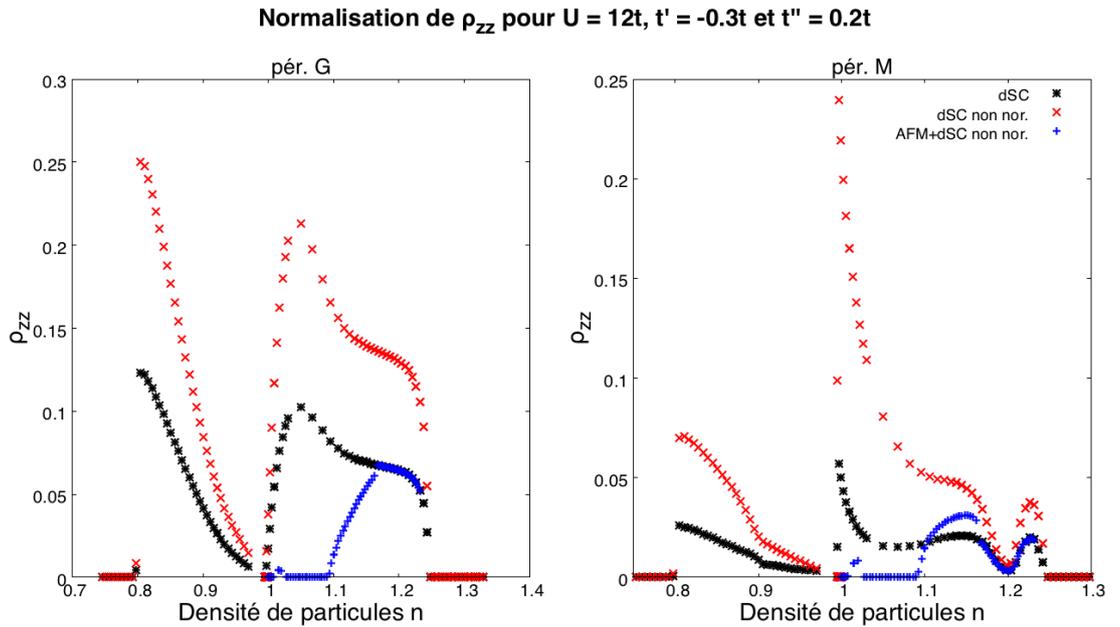


FIGURE N.3 – Exemples montrant ρ_{zz} pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ en *pér. G* et *pér. M*. Les points noirs illustrent ρ_{zz} calculée dans le régime pur *dSC*. Les points bleus montrent les données de ρ_{\perp} dans le régime mixte obtenues en utilisant la formule en régime *dSC+AFM* (5.37). Les points rouges correspondent aux valeurs de ρ_{zz} lorsque la formule (5.37) est utilisée avec des données *dSC* en intégrant sur la zone de Brillouin originale. Dans le schéma *pér. G*, pour tous les dopages, tous les paramètres étudiés donnent un rapport de $\frac{\text{dSC}}{\text{dSC non nor.}} = \frac{1}{2}$. Ce n'est pas le cas pour le schéma *pér. M*, où ce rapport varie selon le dopage. Cela indique, ajouté au comportement erratique de ρ_{zz} en fonction du dopage, que la *pér. G* est plus efficace que la *pér. M* pour rétablir l'invariance sous translation lorsque vient temps de calculer des quantités à deux corps comme ρ_s avec des solutions d'un amas 2×2 .

Normalisation de $\rho_{||}$ pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, et $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ (pér. G)

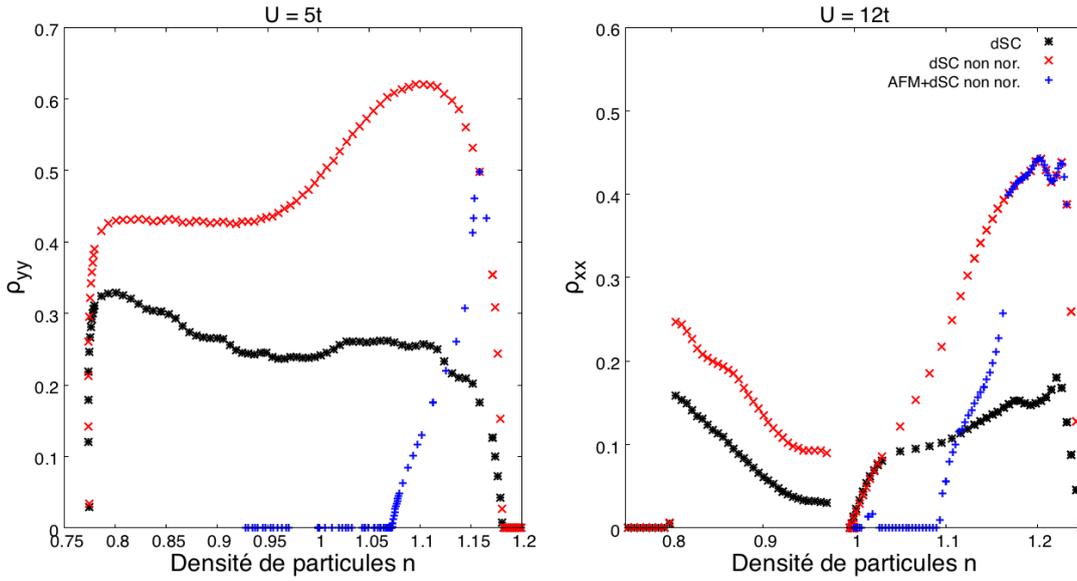


FIGURE N.4 – Exemples montrant ρ_{yy} pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, et ρ_{xx} pour $U = 12t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$, en pér. G. Les points rouges illustrent ρ_{yy} dans le régime pur évaluée avec la formule en régime $dSC+AFM$ (5.36). Les points bleus sont les données de ρ_{yy} en régime mixte évaluées avec la formule (5.36), alors que les points noirs sont les données de $\rho_{||}$ calculées avec l'éq.(5.39). Dans les schémas pér. G et pér. M, les rapports $\frac{dSC}{dSC \text{ non nor.}}$ ne sont pas constants en fonction du dopage, et ce même si la formule (5.36) en régime de coexistence dans le plan équivaut à celle de $\rho_{||}$ (5.39) dans l'état pur lorsque $\langle M \rangle \rightarrow 0$.

Normalisation de ρ_{zz} pour $U = 12t$ ($t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$) et $U = 5t$ ($t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$) (pér. G)

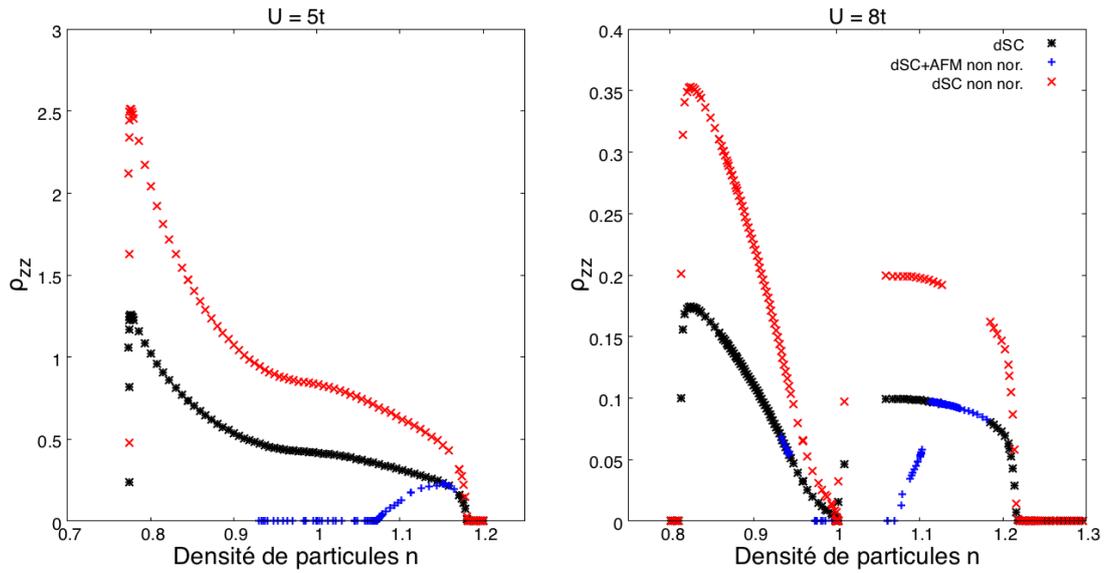


FIGURE N.5 – Exemples montrant ρ_{zz} pour $U = 5t$, $t' = -0.17t$ et $t'' = 0.03t$, et $U = 8t$, $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$ en pér. G. Les points rouges représentent ρ_{zz} dans le régime pur dSC calculée avec la formule (5.37) en intégrant sur la BZ. Les points noirs illustrent ρ_{zz} évaluée avec l'éq.(5.40) dans l'état supraconducteur pur. Les points bleus sont équivalents, à un facteur 2 près, à ceux présentés à la figure N.1 : ils représentent ρ_{zz} calculée dans le régime mixte sans distinction des régimes pur dSC et de coexistence $dSC+AFM$. Un facteur 2 différencie les points rouges des noirs, parce qu'avec l'AFM, la zone de Brillouin réduit de moitié et il faut diviser par deux l'intégrale sur l'espace réciproque (BZ) pour ne pas surdénumérer les états quantiques.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Daniel F. AGTERBERG et Julien GARAUD. « Checkerboard order in vortex cores from pair-density-wave superconductivity ». In : *Physical Review B* 91.10 (mar. 2015). DOI : [10.1103/PhysRevB.91.104512](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.104512).
- [2] O. K. ANDERSEN, A. I. LIECHTENSTEIN, O. JEPSEN et F. PAULSEN. « LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t' , t'' , $t_{\perp}(k)$, and J_{\perp} ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 56.12 (1995), p. 1573–1591.
- [3] P. W. ANDERSON. « Localized Magnetic States in Metals ». In : *Phys. Rev.* 124 (1 1961), p. 41–53. DOI : [10.1103/PhysRev.124.41](https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.41).
- [4] P. W. ANDERSON. « The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity ». In : *Science* 235.4793 (1987), p. 1196–1198. DOI : [10.1126/science.235.4793.1196](https://doi.org/10.1126/science.235.4793.1196).
- [5] N. P. ARMITAGE, P. FOURNIER et R. L. GREENE. « Progress and perspectives on electron-doped cuprates ». In : *Rev. Mod. Phys.* 82 (3 2010), p. 2421–2487. DOI : [10.1103/RevModPhys.82.2421](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.2421).
- [6] W. A. ATKINSON. « Superfluid suppression in d -wave superconductors due to disordered magnetism ». In : *Physical Review B* 75.2 (jan. 2007). DOI : [10.1103/PhysRevB.75.024510](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.024510).
- [7] S. BADOUX et al. « Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor ». In : *Nature* 531.7593 (2016), p. 210–214. DOI : [10.1038/nature16983](https://doi.org/10.1038/nature16983).
- [8] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. « Theory of Superconductivity ». In : *Phys. Rev.* 108 (5 1957), p. 1175–1204. DOI : [10.1103/PhysRev.108.1175](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175).
- [9] Gordon BAYM et Leo P. KADANOFF. « Conservation Laws and Correlation Functions ». In : *Phys. Rev.* 124 (2 1961), p. 287–299. DOI : [10.1103/PhysRev.124.287](https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.287).
- [10] J G BEDNORZ et K.A. MÜLLER. « Possible High- T_c Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System ». In : *Zeitschrift für Physik B* 66 (1986), p. 189–193.
- [11] F. BOSCHINI et al. « Collapse of high- T_c superconductivity via ultrafast quenching of the phase coherence ». In : *Nature Materials* 17.5 (mai 2018), p. 416–420.
- [12] I. BOŽOVIĆ, X. HE, J. WU et A. T. BOLLINGER. « Dependence of the critical temperature in overdoped copper oxides on superfluid density ». In : *Nature* 536.7616 (août 2016), p. 309–311. DOI : [10.1038/nature19061](https://doi.org/10.1038/nature19061).

- [13] Henrik BRUUS et Karsten FLENSBERG. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*. Oxford, UK : Oxford University Press, 2015.
- [14] M. CHARLEBOIS, S. VERRET, A. FOLEY, O. SIMARD, D. SÉNÉCHAL et A.-M. S. TREMBLAY. « Hall effect in cuprates with an incommensurate collinear spin-density wave ». In : *Phys. Rev. B* 96 (20 2017), p. 205132. DOI : [10.1103/PhysRevB.96.205132](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.205132).
- [15] Maxime CHARLEBOIS. « Théorie de champ moyen dynamique pour les systèmes inhomogènes ». Thèse de doctorat. Sherbrooke : Université de Sherbrooke, 2015.
- [16] C. T. CHEN et al. « Electronic states in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ probed by soft-x-ray absorption ». In : *Physical Review Letters* 66.1 (jan. 1991), p. 104–107. DOI : [10.1103/PhysRevLett.66.104](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.66.104).
- [17] Xi CHEN, J. P. LEBLANC et Emanuel GULL. « Superconducting Fluctuations in the Normal State of the Two-Dimensional Hubbard Model ». In : *Physical Review Letters* 115.11 (2015). DOI : [10.1103/PhysRevLett.115.116402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.116402).
- [18] Piers COLEMAN. *Introduction to Many-Body Physics*. 1st. Cambridge, UK, 2015.
- [19] Philippe CORBOZ, T. M. RICE et Matthias TROYER. « Competing states in the t-J model : Uniform d-wave state versus stripe state ». In : *Physical Review Letters* 113.4 (2014). DOI : [10.1103/PhysRevLett.113.046402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.046402).
- [20] O. CYR-CHOINIÈRE, D. LEBOEUF, S. BADOUX, S. DUFOUR-BEAUSÉJOUR, D. A. BONN, W. N. HARDY, R. LIANG, D. GRAF, N. DOIRON-LEYRAUD et Louis TAILLEFER. « Sensitivity of T_c to pressure and magnetic field in the cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$: Evidence of charge-order suppression by pressure ». In : *Physical Review B* 98.6 (août 2018). DOI : [10.1103/PhysRevB.98.064513](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.064513).
- [21] V. J. EMERY et S. A. KIVELSON. « Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density ». In : *Nature* 374 (1995), p. 434. URL : <http://dx.doi.org/10.1038/374434a0>.
- [22] I. ESTERLIS, S. A. KIVELSON et D. J. SCALAPINO. « A bound on the superconducting transition temperature ». In : *npj Quantum Materials* 3.1 (2018), p. 59. DOI : [10.1038/s41535-018-0133-0](https://doi.org/10.1038/s41535-018-0133-0).
- [23] A. FOLEY, S. VERRET, A.-M. S. TREMBLAY et D. SÉNÉCHAL. « Coexistence of Superconductivity and Antiferromagnetism in the Hubbard model for cuprates ». In : *arXiv :1811.12363 [cond-mat]* (nov. 2018). arXiv : 1811.12363.
- [24] E. GULL et A. J. MILLIS. « Superconducting and pseudogap effects on the interplane conductivity and Raman scattering cross section in the two-dimensional Hubbard model ». In : *Phys. Rev. B* 88 (7 2013), p. 075127. DOI : [10.1103/PhysRevB.88.075127](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.075127).

- [25] Emanuel GULL, Andrew J. MILLIS, Alexander I. LICHTENSTEIN, Alexey N. RUBTSOV, Matthias TROYER et Philipp WERNER. « Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models ». In : *Rev. Mod. Phys.* 83 (2 2011), p. 349–404. DOI : [10.1103/RevModPhys.83.349](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.349).
- [26] K. HAGEN. *Particles And Quantum Fields*. World Scientific Publishing Company, 2016. ISBN : 978-981-4740-92-0.
- [27] A. F. HEBARD et A. T. FIORY. « Evidence for the Kosterlitz-Thouless Transition in Thin Superconducting Aluminum Films ». In : *Phys. Rev. Lett.* 44 (4 1980), p. 291–294. DOI : [10.1103/PhysRevLett.44.291](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.44.291).
- [28] Douglas R. HOFSTADTER. « Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields ». In : *Phys. Rev. B* 14 (6 1976), p. 2239–2249. DOI : [10.1103/PhysRevB.14.2239](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.2239).
- [29] N. E. HUSSEY, H. GORDON-MOYS, J. KOKALJ et R. H. MCKENZIE. « Generic strange-metal behavior of overdoped cuprates ». In : *Journal of Physics : Conference Series* 449 (2013). DOI : [10.1088/1742-6596/449/1/012004](https://doi.org/10.1088/1742-6596/449/1/012004).
- [30] Mark JARRELL et J.E. GUBERNATIS. « Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data ». In : *Physics Reports* 269 (1996), p. 133–195. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157395000747>.
- [31] G. S. JENKINS, D. C. SCHMADEL, P. L. BACH, R. L. GREENE, X. BÉCHAMP-LAGANIÈRE, G. ROBERGE, P. FOURNIER, Hiroshi KONTANI et H. D. DREW. « Origin of the anomalous Hall effect in the overdoped n-type superconductor $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: Current-vertex corrections due to antiferromagnetic fluctuations ». In : *Physical Review B* 81.2 (jan. 2010). DOI : [10.1103/PhysRevB.81.024508](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.024508).
- [32] J. D. JORGENSEN, B. W. VEAL, A. P. PAULIKAS, L. J. NOWICKI, G. W. CRABTREE, H. CLAUS et W. K. KWOK. « Structural properties of oxygen-deficient $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ». In : *Phys. Rev. B* 41 (4 1990), p. 1863–1877. DOI : [10.1103/PhysRevB.41.1863](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.1863).
- [33] Emmanuel KANT. *Critique de la faculté de juger*. Traduction et présentation par Alain Renaut. Flammarion, 2000.
- [34] B. KEIMER, S. A. KIVELSON, M. R. NORMAN, S. UCHIDA et J. ZAA-NEN. « From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides ». In : *Nature* 518 (2015). Review Article L3, 179 EP. URL : <http://dx.doi.org/10.1038/nature14165>.
- [35] Hiroshi KONTANI et Kosaku YAMADA. « From Kondo Effect to Fermi Liquid ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* 74.1 (jan. 2005), p. 155–166. DOI : [10.1143/JPSJ.74.155](https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.155).

- [36] J M KOSTERLITZ et D J THOULESS. « Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems ». In : *Journal of Physics C : Solid State Physics* 6.7 (1973), p. 1181. URL : <http://stacks.iop.org/0022-3719/6/i=7/a=010>.
- [37] Evgeny KOZIK, Michel FERRERO et Antoine GEORGES. « Non-existence of the Luttinger-Ward Functional and Misleading Convergence of Skeleton Diagrammatic Series for Hubbard-Like Models ». In : *Phys. Rev. Lett.* 114 (15 2015), p. 156402. DOI : [10.1103/PhysRevLett.114.156402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.156402).
- [38] 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 ». In : *Physical Review Letters* 93.14 (sept. 2004). DOI : [10.1103/PhysRevLett.93.147004](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.147004).
- [39] Alexander L. FETTER et John Dirk WALECKA. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Mineola, NY, USA : Dover Publications, inc, 2003.
- [40] Wei-Cheng LEE, Jairo SINOVA, A. A. BURKOV, Yogesh JOGLEKAR et A. H. MACDONALD. « Theory of reduced superfluid density in underdoped cuprate superconductors ». In : *Physical Review B* 77.21 (juin 2008). DOI : [10.1103/PhysRevB.77.214518](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.214518).
- [41] Yangmu LI, W. TABIS, Y. TANG, G. YU, J. JAROSZYNSKI, N. BARIŠIĆ et M. GREVEN. « Hole-pocket-driven superconductivity and its universal features in the electron-doped cuprates ». In : *arXiv :1810.04634 [cond-mat]* (oct. 2018). arXiv : 1810.04634. URL : <http://arxiv.org/abs/1810.04634>.
- [42] Ansgar LIEBSCH et Ning-Hua TONG. « Finite-temperature exact diagonalization cluster dynamical mean-field study of the two-dimensional Hubbard model : Pseudogap, non-Fermi-liquid behavior, and particle-hole asymmetry ». In : *Physical Review B* 80.16 (oct. 2009). DOI : [10.1103/PhysRevB.80.165126](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.165126).
- [43] Thomas MAIER, Mark JARRELL, Thomas PRUSCHKE et Matthias H. HETTLER. « Quantum cluster theories ». In : *Rev. Mod. Phys.* 77 (3 2005), p. 1027–1080. DOI : [10.1103/RevModPhys.77.1027](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.77.1027).
- [44] P. R. MANDAL, Tarapada SARKAR, J. S. HIGGINS et Richard L. GREENE. « Nernst effect in the electron-doped cuprate superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ ». In : *Phys. Rev. B* 97 (1 2018), p. 014522. DOI : [10.1103/PhysRevB.97.014522](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.014522).
- [45] R. S. MARKIEWICZ, S. SAHRakorpi, M. LINDROOS, Hsin LIN et A. BANSIL. « One-band tight-binding model parametrization of the high- T_c cuprates including the effect of k_z dispersion ». In : *Phys. Rev. B* 72 (5 2005), p. 054519. DOI : [10.1103/PhysRevB.72.054519](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.054519).
- [46] Paul H. E. MEIJER. « Kamerlingh Onnes and the discovery of superconductivity ». In : *American Journal of Physics* 62.12 (1994), p. 1105–1108. DOI : [10.1119/1.17669](https://doi.org/10.1119/1.17669).

- [47] L. MICHEL et B. I. ZHILINSKII. « Symmetry, invariants, topology. Basic tools ». In : *Phys. Rep.* 341 (2001), p. 11–84. URL : http://www.ihes.fr/~vergne/LouisMichel/publications/PhysRep.341_11_2001.pdf.
- [48] 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 $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ ». In : *Nature* 445 (2007). URL : <https://doi.org/10.1038/nature05437>.
- [49] David R. NELSON et J. M. KOSTERLITZ. « Universal Jump in the Superfluid Density of Two-Dimensional Superfluids ». In : *Physical Review Letters* 39.19 (nov. 1977), p. 1201–1205. DOI : [10.1103/PhysRevLett.39.1201](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.39.1201).
- [50] Friedrich NIETZSCHE. *Le Gai Savoir*. Folio, 2001.
- [51] R. NOURAFKAN et A.-M. S. TREMBLAY. « Hall and Faraday effects in interacting multiband systems with arbitrary band topology and spin-orbit coupling ». In : *Physical Review B* 98.16 (oct. 2018). DOI : [10.1103/PhysRevB.98.165130](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.165130).
- [52] *Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing, Second Edition*. 2nd. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1992.
- [53] C. PANAGOPOULOS, J. R. COOPER, T. XIANG, G. B. PEACOCK, I. GAMESON et P. P. EDWARDS. « Probing the Order Parameter and the c -Axis Coupling of High- T_c Cuprates by Penetration Depth Measurements ». In : *Phys. Rev. Lett.* 79 (12 1997), p. 2320–2323. DOI : [10.1103/PhysRevLett.79.2320](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.2320).
- [54] E. PAVARINI, I. DASGUPTA, T. SAHA-DASGUPTA, O. JEPSEN et O. K. ANDERSEN. « Band-Structure Trend in Hole-Doped Cuprates and Correlation with $T_{c\text{max}}$ ». In : *Phys. Rev. Lett.* 87 (4 2001), p. 047003. DOI : [10.1103/PhysRevLett.87.047003](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.047003).
- [55] Michael POTTHOFF. « Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons ». In : *The European Physical Journal B - Condensed Matter* 32.4 (avr. 2003). arXiv : cond-mat/0301137, p. 429–436. DOI : [10.1140/epjb/e2003-00121-8](https://doi.org/10.1140/epjb/e2003-00121-8).
- [56] Alexis REYMBAUT. « Universalité du crossover de Mott à demi-remplissage et effets de la répulsion coulombienne aux premiers voisins sur la dynamique supraconductrice des isolants de Mott dopés aux trous ». Thèse de doctorat. Sherbrooke : Université de Sherbrooke, 2016.
- [57] H. SAADAoui et al. « The phase diagram of electron-doped $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ ». In : *Nature Communications* 6.1 (déc. 2015). DOI : [10.1038/ncomms7041](https://doi.org/10.1038/ncomms7041).
- [58] Subir SACHDEV. *Quantum Phase Transitions*. 2nd. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 2011.

- [59] Shiro SAKAI, Giorgio SANGIOVANNI, Marcello CIVELLI, Yukitoshi MOTOME, Karsten HELD et Masatoshi IMADA. « Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory ». In : *Physical Review B* 85.3 (jan. 2012). DOI : [10.1103/PhysRevB.85.035102](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.035102).
- [60] A. SCHILLING, M. CANTONI, J. D. GUO et H. R. OTT. « Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system ». In : *Nature* 363 (mai 1993), p. 56. URL : <https://doi.org/10.1038/363056a0>.
- [61] Arthur SCHOPENHAUER. *Les aphorismes sur la sagesse dans la vie*. Createspace, 2015.
- [62] J. SCHWICHTENBERG. *Physics from Symmetry*. Undergraduate Lecture Notes in Physics. Springer International Publishing, 2015. ISBN : 978-3-319-19201-7.
- [63] D. SÉNÉCHAL. « An introduction to quantum cluster methods ». In : *ArXiv e-prints* (juin 2008). arXiv : [0806.2690 \[cond-mat.str-el\]](https://arxiv.org/abs/0806.2690).
- [64] D. SÉNÉCHAL, D. PEREZ et M. PIORO-LADRIÈRE. « Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory ». In : *Phys. Rev. Lett.* 84 (3 2000), p. 522–525. DOI : [10.1103/PhysRevLett.84.522](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.522).
- [65] David SÉNÉCHAL, Danny PEREZ et Dany PLOUFFE. « Cluster perturbation theory for Hubbard models ». In : *Phys. Rev. B* 66 (7 2002), p. 075129. DOI : [10.1103/PhysRevB.66.075129](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.075129).
- [66] S. G. SHARAPOV et J. P. CARBOTTE. « Superfluid density and competing orders in *d*-wave superconductors ». In : *Physical Review B* 73.9 (mar. 2006). DOI : [10.1103/PhysRevB.73.094519](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.094519).
- [67] Qimiao SI, Rong YU et Elihu ABRAHAMS. « High-temperature superconductivity in iron pnictides and chalcogenides ». In : *Nature Reviews Materials* 1 (2016). Review Article, p. 16017. URL : <http://dx.doi.org/10.1038/natrevmats.2016.17>.
- [68] John SINGLETON et Charles MIELKE. « Quasi-two-dimensional organic superconductors : A review ». In : *Contemporary Physics* 43.2 (2002), p. 63–96. DOI : [10.1080/00107510110108681](https://doi.org/10.1080/00107510110108681).
- [69] Maddury SOMAYAZULU, Muhtar AHART, Ajay K. MISHRA, Zachary M. GEBALLE, Maria BALDINI, Yue MENG, Viktor V. STRUZH-KIN et Russell J. HEMLEY. « Evidence for superconductivity above 260 K in lanthanum superhydride at megabar pressures ». In : *arXiv :1808.07695 [cond-mat]* (août 2018). arXiv : 1808.07695.
- [70] Baruch SPINOZA. *L'Éthique*. Réédition dans la collection Points Essais en 2010. Seuil, 1988.
- [71] J. G. STOREY. « Hall effect and Fermi surface reconstruction via electron pockets in the high- T_c cuprates ». In : *EPL (Europhysics Letters)* 113.2 (2016), p. 27003. URL : <http://stacks.iop.org/0295-5075/113/i=2/a=27003>.

- [72] David SÉNÉCHAL et A.-M. S. TREMBLAY. « Hot Spots and Pseudogaps for Hole- and Electron-Doped High-Temperature Superconductors ». In : *Physical Review Letters* 92.12 (mar. 2004). DOI : [10.1103/PhysRevLett.92.126401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.126401).
- [73] J. L. TALLON, J. W. LORAM, J. R. COOPER, C. PANAGOPOULOS et C. BERNHARD. « Superfluid density in cuprate high- T_c superconductors : A new paradigm ». In : *Phys. Rev. B* 68 (18 2003), p. 180501. DOI : [10.1103/PhysRevB.68.180501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.180501).
- [74] Y. TOKURA, H. TAKAGI et S. UCHIDA. « A superconducting copper oxide compound with electrons as the charge carriers ». In : *Nature* 337 (1989). URL : <https://doi.org/10.1038/337345a0>.
- [75] A.-M. S. TREMBLAY. *Problème à N-corps*. Non publié. Sherbrooke, QC, Canada : Notes de cours, 2017. URL : <https://www.physique.usherbrooke.ca/tremblay/cours/phy-892/N-corps-2017.pdf>.
- [76] I. TSUKADA et S. ONO. « Negative Hall coefficients of heavily overdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ». In : *Physical Review B* 74.13 (oct. 2006). DOI : [10.1103/PhysRevB.74.134508](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.134508). (Visité le 05/09/2018).
- [77] Y. J. UEMURA et al. « Universal Correlations between T_c and $\frac{n_s}{m^*}$ (Carrier Density over Effective Mass) in High- T_c Cuprate Superconductors ». In : *Phys. Rev. Lett.* 62 (19 1989), p. 2317–2320. DOI : [10.1103/PhysRevLett.62.2317](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.2317). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.62.2317>.
- [78] S. VERRET, O. SIMARD, M. CHARLEBOIS, D. SÉNÉCHAL et A.-M. S. TREMBLAY. « Phenomenological theories of the low-temperature pseudogap : Hall number, specific heat, and Seebeck coefficient ». In : *Phys. Rev. B* 96 (12 2017), p. 125139. DOI : [10.1103/PhysRevB.96.125139](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.125139).
- [79] Simon VERRET. « Couplage interplan et compétition de phases dans le modèle de Hubbard des cuprates ». Thèse de maîtrise. Sherbrooke : Université de Sherbrooke, 2014.
- [80] Simon VERRET. « Rôle des ondes de densité dans les cuprates supraconducteurs ». Thèse de doctorat. Sherbrooke : Université de Sherbrooke, 2018.
- [81] Cédric WEBER, Kristjan HAULE et Gabriel KOTLIAR. « Strength of correlations in electron- and hole-doped cuprates ». In : *Nature Physics* 6.8 (août 2010), p. 574–578. DOI : [10.1038/nphys1706](https://doi.org/10.1038/nphys1706).
- [82] Philipp WERNER, Armin COMANAC, Luca de'MEDICI, Matthias TROYER et Andrew J. MILLIS. « Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models ». In : *Phys. Rev. Lett.* 97 (7 2006), p. 076405. DOI : [10.1103/PhysRevLett.97.076405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.076405).

- [83] T. XIANG et J. M. WHEATLEY. « c Axis Superfluid Response of Copper Oxide Superconductors ». In : *Physical Review Letters* 77.22 (nov. 1996), p. 4632–4635. DOI : [10.1103/PhysRevLett.77.4632](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.4632).
- [84] Kai-Yu YANG, T. M. RICE et Fu-Chun ZHANG. « Phenomenological theory of the pseudogap state ». In : *Phys. Rev. B* 73 (17 2006), p. 174501. DOI : [10.1103/PhysRevB.73.174501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.174501).
- [85] Bo-Xiao ZHENG et Garnet Kin-Lic CHAN. « Ground-state phase diagram of the square lattice Hubbard model from density matrix embedding theory ». In : *Physical Review B* 93.3 (jan. 2016). DOI : [10.1103/PhysRevB.93.035126](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.035126).
- [86] J. ZINN-JUSTIN. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Clarendon Press, Oxford, UK, 1993.