

# **Couplage interplan et compétition de phases dans le modèle de Hubbard des cuprates**

par

Simon Verret

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, 1<sup>er</sup> septembre 2013

Le 15 janvier 2014

*le jury a accepté le mémoire de Monsieur Simon Verret dans sa version finale.*

Membres du jury

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

Prof. David Sénéchal  
Codirecteur de recherche  
Département de physique

Prof. Patrick Fournier  
Membre interne  
Département de physique

Prof. David Poulin  
Président rapporteur  
Département de physique

*Hofstadter's Law : It always takes longer than you expect, even when you take into account Hofstadter's Law.*

— *Douglas Hofstadter*

# Sommaire

Il y a presque trente ans, un des problèmes les plus difficiles de la physique moderne voyait le jour : la supraconductivité à haute température critique dans les cuprates. Depuis, l'hypothèse nommée *modèle Hubbard* est rapidement devenu un des candidats les plus prometteurs à en détenir la solution. Dans ce contexte, ce mémoire présente des travaux de calculs numériques sur les phases de la matière prédites par le modèle de Hubbard. Le projet poursuit notamment deux objectifs. En premier lieu, on considère un *couplage interplan* dans le modèle, ce qui le rend plus réaliste que sa version 2D habituelle. Et en deuxième lieu, on laisse les phases antiferromagnétique et supraconductrice coexister avec en plus une autre phase supraconductrice de type  $\pi$ -triplet. Plus de détails sur le contexte et ces deux objectifs sont présentés au chapitre 1 et le modèle de Hubbard est détaillé au chapitre 2.

Pour obtenir des solutions numériques au modèle, les méthodes utilisées sont *la théorie de champ moyen dynamique sur amas* (CDMFT) et *l'approximation de l'amas variationnel* (VCA). Ces méthodes ainsi que le formalisme nécessaire pour les aborder sont présentés au chapitre trois. Notons qu'on utilise ces méthodes pour amas avec des méthodes de diagonalisation exacte qui ne feront pas partie de la discussion.

Enfin, le dernier chapitre présente tous les résultats obtenus avec ce projet, qui mènent à deux conclusions principales. Premièrement, le couplage tridimensionnel tel qu'ajouté n'a pas fait ressortir de tendance nette dans les résultats. Cela indique une de deux choses : soit les effets interplans sont négligeables dans le modèle de Hubbard, soit il faudra les inclure d'une façon plus complète dans le futur. Deuxièmement, on observe que la phase  $\pi$ -triplet apparaît lorsqu'il y a coexistence entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle mais que ces deux dernières phases se nuisent fortement l'une à l'autre, confirmant qu'il y a compétition de phases.

## Remerciements

Je crois que chacun mérite au moins un merci équivalent à l'impact qu'il a eu dans ma vie, mais vous êtes trop nombreux pour pouvoir rendre justice à chacun dans un petit texte de remerciements. Donc, ici, je souhaite mettre en évidence ceux qui ont contribué plus ou moins directement à faire de ce mémoire une réalité.

D'abord, merci à tous les professeurs qui m'ont permis de cheminer jusqu'ici. Particulièrement merci à Claudine Allen, sans qui je n'aurais jamais goûté à la recherche scientifique. Merci aussi à Maxime Charlebois ; il n'est pas prof, mais il aura joué un rôle de tuteur important dans mon cheminement vers les études graduées. Un merci très particulier à Jean-François Lemay et Danièle Pacaud, professeurs de vie qui m'ont remis sur les rails au moment où j'en avais le plus besoin. Un merci bien naturel et bien mérité à mon comité de suivi, David Poulin et Patrick Fournier. Et enfin, naturellement, mais non moins du fond du coeur, merci beaucoup à David Sénéchal, qui, depuis le début, impressionne et inspire avec raison, et au moins autant merci à André-Marie Tremblay, certainement l'homme le plus admirable que j'aie eu la chance de rencontrer.

Merci beaucoup à ceux avec qui j'ai fait des devoirs et des projets. Les premiers et probablement les plus importants sont Simon Gourdeau et Maxime Tessier, avec qui on s'est moqué de tous les devoirs de math et de physique d'avant l'Université. Merci à tous mes coéquipiers du bac, particulièrement Alexandre Trottier et Charles Collins-Fekete, sans qui mes notes n'auraient pas été épargnées et merci à ceux du bac qui ont fait le même choix que moi pour la maîtrise, Alexandre Juneau, Kevin Spahr, Sophie Dufour-Beauséjour et Alexandre Foley, qui furent aussi de bons amis dans cette aventure. Enfin, merci à la promotion *mezenplus*, qui m'a accueilli avec *courage* et à mes collègues de bureau, avec qui j'ai appris beaucoup.

À mi-chemin entre les amis et la famille, merci à Sophie Rochette, pour ses corrections. Je suis content de partager tout ça avec toi aujourd'hui.

Enfin, les plus importants, même si je suis parti si loin d'eux, merci à la famille. Merci à grand-maman Bis, feu grand-papa Bis, grand-maman Denise et grand-papa Albert, qui s'assurent, tous à leur façon, que tout aille bien. Merci à mon frère Sébastien ; il a compris certaines choses beaucoup mieux que moi et me fait voir les choses différemment, mais ça, je ne suis pas sûr qui l'ait complètement compris. Merci à ma soeur Joannie, qui me rappelle toujours de ne pas devenir autiste, ça c'est très important ! Mais surtout, merci à mon père Denis Verret et ma mère Lucie Bissonnette ; ils m'ont appris à être toujours heureux, et c'était celui-là le cadeau le plus précieux. Soyez très fiers. Je vous aime.

# Table des matières

Liste des figures	9
Introduction	12
<b>1 Contexte et objectifs</b>	<b>14</b>
1.1 Supraconductivité et plans $\text{CuO}_2$	14
1.1.1 Supraconducteurs	14
1.1.2 Les cuprates : supraconducteurs à haute $T_c$	15
1.1.3 Plans de cuivre oxygène	16
1.1.4 Objectif I : l'effet du couplage interplan	17
1.2 Supraconductivité et antiferromagnétisme	19
1.2.1 Interactions et dopage	19
1.2.2 Diagramme de phases des cuprates	20
1.2.3 Paramètres d'ordre et diagramme de phase à $T = 0$	21
1.2.4 Objectif II : Coexistence de phases	22
<b>2 Le modèle de Hubbard</b>	<b>23</b>
2.1 Définition et propriétés	23
2.1.1 Hamiltonien	23
2.1.2 Isolant de Mott et antiferromagnétisme pour $U \gg t$	25
2.1.3 Structure de bande pour $U \ll t$	26
2.2 Des paramètres réalistes	27
2.2.1 Paramètres de la littérature	27
2.2.2 Paramètres inédits	29
2.3 Paramètres d'ordre	30
2.3.1 Paramètre d'ordre antiferromagnétique	30
2.3.2 Paramètre d'ordre supraconducteur	31
2.4 Notes sur les modèles tridimensionnels	34

<b>3</b>	<b>Méthodes de calcul</b>	<b>36</b>
3.1	Problème à N-corps . . . . .	36
3.1.1	Définition du propagateur (fonction de Green) . . . . .	37
3.1.2	Propagateur avec Interactions : self-énergie . . . . .	43
3.2	Méthodes de calcul sur Amas . . . . .	47
3.2.1	Fonctionnelle de la self-énergie (Potthoff) . . . . .	48
3.2.2	Approximation de l'amas variationnel (VCA) . . . . .	52
3.2.3	Théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) . . . . .	53
3.2.4	Paramètres de bain en CDMFT . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Résultats</b>	<b>58</b>
4.1	Détails sur les calculs et l'affichage des résultats . . . . .	58
4.1.1	le code QCM . . . . .	58
4.1.2	Balayage en $\langle \hat{n} \rangle$ . . . . .	58
4.1.3	Un mot sur l'Annexe A.5 . . . . .	60
4.2	Résultats pour l'objectif I : sauts interplans . . . . .	60
4.2.1	$t_z$ réalistes . . . . .	60
4.2.2	$t_z$ artificiels . . . . .	61
4.2.3	Discussion . . . . .	63
4.3	Résultats pour l'objectif II : coexistence . . . . .	66
4.3.1	Coexistence entre $dSC$ , AF et $\pi SC$ . . . . .	66
4.3.2	Variation de $U$ . . . . .	69
4.3.3	Discussion . . . . .	73
4.4	Observations supplémentaires . . . . .	76
4.4.1	Coexistence et sauts interplans . . . . .	76
4.4.2	Effet des énergies de bains AF . . . . .	76
	<b>Conclusion</b>	<b>78</b>
	<b>Annexes</b>	<b>80</b>
A.1	Relation de dispersion de $H_K$ . . . . .	81
A.2	Transformées de Fourier de $\hat{M}$ et $\hat{D}$ . . . . .	82
A.3	Commutateur de $\hat{M}$ et $\hat{D}$ . . . . .	84
A.4	Représentation de Lehmann de la fonction de Green . . . . .	87
A.5	Paramètres convergés de tous les calculs . . . . .	90
	<b>Bibliographie</b>	<b>115</b>

# Liste des figures

1.1	Progression de la $T_c$ des supraconducteurs avec le temps . . . . .	15
1.2	Structure typique des cuprates . . . . .	16
1.3	Corrélation entre $T_c$ et le nombre de plans par maille unitaire . . . . .	17
1.4	Schéma des sauts interplans . . . . .	18
1.5	Diagramme de phase typique des cuprates . . . . .	20
2.1	Illustration du modèle de Hubbard 2D . . . . .	24
2.2	Isolant de Mott et transfert de poids spectral dû aux interactions . . . . .	26
2.3	Dispersion et surface de Fermi du modèle de Hubbard à $U=0$ . . . . .	28
2.4	Paramètre d'ordre antiferromagnétique . . . . .	30
2.5	Zone de Brillouin antiferromagnétique . . . . .	31
2.6	Symétrie de type $d$ des paramètres d'ordre supraconducteurs . . . . .	32
2.7	Superposition des paramètres d'ordre supraconducteurs . . . . .	34
2.8	Différences entre les réseaux tetragonaux et orthorombique . . . . .	35
3.1	Amas utilisés pour le projet . . . . .	47
4.1	Densité électronique $\langle \hat{n} \rangle$ en fonction du potentiel chimique $\mu$ . . . . .	59
	<b>Diagrammes de phases</b> . . . . .	<b>60</b>
4.2	VCA 2x2 pour NCO, LCO et TBCO, $t_z$ réaliste . . . . .	61
4.3	VCA 2x2 pour le YBCO, $t_z$ de 0 à 0.5 . . . . .	62
4.4	VCA 4x3 pour le YBCO, $t_z$ de 0 à 0.5 . . . . .	63
4.5	CDMFT 2x2 pour le YBCO, $t_z$ de 0 à 0.5 . . . . .	64
4.6	VCA 2x2 et 3x4 pour YBCO, coexistence de $\langle \hat{M} \rangle$ , $\langle \hat{D} \rangle$ et $\langle \hat{T} \rangle$ . . . . .	66
4.7	CDMFT 2x2 pour YBCO, coexistence de $\langle \hat{M} \rangle$ , $\langle \hat{D} \rangle$ et $\langle \hat{T} \rangle$ . . . . .	67
4.8	CDMFT 2x2 pour LCO, coexistence de $\langle \hat{M} \rangle$ , $\langle \hat{D} \rangle$ et $\langle \hat{T} \rangle$ et instabilités . . . . .	69
4.9	VCA 4x3 pour YBCO, variation de $U= 6, 7$ et $8$ . . . . .	70
4.10	VCA 2x2 pour YBCO, variation de $U= 6, 7, 8$ et $12$ . . . . .	71
4.11	CDMFT 2x2 pour YBCO, variation de $U= 6, 7, 8$ et $12$ . . . . .	72

4.12 CDMFT 2x2 pour YBCO $U=7$ , coexistence et instabilités . . . . .	74
4.13 CDMFT 2x2 pour YBCO incluant $t_z$ et la coexistence de phase . . . . .	76
4.14 VCA 2x2 pour YBCO incluant $t_z$ et la coexistence de phase . . . . .	77
4.15 CDMFT 2x2 pour YBCO sans les $e_{b_{AF}}$ . . . . .	77
4.16 CDMFT 2x2 pour LCO sans les $e_{b_{AF}}$ . . . . .	78

**Annexe A.5 : paramètres convergés 90**

A.1 VCA 2x2, NCO, $t_z$ réaliste, relation entre $\langle \hat{n} \rangle$ et $\mu$ . . . . .	90
A.2 VCA 2x2, NCO, $t_z$ réaliste, valeurs convergées pour $M_1$ et $D_1$ . . . . .	90
A.3 VCA 2x2, NCO, $t_z$ réaliste, valeurs convergées pour $\mu_1$ . . . . .	91
A.4 VCA 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, relation entre $\langle \hat{n} \rangle$ et $\mu$ . . . . .	91
A.5 VCA 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, valeurs convergées de $M_1$ et $D_1$ . . . . .	92
A.6 VCA 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, valeurs convergées pour $\mu_1$ . . . . .	92
A.7 VCA 4x3, YBCO, $t_z$ artificiels, relation entre $\langle \hat{n} \rangle$ et $\mu$ . . . . .	93
A.8 VCA 4x3, YBCO, $t_z$ artificiels, valeurs convergées de $M_1$ et $D_1$ . . . . .	93
A.9 VCA 4x3, YBCO, $t_z$ artificiels, valeurs convergées pour $\mu_1$ . . . . .	94
A.10 CDMFT 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, relation entre $\langle \hat{n} \rangle$ et $\mu$ . . . . .	94
A.11 CDMFT 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, paramètres du bain normal . . . . .	95
A.12 CDMFT 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, paramètres du bain AF . . . . .	96
A.13 CDMFT 2x2, YBCO, $t_z$ artificiels, paramètres du bain SC . . . . .	97
A.14 VCA 2x2, YBCO, coexistence, relation $\langle \hat{n} \rangle - \mu$ et paramètres $\mu_1$ , $M_1$ et $D_1$ . . . . .	98
A.15 VCA 4x3, YBCO, coexistence, relation $\langle \hat{n} \rangle - \mu$ et paramètres $\mu_1$ , $M_1$ et $D_1$ . . . . .	99
A.16 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $n$ . . . . .	100
A.17 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $e_{b1}$ . . . . .	101
A.18 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $e_{b2}$ . . . . .	102
A.19 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $t_{b1}$ . . . . .	103
A.20 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $t_{b1}$ . . . . .	104
A.21 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $e_{b_{AF1}}$ . . . . .	105
A.22 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $e_{b_{AF2}}$ . . . . .	106
A.23 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $t_{b_{AF1}}$ . . . . .	107
A.24 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $t_{b_{AF2}}$ . . . . .	108
A.25 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $d_{s1}$ . . . . .	109
A.26 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $d_{s2}$ . . . . .	110
A.27 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $t_{d1}$ . . . . .	111
A.28 CDMFT 2x2, YBCO, variation de $U$ , paramètre $t_{d2}$ . . . . .	112
A.29 VCA 2x2, YBCO, variation de $U$ , relation $\langle \hat{n} \rangle - \mu$ et para. $\mu_1$ , $M_1$ et $D_1$ . . . . .	113

A.30 VCA 4x3, YBCO, variation de $U$ , relation $\langle \hat{n} \rangle - \mu$ et para. $\mu_1$ , $M_1$ et $D_1$	114
A.31 CDMFT 2x2, YBCO, sans les $e_{b_{AF}}$ , relation $\langle \hat{n} \rangle - \mu$ . . . . .	115
A.32 CDMFT 2x2, YBCO, sans les $e_{b_{AF}}$ , paramètres de bains normaux . .	116
A.33 CDMFT 2x2, YBCO, sans les $e_{b_{AF}}$ , paramètres $t_{b_{AF}}$ et $d_s$ . . . . .	117

# Introduction

Avec la céramique, on peut faire de la vaisselle, des planchers, et aussi embêter toute la communauté scientifique pendant presque 30 ans. Car, il faut bien le dire, peu de découvertes ont donné autant de fil à retordre aux scientifiques que celles des céramiques nommées *cuprates*. De tous les matériaux connus, ces derniers sont les seuls qui peuvent devenir supraconducteurs au-delà de la température de l'azote liquide. Or, même si plusieurs autres supraconducteurs, fonctionnant à plus basse température, sont aujourd'hui à l'oeuvre dans des technologies comme l'imagerie par résonance magnétique (IRM), les ultradétecteurs de champ magnétique à SQUID (Superconducting quantum interference device), et même certains prototypes de trains à lévitation, les cuprates, eux, nous laissent sur notre faim. Le potentiel technologique de leur supraconductivité à haute température est immense, mais puisqu'on ne comprend toujours pas son fonctionnement, les applications sont extrêmement restreintes. Un jour viendra, croient certains, où la recherche dans ce domaine permettra de franchir le dernier retranchement de la supraconductivité, c'est-à-dire de trouver un supraconducteur fonctionnant à la température de la pièce.

On pourrait croire que le problème des cuprates reste sans solution par manque d'idées originales, mais c'est plutôt l'inverse : il y a trop de suggestions, et elles sont toutes trop difficiles à vérifier. On est donc aux prises avec une immense quantité d'hypothèses dont aucune ne fait l'unanimité. Donc pour parer à cette situation, il est essentiel de tester chacune d'elles, une par une, dans le but d'éliminer les mauvaises, ou au contraire, de faire rayonner celles qui s'avèrent les meilleures. À cette tâche astronomique, le projet présenté dans ce mémoire se veut une humble contribution. L'objectif général est d'obtenir les prédictions venant de l'hypothèse du *modèle de Hubbard* grâce à des calculs numériques qui cherchent à reproduire fidèlement le *diagramme de phases* mesuré dans les expériences sur les cuprates. On concentrera notre attention sur deux aspects de ces calculs : le premier est l'importance de la troisième dimension dans le modèle, et le deuxième est l'importance de la compétition

entre la supraconductivité et les phases magnétiques.

Au premier chapitre, ces objectifs seront présentés en détail, avec le contexte qui justifie leur importance. Au deuxième chapitre, on définira précisément le modèle de Hubbard, et nous verrons qu'il est particulièrement difficile d'obtenir ses prédictions. Il faudra donc présenter, au troisième chapitre, les méthodes d'approximation nécessaires pour y arriver. On commencera par une révision sommaire des méthodes du *problème à  $N$ -corps*, ce qui permettra de bien définir les deux méthodes théoriques utilisées : la théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT), et l'approximation de l'amas variationnel (VCA). On finira, au quatrième chapitre, avec les prédictions obtenues avec ces méthodes pour le diagramme de phase. On obtiendra deux conclusions au projet. Premièrement, on verra qu'à l'intérieur du modèle considéré la troisième dimension n'a pas d'impact sur les résultats et on discutera plus en détail de ce que cela peut impliquer. Deuxièmement, on verra que la compétition entre la phase *antiferromagnétique* et la phase supraconductrice influence beaucoup la forme des diagrammes et que cette compétition permet aussi l'existence de la supraconductivité  $\pi$ -triplet.

## Chapitre 1

# Contexte et objectifs

## 1.1 Supraconductivité et plans $\text{CuO}_2$

### 1.1.1 Supraconducteurs

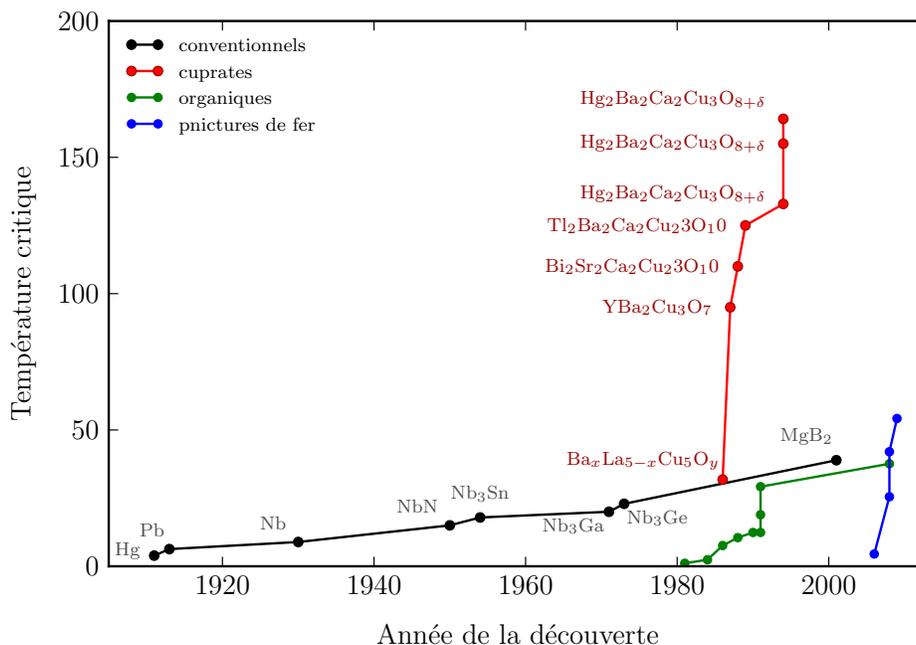
On définit un supraconducteur par deux propriétés exceptionnelles. La première est la résistivité électrique nulle, qui permet donc le transport de courant électrique sans perte. La deuxième, nommée *effet Meissner*, consiste en l'expulsion des champs magnétiques, et on peut observer son impact lorsqu'un supraconducteur lévite au-dessus d'un aimant. Ces propriétés formidables permettraient une foule d'applications techniques, si ce n'était que pour l'instant, on ne peut les obtenir qu'à très basse température.

L'état supraconducteur est limité en température, car il est en fait une *phase de la matière*. Tout comme l'eau se retrouve sous phase solide, liquide ou gazeuse, les électrons de la matière se retrouvent naturellement en différentes *phases* électroniques. Certaines sont familières, par exemple les phases métallique, isolante ou ferromagnétique, mais d'autres sont plus exotiques, comme l'antiferromagnétisme ou, bien sûr, la supraconductivité.

De plus, à l'instar de l'eau, qui ne devient solide que sous son point de congélation, on obtient un supraconducteur en passant sous sa *température critique* ( $T_c$ ). Celle-ci est généralement très basse, à quelques degrés Kelvin ( $\sim -270^\circ\text{C}$ ), rendant l'utilisation des supraconducteurs dans les applications pratiques difficiles. Heureusement, comme il y a des matériaux se solidifiant à plus haute température que l'eau, on trouve parfois des supraconducteurs dotés d'une  $T_c$  plus élevée que la moyenne. Les températures critiques les plus élevées recensées à ce jour sont celles des matériaux nommés *cuprates*.

## 1.1.2 Les cuprates : supraconducteurs à haute $T_c$

Le nom cuprates désigne certaines céramiques d'oxydes de cuivre caractérisées par des  $T_c$  très élevées qui furent découvertes dans les années 80. À cette époque, le dossier de la supraconductivité était quasiment clos, car la célèbre théorie B.C.S. (Bardeen, Cooper et Schrieffer, 1957) [1], qui avait mis fin à près de 50 ans de recherche, arrivait à prédire quasiment toutes les observations. La plus haute  $T_c$  connue était alors de 23 K pour le  $Nb_3Ge$ , et la théorie laissait peu d'espoir qu'on dépasserait un jour 30 K. Malgré cela, dans les années 70, on découvrit les *sels de Bechgaard*, composés organiques qui étaient supraconducteurs sans que la théorie BCS ne puisse l'expliquer. Tout n'était donc pas réglé dans la recherche sur la supraconductivité. [2]



**Figure 1.1** Progression de la  $T_c$  des supraconducteurs avec le temps [2]

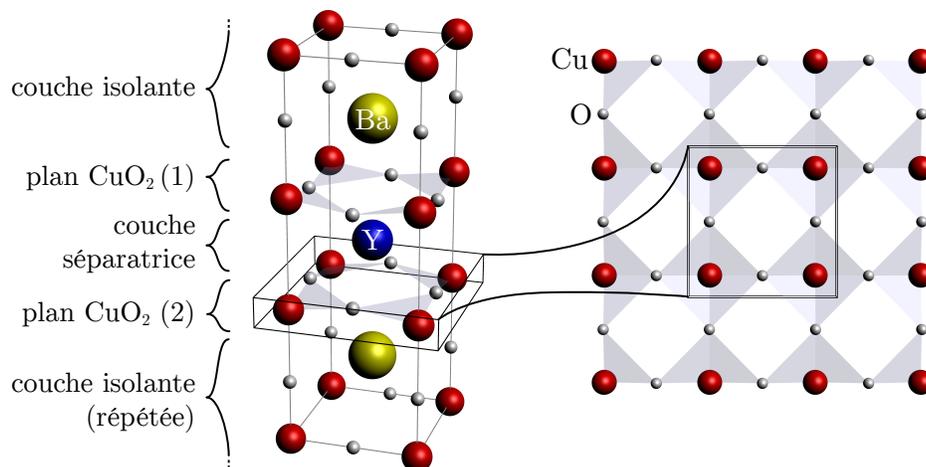
En 1986, les physiciens Bednorz et Müller découvrirent que certains systèmes de Ba-La-Cu-O (LCO) devenaient supraconducteurs aux alentours de 30 K [3]. Peu après, l'équipe de Paul Chu découvrit la  $T_c$  phénoménale d'un composé de Y-Ba-Cu-O (YBCO) à 93 K [4]. Celle-ci dépassait pour la première fois la température de liquéfaction de l'azote, 77 K, rendant possible les démonstrations grand public et les applications techniques peu coûteuses. La supraconductivité se vit alors propulsée vers les grandes priorités scientifiques : on cherchait le supraconducteur à température am-

biente. Une progression rapide de  $T_c$  s'en suivit (figure 1.1), atteignant son maximum en 1993, au-delà des 150 K, pour les composés de Hg-Ba-Ca-Cu-O sous pression [5].

La progression de  $T_c$  est aujourd'hui bloquée et nous ne comprenons pas complètement ce qui cause la supraconductivité dans les cuprates. Pour cette raison, ils forment avec les supraconducteurs organiques, les composés à fermions lourds, les pnictures de fer et le  $C_{60}$  (Buckyballs), le groupe des *supraconducteurs non conventionnels* [6]. De plus, à cause de leur  $T_c$  très élevée, les cuprates et certains composés de fer sont mis à part pour former la classe des *supraconducteurs à haute température critique* (H.T.C.). Après plus de 30 ans de recherche intensive, les H.T.C. demeurent un casse-tête des plus coriaces de la physique.

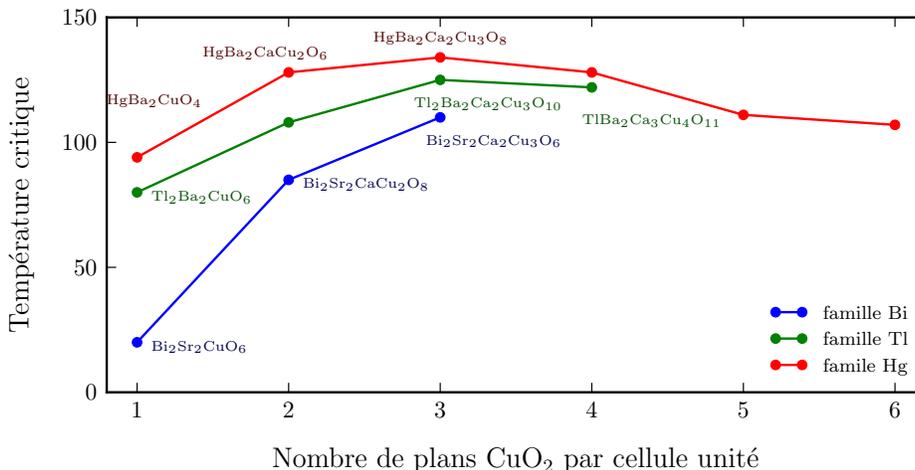
### 1.1.3 Plans de cuivre oxygène

Un point commun à tous les cuprates est soupçonné d'être responsable de leurs propriétés exceptionnelles : leur composition en plans atomiques de cuivre oxygène ( $CuO_2$ ), représentée à la figure 1.2. En général, la maille élémentaire d'un cuprate contient un ou plusieurs de ces plans  $CuO_2$ , intercalés de *couches séparatrices* formées de quelques atomes seulement. Ces empilements sont ensuite eux-mêmes séparés par les *couches isolantes*.



**Figure 1.2** Maille unitaire du  $YBa_2Cu_3O_7$ , de structure orthorhombique, contenant deux plans  $CuO_2$  séparés par une couche d'Yttrium. Les paires de plans sont séparées par du Barium, de l'oxygène et des chaînes  $CuO$ . [7]

Un fait intéressant lié aux plans  $\text{CuO}_2$  est que pour des composés semblables ayant un nombre différent de plans par maille, on observe une corrélation entre  $T_c$  et le nombre de plans. À la figure 1.3, on voit cette corrélation pour les composés de trois familles. Le comportement typique est une augmentation de  $T_c$  avec le nombre de plans jusqu'à la valeur optimale de 3 plans par maille. Au-delà de 3,  $T_c$  diminue légèrement avant de se stabiliser [8].



**Figure 1.3** Corrélation entre  $T_c$  et le nombre de plans par maille unitaire [8]. La  $T_c$  atteint un maximum pour 3 plans avant de redescendre et de se stabiliser sur un plateau. Les composés à plus de plans (jusqu'à 16 plans par mailles [8]) ne sont pas présentés ici.

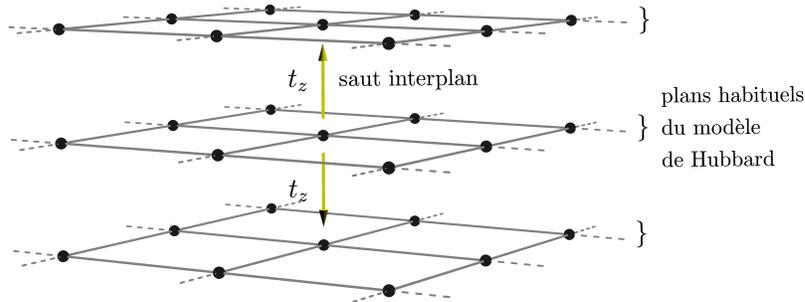
### 1.1.4 Objectif I : l'effet du couplage interplan

Puisqu'on croit que la physique des cuprates se retrouve principalement dans les plans  $\text{CuO}_2$ , les modèles théoriques étudiés jusqu'à maintenant sont presque tous des modèles 2D [9]. On sait néanmoins qu'il faudra un jour passer à des modèles 3D, puisqu'en deux dimension, le *théorème de Mermin-Wagner* [10] empêche la *brisure spontanée de la symétrie de jauge* nécessaire à la supraconductivité à température finie. Pour l'instant, les systèmes étudiés sont en général trop petits pour que le théorème s'applique et nous évitons ce problème. Néanmoins, il reste certaines observations expérimentales, comme la corrélation de  $T_c$  avec le nombre de plans, qui portent à croire qu'on devrait prendre en compte la troisième dimension, même pour nos petits systèmes.

Prenons l'exemple des *cuprates en empilement infini*. Dans ceux-ci, il n'y a pas de couches isolantes séparant les plans, et donc c'est comme si on avait une infinité de plans  $\text{CuO}_2$  connectés. Dans ces structures, la supraconductivité apparaît et disparaît au gré d'une réduction en oxygène bien contrôlée qui occasionne aussi un changement de la hauteur de la maille unitaire,  $c$ . Plus important encore, on peut montrer que  $T_c$  dépend inversement de  $c$  en effectuant la réduction en oxygène progressive [11]. Ce genre d'observation laisse penser que la troisième dimension est plus importante qu'on le croit chez les cuprates.

Dans la littérature, on a déjà comparé des modèles 3D à des modèles 2D [12, 13, 14, 15] et cela a montré que la supraconductivité est plus robuste dans les modèles 2D. Cependant, on n'a pas étudié directement l'effet de la troisième dimension dans des modèles très anisotropes, plus fidèles aux cuprates.

Le premier objectif de ce projet est d'ajouter des considérations tridimensionnelles au modèle le plus simple pour les plans  $\text{CuO}_2$  en 2D, le modèle de Hubbard (section 2.1.1). Pour le faire, on lui ajoute des sauts interplans, comme ceux illustrés à la figure 1.4. De plus, pour que le modèle soit crédible, on utilise des paramètres de bandes réalistes (section 2.1.3).



**Figure 1.4** Schéma des sauts interplans

C'est le *diagramme de phase* calculé à partir de ce modèle qui sera juge de l'effet des sauts interplans. Dans les sections qui suivent, on introduit plus en détail en quoi consiste le *diagramme de phase*, avant de fixer un second objectif lié de près à celui-ci. Le chapitre 2 est ensuite consacré aux détails du modèle de Hubbard et le chapitre 3 survole les méthodes utilisées pour lui trouver des solutions approximatives. Au chapitre 4, on donne finalement les détails sur les paramètres utilisés ainsi que sur la façon de présenter les données, avant de passer aux résultats.

## 1.2 Supraconductivité et antiferromagnétisme

### 1.2.1 Interactions et dopage

Les cuprates à l'état pur sont des isolants. Cela semble contradictoire, mais pour obtenir les meilleurs supraconducteurs connus, on verra qu'il faut *doper* les cristaux des cuprates qui, à la base, ne sont pas de bons conducteurs. Ce problème va en fait bien au-delà d'une simple contradiction quant à la conductivité des cuprates, car selon les théories actuelles, ces cristaux devraient être des conducteurs et non le contraire. La célèbre et fructueuse théorie des bandes échoue ici lamentablement, et c'est parce qu'une de ses hypothèses de départ est mise en défaut.

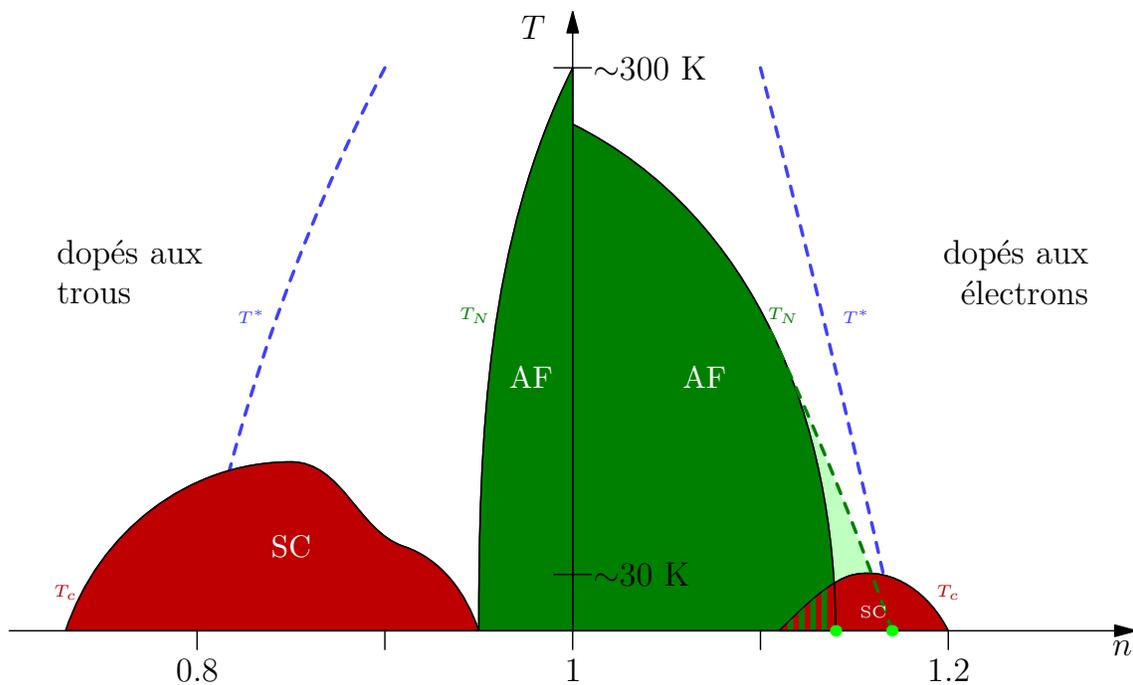
Dans les théories élémentaires de la matière, comme la théorie des bandes, on trouve toujours un moyen de réduire ou de carrément négliger l'impact des interactions entre les électrons. La justification habituelle est que leurs effets sont petits, mais la raison plus honnête est que considérer les interactions rend le problème tellement complexe qu'il est encore impossible à résoudre. Malheureusement, dans les cuprates, l'effet des interactions est important et on dit donc qu'il s'agit de *matériaux à électrons fortement corrélés* parmi lesquels ceux qui sont isolants à cause des interactions, comme les cuprates, sont appelés *isolants de Mott*.

Puisque les cuprates sont isolants dans leur état pur, il faut altérer leur structure chimique pour y obtenir la supraconductivité, c'est-à-dire qu'il faut les *doper*. Sans dopage, les cuprates n'ont qu'un électron de valence ( $n = 1$ ) par maille unitaire. Le dopage consiste à remplacer certains atomes du cristal par d'autres, afin de modifier cette densité d'électrons. On peut alors exprimer le dopage comme la portion  $\delta$  d'atomes qui furent remplacés ou encore comme la nouvelle densité  $n$ . Prenons comme exemple le composé  $\text{Ba}_\delta\text{La}_{5-\delta}\text{Cu}_5\text{O}_y$  avec  $\delta = 0.1$ . Celui-ci a un atome de baryum qui en remplace un de lanthane à toute les 10 maille unitaire, ce qui réduit sa densité électronique ( $n = 0.9$ ). Avec moins d'électrons, on dit que le matériau est dopé aux trous. Avec plus, on dit qu'il est dopé aux électrons. Enfin, puisque l'effet des interactions électroniques est grand chez les cuprates, le fait de leur retirer ou leur ajouter des électrons dévoile une multitude de nouvelles phases de la matière. On peut d'ailleurs littéralement cartographier celles-ci dans un *diagramme de phases température-densité*.

## 1.2.2 Diagramme de phases des cuprates

Un diagramme de phases représente graphiquement les limites des phases d'un matériau en fonction de paramètres comme la température, la pression, le dopage, etc. Par exemple, le diagramme de phases de l'eau, bien connu, montre ses températures de fusion et d'ébullition en fonction de la pression. Le diagramme de phases habituel pour les cuprates montre plutôt la température d'apparition de ces phases en fonction de la densité électronique.

Le diagramme de phases des cuprates est différent d'un composé à l'autre, et surtout, très difficile à déterminer puisque pour chaque valeur du dopage on doit synthétiser un nouvel échantillon. Il est donc généralement plus commode d'utiliser les tendances générales pour construire un diagramme de phases typique, tel celui de la figure 1.5.



**Figure 1.5** Diagramme de phase température-densité typique des cuprates pour les phases antiferromagnétique (AF) et supraconductrice (SC).  $T^*$  dénote la transition du régime pseudogap dont le statut de *phase* fait encore l'objet de recherche. La section vert clair représente l'hypothèse du point critique quantique déplacé de Sachdev. (section 1.2.4)

Ce diagramme s'inspire du celui de  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  (YBCO) [16] pour le côté des dopés aux trous et celui de  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  (NCCO) [17] pour le côté des dopés aux

électrons. On remarque d'abord les zones où se retrouve la supraconductivité, en forme de dômes dont le sommet donne la température critique maximale au *dopage optimal*. Ensuite, l'antiferromagnétisme, une phase dans laquelle la direction des spins électroniques alterne (...  $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$  ...), occupe le centre du diagramme avec des températures de transition, nommées *températures de Néel*, très élevées. On voit aussi que le côté des dopés aux trous ( $n < 1$ ) présente une séparation nette entre le domaine d'existence de la supraconductivité et celui de l'antiferromagnétisme. D'ailleurs, dépendamment du composé, on retrouve parfois des phases intermédiaires comme des ondes de densité de charge ou des ondes de densité de spin qui font encore l'objet de recherche. Enfin, le côté des dopés aux électrons est particulièrement intéressant à cause de la zone de possible coexistence entre la supraconductivité et l'antiferromagnétisme.

### 1.2.3 Paramètres d'ordre et diagramme de phase à $T = 0$

Afin de simplifier tout le projet, on travaille toujours à température nulle. Cette contrainte fait en sorte qu'il est impossible de tracer le diagramme de phase pour la température. Il faut donc définir un outil analogue : le diagramme de phase à température nulle.

Faire un diagramme de phase à température nulle est possible grâce au concept de paramètre d'ordre. C'est un concept qui vient de la théorie des transitions de phase de Landau, qui dit qu'une transition est caractérisée par une phase plus ordonnée et une moins ordonnée. Par exemple, la phase antiferromagnétique, où les spins suivent un alignement précis (...  $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$  ...), est plus ordonnée que la phase paramagnétique obtenue lorsqu'on dépasse la température de Néel. Tout ordre de ce genre peut alors être mesuré par un paramètre précis, qui se nomme *paramètre d'ordre* et qui traduit quantitativement cet ordre. Pour l'antiferromagnétisme, on verra plus loin que le paramètre d'ordre sera une valeur moyenne d'opérateur,  $\langle \hat{M} \rangle$  (section 2.3.1), et de même pour la supraconductivité,  $\langle \hat{D} \rangle$  (section 2.3.2). Ces quantités traduisent en quelque sorte la robustesse de la phase et il existe donc souvent des relations les liant à la température de transition. Ainsi, il sera possible de tracer le paramètre d'ordre en fonction du dopage pour obtenir un diagramme de phase à température nulle qui devrait être relativement fidèle à celui de la figure 1.5.

### 1.2.4 Objectif II : Coexistence de phases

L'hypothèse du point critique quantique (QCP) [18] avance que la supraconductivité serait causée par un changement de phase magnétique à température nulle ( $T = 0$ ). L'absence des fluctuations thermiques habituelles implique dans ce cas que ce sont les fluctuations quantiques qui causent la transition, d'où le nom de point critique quantique. Selon cette hypothèse, ce dernier devrait se situer environ au point de dopage optimal.

Le problème de l'hypothèse QCP est que le changement de phase magnétique précédant le point critique n'a pas été observée clairement. Par exemple, la transition *pseudogap* (représentée par la ligne pointillée  $T^*$  dans la figure 1.5) serait une candidate de choix, mais elle est encore floue du point de vue expérimental. Puisqu'on peine tant à la détecter, Sachdev [18] a proposé que cette phase était peut-être déplacée à cause de sa compétition avec la supraconductivité (en vert clair sur la figure 1.5). Il s'agirait alors d'une phase magnétique bien connue, par exemple l'antiferromagnétisme, qui n'est tout simplement pas là où elle devrait.

L'explication de Sachdev est difficile à vérifier expérimentalement, car il est impossible de simplement supprimer la phase supraconductrice pour voir où se situerait alors l'antiferromagnétisme. On utilise parfois un fort champ magnétique dans ce but, mais alors on ne peut être certain que ceux-ci n'affectent pas autrement le système. C'est d'ailleurs exactement ce qui constitue l'avantage d'une méthode théorique numérique. Il est possible d'y contrôler exactement à quelles phases on laisse ou on ne laisse pas la possibilité d'exister, sans effet secondaire.

Le deuxième objectif sera de vérifier les effets de la coexistence de phases dans le modèle. Nous calculerons donc les valeurs des paramètres d'ordres  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$ , seuls et coexistants et on verra qu'un autre paramètre d'ordre supraconducteur  $\langle \hat{T} \rangle$  (section 2.3.2) peut être ajouté au modèle lorsqu'il y a coexistence. Les paramètres d'ordre et les méthodes pour les calculer sont décrits au chapitre 3 avant de donner les résultats au chapitre 4.

## Chapitre 2

# Le modèle de Hubbard

## 2.1 Définition et propriétés

### 2.1.1 Hamiltonien

Pour modéliser les cuprates, Anderson [19] a suggéré d'utiliser le modèle de Hubbard [20] dès leur découverte, une approche qui fut justifiée plus formellement par la suite [21, 22, 23]. Le modèle de Hubbard est défini pour  $N$  états localisés, et il s'agit d'un cas particulier de modèle à liaisons fortes (dans la base des états de Wannier). En seconde quantification, avec les orbitales localisées (les sites) identifiées  $i, j$  et le spin  $\sigma$  on écrit le hamiltonien du modèle comme suit.

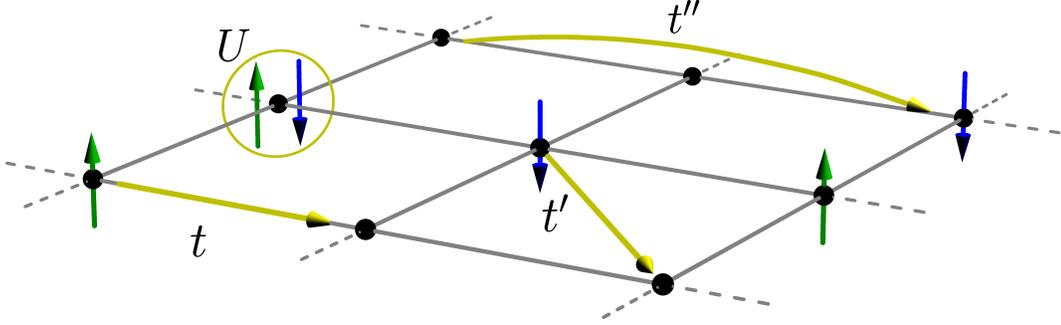
$$\hat{H} \equiv - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c.h. + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

Le premier terme du modèle est le terme d'énergie cinétique, ou encore le terme de saut, standard pour un modèle à liaisons fortes. À cause du facteur  $-t_{ij}$ , ce terme favorisera la destruction d'un électron en  $i$  (opérateur de destruction  $c_{i\sigma}$ ) suivie de sa création en  $j$  (opérateur de création  $c_{j\sigma}^\dagger$ ), ce qui donne donc en un saut de  $i$  à  $j$ . Il fait la même chose pour le processus conjugué, c'est-à-dire un saut de  $j$  à  $i$ . Le terme de saut favorise ainsi la délocalisation des électrons.

Le deuxième terme est celui qui caractérise le modèle de Hubbard. Il augmente de  $U$  l'énergie d'un site accueillant à la fois un électron de spin up (vers le haut) et un de spin down (vers le bas) (avec l'occupation  $\hat{n}_{i\sigma} \equiv c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ). Il représente donc la

répulsion coulombienne locale subite par deux électrons dans une même orbitale  $i$ . C'est la forme la plus élémentaire d'interaction qu'on puisse prendre en compte.

Remarquons que le modèle ne comporte pas de géométrie intrinsèque et que ce sont donc les  $t_{ij}$  qui déterminent sa forme. Pour avoir un réseau carré qui représente bien les plans  $\text{CuO}_2$ , on prend égaux les  $t_{ij}$  représentant des sauts de même distance. Ainsi, les sauts aux quatre premiers voisins auront la valeur  $t$ , aux quatre voisins suivants  $t'$ , et ainsi de suite comme illustré à la figure 2.1.



**Figure 2.1** Illustration du modèle de Hubbard 2D où les  $t$ ,  $t'$ ,  $t''$  sont les termes de sauts et  $U$  le terme d'interactions.

Il existe une solution analytique pour le modèle de Hubbard à une dimension (avec l'Ansatz de Bethe) et celui avec un nombre de dimension infini. Autrement, le modèle reste sans solution générale. Il fait d'ailleurs partie d'une classe de problèmes très complexes, en raison des interactions, nommée *problème à  $N$ -corps* (section 3.1). Dans ce genre de problème, le Hamiltonien contient à la fois des opérateurs à un corps (deux opérateurs d'échelle :  $c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ ), et des opérateurs à deux corps (quatre opérateurs d'échelle :  $\hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} = c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}$ , pour les interactions) de sorte que les fonctions d'onde habituelles, à un corps, ne sont bonnes qu'à faire des approximations.

Enfin, le modèle de Hubbard est aussi difficile à résoudre numériquement. Avec les quatre états disponibles pour chacune des  $N$  orbitales :  $|0\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$  ou  $|\uparrow\downarrow\rangle$ , son espace de Hilbert croît comme  $d = 4^N$ . Par exemple, pour 16 orbitales,  $d$  grimpe à 4 294 967 296 et obtenir les solutions requiert de réduire la taille de l'espace de Hilbert en utilisant les symétries de l'amas et en ciblant un nombre de particules et un spin total réaliste. Il est impensable, pour l'instant, d'arriver à diagonaliser un nombre d'orbitales représentatif des véritables matériaux. Il faut donc poursuivre la recherche de méthodes d'approximation plus sophistiquées pour attaquer le problème numériquement (section 3.2).

### 2.1.2 Isolant de Mott et antiferromagnétisme pour $U \gg t$

Comme on le disait à la section 1.2.2, les cuprates, sans dopage, sont des isolants. Bien que cela soit une surprise du point de vue de la théorie des bandes, c'est un phénomène qui s'explique relativement bien dans le régime  $U \gg t$  du modèle du Hubbard. Considérons donc, pour commencer, le terme d'interaction du (2.1) :

$$H_U = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.2)$$

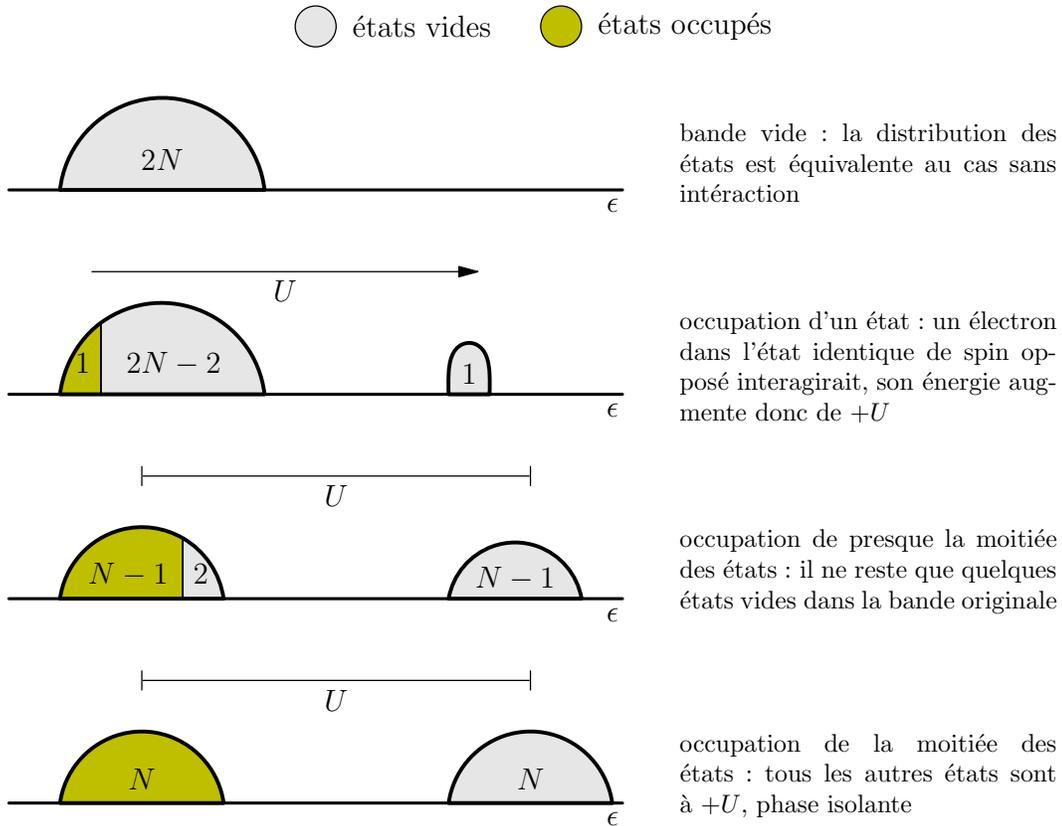
Pour ce dernier, on peut minimiser l'énergie en réduisant au maximum la double occupation (le moins d'états  $|\uparrow\downarrow\rangle$  possibles). Or, dans un cuprate non dopé, il y a un électron de valence par maille unitaire et pour minimiser l'énergie de  $H_U$  il faut donc mettre un électron sur chaque site. Le premier niveau excité, lui, aura une énergie  $U$  supplémentaire, ce qui cause le gap isolant.

De façon plus générale, dans un système interagissant, l'énergie d'une particule dépend de la présence ou non de particules avec lesquelles elle peut interagir. Autrement dit, l'énergie d'un état à une particule sera déterminée selon l'occupation des autres états. Conséquemment, un changement dans l'occupation induira un changement dans la distribution des états, ce qu'on nomme *transfert de poids spectral*. C'est grâce à ce dernier que le modèle de Hubbard arrive à prédire l'état isolant des cuprates rigoureusement. [24]

Un isolant tel que prédit par le modèle de Hubbard est appelé isolant de Mott. Comme on peut le voir à la figure 2.2, pour une orbitale occupée, l'énergie du deuxième état augmente de  $U$ . Cela fait qu'à demi remplissage, la bande unique du modèle se sépare en une bande de valence et une bande de conduction séparées d'un gap d'énergie  $U$ . C'est le *gap de Mott*.

Il existe un autre type d'isolant dû aux interactions, l'*isolant à transfert de charge*. L'explication pour celui-là fait intervenir plusieurs bande et donc le modèle de Hubbard, ne possédant intrinsèquement qu'une seule bande, ne peut l'expliquer. Ce genre d'effet multibande est d'ailleurs présent dans les cuprates dopés aux trous, rappelant que le modèle de Hubbard n'est valide que dans certaines limites, et qu'il faudra des modèles plus complexes pour expliquer complètement les cuprates. [25]

Enfin, non seulement le modèle de Hubbard arrive à expliquer le caractère isolant



**Figure 2.2** Explication de l'isolant de Mott avec l'interaction  $U$  qui cause un transfert de poids spectral générant le gap de Mott.

de matériaux à demi remplissage, il prédit aussi la phase antiferromagnétique que l'on retrouve chez les cuprates. En effet, dans la limite à fort couplage, en gardant toutefois le terme de sauts, la théorie des perturbations au deuxième ordre permet d'obtenir un modèle de Heisenberg antiferromagnétique.

### 2.1.3 Structure de bande pour $U \ll t$

Avec  $U \ll t$ , c'est-à-dire dans la limite de faible interaction, seule la partie cinétique du modèle de Hubbard subsiste (le premier terme de (2.1)). On obtient alors un modèle d'électrons libres, en liaisons fortes, dont le hamiltonien sera noté  $\hat{H}_K$  :

$$\hat{H} \xrightarrow{U \rightarrow 0} \hat{H}_K = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c.h. \quad (2.3)$$

Le hamiltonien  $\hat{H}_K$  possède des énergies propres dans l'espace des vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$  et on peut donc le diagonaliser en prenant sa transformée de Fourier (annexe A.1). Dans ce calcul, on prend les  $t_{ij}$  égaux pour des sauts de même distance  $|\mathbf{s}| = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$ , comme dans le réseau carré de la figure 2.1. On obtient alors l'expression diagonale pour  $\hat{H}_K$ ,

$$\hat{H}_K = - \sum_{\mathbf{k}} \left( \sum_{\mathbf{s}} 2t_{|\mathbf{s}|} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (2.4)$$

$$\hat{H}_K = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (2.5)$$

où la relation de dispersion,  $\epsilon(\mathbf{k})$ , est bien celle d'un modèle en liaison forte.

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv - \sum_{\mathbf{s}} 2t_{|\mathbf{s}|} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \quad (2.6)$$

La figure 2.3 montre cette relation de dispersion pour le réseau bidimensionnel carré avec une longueur de maille  $a = 1$  et seulement des sauts  $t, t', t''$  aux trois plus proches groupes de voisins. La relation de dispersion se réduit alors à :

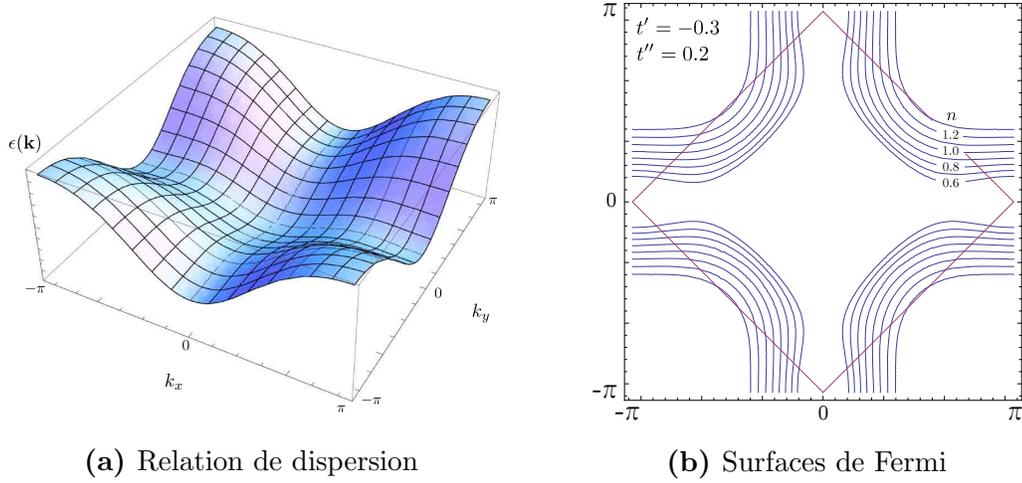
$$\begin{aligned} \epsilon_c(\mathbf{k}) = & -2t(\cos k_x + \cos k_y) \\ & - 2t'(\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)) \\ & - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Les surfaces de Fermi qu'on a aussi illustrées montrent où s'arrête le remplissage de la bande d'états pour différentes valeurs d'occupation  $\langle \hat{n} \rangle$ . Les valeurs choisies pour  $t, t', t''$  viennent de la littérature pour les cuprates (section 2.2.1).

## 2.2 Des paramètres réalistes

### 2.2.1 Paramètres de la littérature

Le modèle sera toujours défini sur un réseau bidimensionnel carré avec les sauts aux plus proches voisins notés  $t$ , aux seconds  $t'$  et ainsi de suite. *Tous* les paramètres



**Figure 2.3** Allure habituelle de la relation de dispersion du modèle de Hubbard carré pour  $U = 0$  avec ses surfaces de Fermi pour différents remplissage. Les paramètres sont  $t = 1$ ,  $t' = -0.3$  et  $t'' = 0.2$  (section 2.2.1) et le losange rose indique la zone de Brillouin antiferromagnétique (section 2.3.1)

sont exprimés relativement à  $t$ , y compris l'interaction  $U$ , de sorte que c'est ce dernier qui détermine l'échelle du problème.

$$\boxed{t = 1} \quad (2.8)$$

Les paramètres que nous utilisons le plus souvent sont ceux du composé  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ , qui furent obtenus à partir de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) [26], qui permet d'obtenir la structure de bandes à partir de la composition chimique du matériau. On y réfèrera comme étant les paramètres YBCO. Ils sont régulièrement utilisés par nos groupes de recherche [27, 28].

sauts	YBCO	(2.9)
$t'$	-0.3	
$t''$	0.2	

Dans le cas tridimensionnel, le modèle YBCO sera étendu à un réseau cubique doté d'un seul saut dans la troisième dimension,  $t_z$ . Nous lui choisissons 4 valeurs artificielles afin de tirer des tendances, mais en restant anisotrope, à l'image des cuprates.

$$\boxed{t_z = \{ 0.02, 0.1, 0.3, 0.5 \}} \quad (2.10)$$

## 2.2.2 Paramètres inédits

Pour avoir une idée plus réaliste de la valeur de  $t_z$ , on utilise aussi trois ensembles de paramètres fournis par Chuck-Hou Yee, un collaborateur autrefois à Rutgers University. [29] On référera donc à ces paramètres comme les paramètres *de Chuck* ou encore individuellement comme les paramètres LCO, NCO, et TBCO puisqu'ils ont respectivement été obtenus pour les composé de  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ,  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  et  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_6$ , aussi à partir de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).

sauts	LCO	NCO	TBCO
$t'$	-0.208	-0.240	-0.243
$t''$	0.200	0.190	0.137
$t'''$	0.016	0.016	0.012
$t_z$	-0.005	-0.005	-0.004

(2.11)

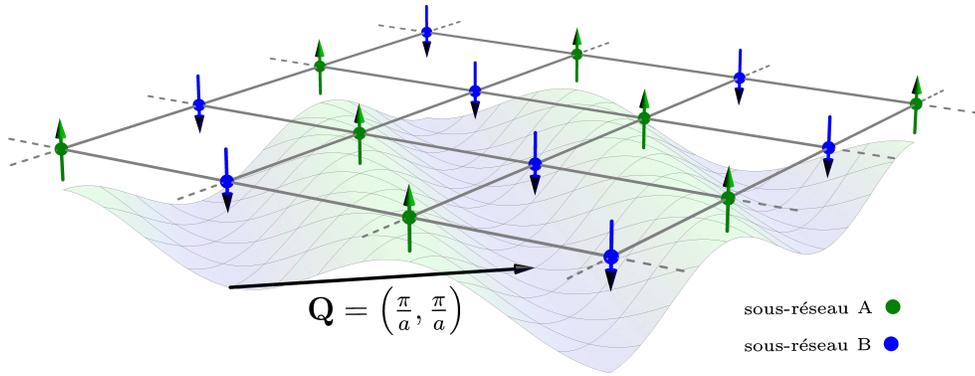
Les paramètres de Chuck (2.11) sont quantitativement différents des paramètres YBCO (2.9). On remarque en effet que le rapport  $t''/t'$  y est plus grand, faisant que les électrons sont moins localisés. Cela s'explique par la procédure qui fut employée. Chuck utilisait le code *WIEN2k* [30] pour obtenir les bandes DFT qu'il projetait ensuite sur des orbitales de Wannier (une par maille unitaire, pour reproduire le modèle de Hubbard) en suivant une procédure de *downfolding* bien déterminée [31]. Celle-ci requiert habituellement de maximiser la localisation des orbitales obtenues, mais les recherches de Chuck demandaient plutôt d'optimiser l'énergie de transfert de charge entre les atomes Cu et O du plan  $\text{CuO}_2$ . Cela a eu comme effet de délocaliser un peu les orbitales trouvées et donc de surestimer la valeur des sauts plus éloignés comme  $t''$ ,  $t'''$  et  $t_z$  lors du calcul de recouvrement.

Notons toutefois que même avec des sauts surestimés de la sorte, les valeurs pour  $t_z$  sont extrêmement faibles. On peut donc déjà prédire que leur effet sera négligeable. De plus, parmi les valeurs artificielles choisies pour le  $t_z$  des paramètres YBCO (2.10), seules 0.02 et 0.1 ont une chance d'être représentatives des matériaux réels.

## 2.3 Paramètres d'ordre

### 2.3.1 Paramètre d'ordre antiferromagnétique

L'antiferromagnétisme est une alternance de la direction des spins électroniques de site en site sur le réseau cristallin. C'est un cas particulier d'onde de densité de spin représentée mathématiquement par un vecteur d'onde  $\mathbf{Q}$  qui indique la direction et la fréquence de la variation des spins. La figure 2.4 montre l'antiferromagnétisme dans un réseau carré en deux dimensions dont le vecteur d'onde est  $\mathbf{Q} = \frac{\pi}{a}\mathbf{e}_x + \frac{\pi}{a}\mathbf{e}_y$ .



**Figure 2.4** Onde de densité de spin de vecteur  $\mathbf{Q} = \frac{\pi}{a}\mathbf{e}_x + \frac{\pi}{a}\mathbf{e}_y$  correspondant à l'antiferromagnétisme sur un réseau carré 2D de longueur de maille  $a$ . Notons que le cas  $\mathbf{Q} = \frac{\pi}{a}\mathbf{e}_x - \frac{\pi}{a}\mathbf{e}_y$  serait parfaitement équivalent.

Afin de mesurer l'antiferromagnétisme, on définit l'opérateur  $\hat{M}_{\mathbf{Q}}$ , une version périodique de l'observable décrivant la magnétisation habituelle,

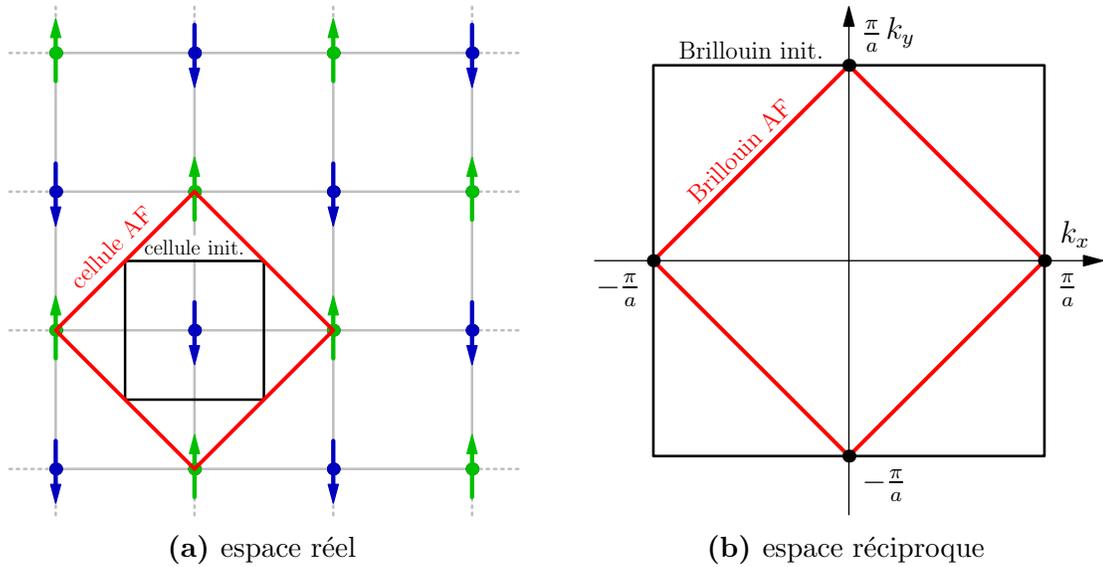
$$\hat{M}_{\mathbf{Q}} \equiv \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (2.12)$$

dont la transformée de Fourier est :

$$\hat{M}_{\mathbf{Q}} = \sum_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow} \right) \quad (2.13)$$

La valeur moyenne  $\langle \hat{M}_{\mathbf{Q}} \rangle$  nous donnera la grandeur de l'ordre antiferromagnétique sur le réseau, et il s'agit donc du paramètre d'ordre.

L'apparition de l'antiferromagnétisme sur un réseau a comme effet de changer



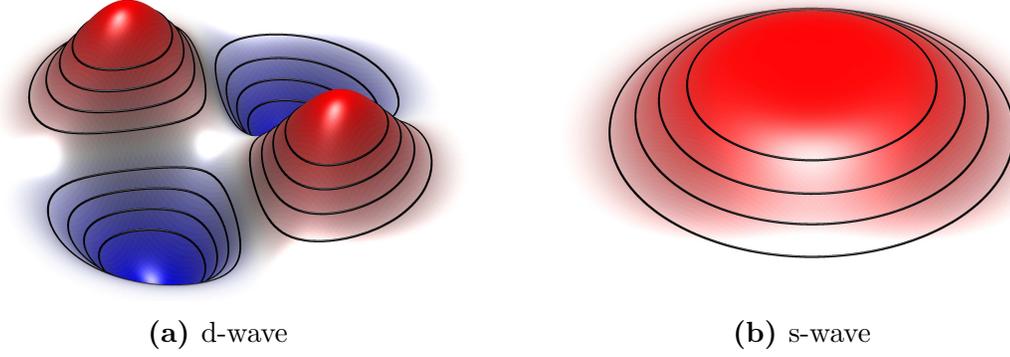
**Figure 2.5** Agrandissement de la maille de Wigner-Seitz du réseau réel dû à l'antiferromagnétisme et changement inverse de la zone de Brillouin.

sa périodicité cristalline. En effet, comme le montre la figure 2.5, la maille unitaire d'un réseau antiferromagnétique double dans l'espace réel, faisant que dans l'espace réciproque, sa taille diminue de moitié.

### 2.3.2 Paramètre d'ordre supraconducteur

L'état supraconducteur est un état quantique *cohérent*, constitué de paires d'électrons nommées *paires de Cooper* [32]. On peut mesurer l'amplitude de cet état, ce qui donne un paramètre d'ordre général pour *mesurer* la supraconductivité. Sa valeur s'élèvera pour une supraconductivité de plus en plus forte.

Chez les cuprates, le paramètre d'ordre supraconducteur a une symétrie de type *d* [33]. Comme on l'a illustré à la figure 2.6, cela veut dire que le signe du paramètre d'ordre dans un axe, disons *x*, est opposé à son signe dans l'axe perpendiculaire, *y*. C'est une différence notable comparativement aux supraconducteurs conventionnels, de symétrie de type *s*, où le signe est le même dans toutes les directions. Pour traduire la symétrie de type *d* dans l'espace des  $\mathbf{k}$ , on a besoin du facteur  $\Delta_{\mathbf{k}} = (\cos(k_x) - \cos(k_y))$



**Figure 2.6** Comparaison de la symétrie de type  $d$  et de la symétrie de type  $s$  dans l'espace des  $\mathbf{k}$ . On l'illustre à l'aide d'une exponentielle décroissante en  $k^2$  afin de mettre en évidence la ressemblance avec les orbitales  $d$  et  $s$  d'où elle tirent leur nom. type  $d$  :  $z = (\cos(k_x) - \cos(k_y)) e^{-k^2}$  et type  $s$  :  $z = e^{-k^2}$ .

qui devient  $\Delta_{ij}$  dans l'espace réel :

$$\Delta_{ij} \equiv \begin{cases} +\frac{1}{2} & \text{si } \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i = \hat{\mathbf{e}}_x \\ -\frac{1}{2} & \text{si } \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i = \hat{\mathbf{e}}_y \end{cases} \quad (2.14)$$

### Paramètre d'ordre $\hat{D}$

Pour mesurer la supraconductivité, on utilise la même observable que dans plusieurs travaux [28, 34, 35, 36] et c'est sa valeur moyenne  $\langle \hat{D} \rangle$  qui est le paramètre d'ordre :

$$\hat{D} \equiv \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right) + \text{c.h.} \quad (2.15)$$

Cet opérateur est une somme d'opérateurs créant des paires d'électrons en singulet de spin sur des sites voisins  $i$  et  $j$ . Il faut tenir compte des règles d'anticommuation pour obtenir la forme habituelle  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$  pour le singulet. La somme contient aussi le processus conjugué, la destruction de paires, nécessaire pour qu'il soit hermitique. On ne mesure donc pas la quantité de paires, mais plutôt leur apparition et leur disparition traduisant ainsi le caractère *cohérent* de l'état supraconducteur dans lequel le nombre de particules n'est pas bien défini. Ce genre d'opérateur est dit *anormal*.

Notons que la transformée de Fourier de (2.15) (faite à l'annexe A.2) donne le facteur  $(\cos k_x - \cos k_y)$  de la symétrie de type  $d$ , et les paires de vecteurs d'onde

opposés comme pour la fonction d'onde BCS.

$$\hat{D} = \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_x - \cos k_y) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{c.h.} \quad (2.16)$$

### Paramètre d'ordre $\hat{T}$

Lorsque la supraconductivité coexiste avec l'antiferromagnétisme, certains travaux ont prédit l'apparition de paires d'électrons en triplet de spin  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ , différentes des paires de Cooper habituelles en singulet  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ . On nomme cette composante de la supraconductivité  $\pi$ -*triplet* ou  $\pi$ -SC. Elle fut prédite dans certains travaux de champ moyen [35] et correspond aux opérateurs de rotations  $\pi$  dans la théorie  $SO(5)$  de la supraconductivité [36]. Elle n'avait jamais été incluse dans les calculs sur amas comme nous l'avons fait dans ce projet.

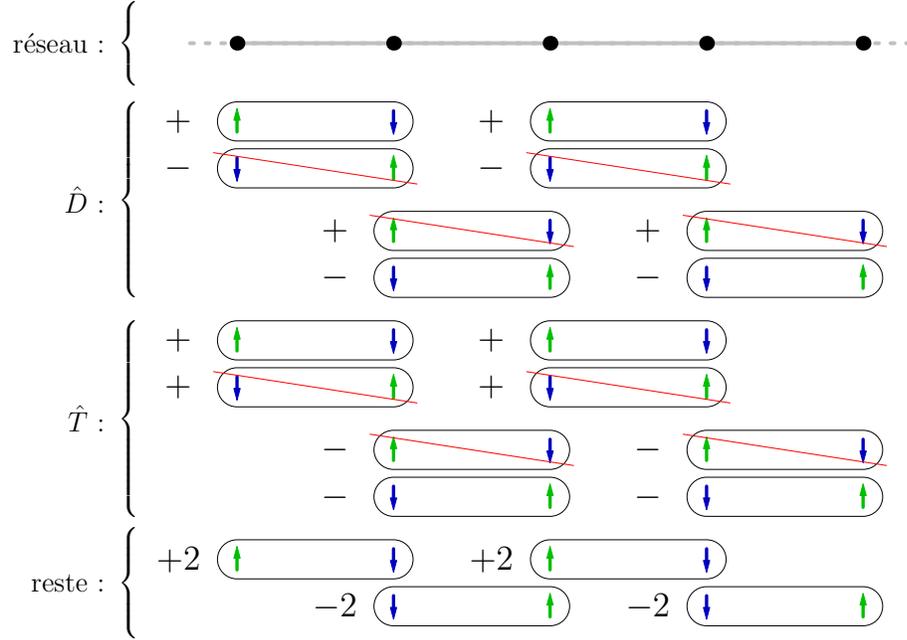
Puisqu'elle est liée à l'antiferromagnétisme, l'observable de la supraconductivité  $\pi$ -SC doit à la fois inclure l'alternance de signe d'un site à l'autre (facteur  $e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i}$ ) et la symétrie de type  $d$  (facteur  $\Delta_{ij}$ ). Elle est donc défini comme :

$$\hat{T} \equiv \sum_{ij} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} \Delta_{ij} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger - c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right) + \text{c.h.} \quad (2.17)$$

On ne montrera pas formellement qu'il faut inclure  $\hat{T}$  dans les calculs, mais on peut s'en convaincre par certains arguments intuitifs. Tout d'abord, on sait que les paires en triplet ont un spin total non-nul (nombre quantique  $l = 1, m = 0$ ) ce qui explique qu'on s'attend à ne pas les retrouver dans un milieu non-magnétique. Toutefois, en coexistant avec l'antiferromagnétisme, les paires pourraient avoir un spin total qui reproduit l'alternance de spin de  $\hat{M}$ . Comme le montre la figure 2.7, les paires en singulet de  $\hat{D}$  superposées à celles en triplet, alternant de signe, de  $\hat{T}$ , permettent justement d'obtenir un spin total qui alterne de site en site, en accord avec l'ordre antiferromagnétique. Il n'est donc pas surprenant que les trois puissent coexister.

### Commutateur avec $\hat{M}$

Un autre argument intuitif en faveur de l'apparition de  $\langle \hat{T} \rangle$  vient du commutateur des opérateur  $[\hat{M}, \hat{D}] = -2i\hat{T}$  (annexe A.3). Premièrement, le fait que le commutateur soit non nul indique que les états propres de  $\hat{M}$  sont différent de ceux de  $\hat{D}$ . On s'attend donc à ce que si les deux phases coexistent, elles soient affectées l'une par



**Figure 2.7** Illustration de la superposition de  $\hat{D}$  et  $\hat{T}$  en 1 dimension. Dans cette image, chaque création de paire  $c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger$  ou  $c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger$  venant de  $\hat{D}$  ou  $\hat{T}$  est illustrée par une paire de flèches sous les sites correspondants. Sous une paire de sites donnée, le signe de chaque terme fait que certains «interfèrent», ce qui est illustré par un trait rouge sur les termes qui «s’annulent». À proprement parler, ces opérateurs de paires n’interfèrent pas ainsi, mais l’intuition laissée par l’image est bonne : la coexistence de  $\hat{D}$  et  $\hat{T}$  est favorable à l’antiferromagnétisme.

l’autre. Deuxièmement, le fait que le commutateur de  $\hat{M}$  et  $\hat{D}$  donne précisément l’observable  $\hat{T}$  montre que cette dernière aura un rôle à jouer dans les superpositions d’états propres de  $\hat{M}$  et  $\hat{D}$ . On pense ici à une relation semblable à celle des moments cinétiques  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  et  $\hat{J}_z$ . Cette liaison entre les trois opérateurs n’a pas été approfondie dans ce projet, mais serait une piste intéressante à laquelle donner suite, dont un bon point de départ est la théorie SO(5) de la supraconductivité [36].

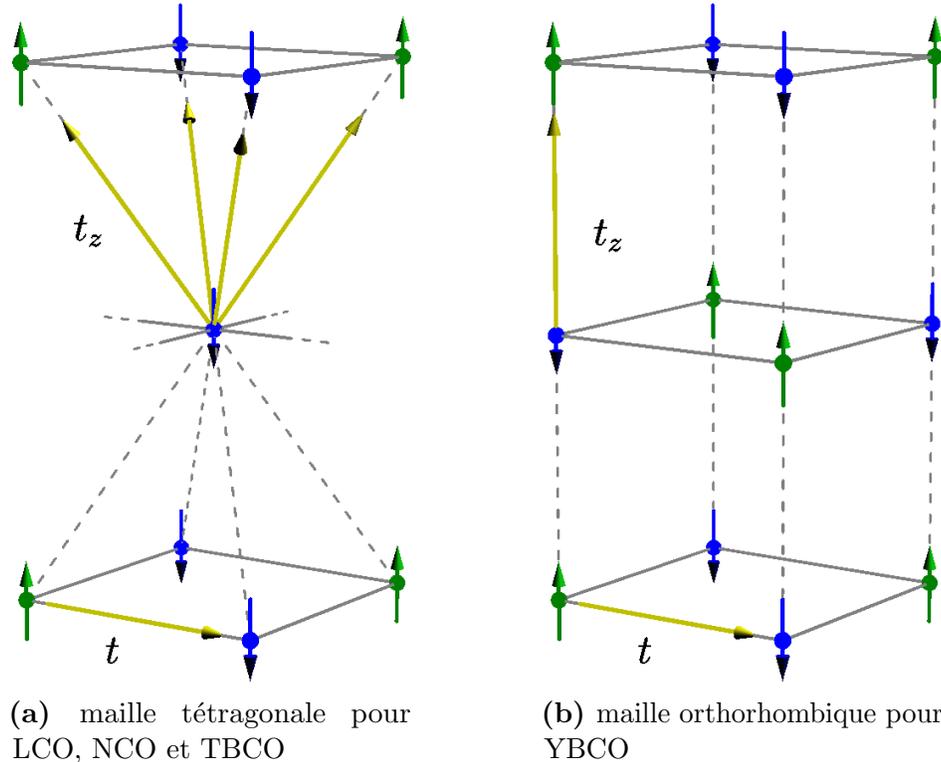
## 2.4 Notes sur les modèles tridimensionnels

Il y a certaines différences entre le modèle 3D utilisé pour le YBCO (2.9), dont le réseau est orthorhombique, et le modèle 3D pour le LCO, le NCO et le TBCO (2.11), dont les réseaux sont tétragonaux à corps centré. Ces différences sont mises en évidence dans la figure 2.8, où l’on voit en premier lieu que les sites des réseaux tétragonaux ont 8 voisins immédiats en  $z$  plutôt que 2 comme ceux du réseau orthorhombique.

On voit aussi à la figure 2.8 qu'on devra exprimer le vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q}$  différemment pour chacun des réseaux. Pour le réseau orthorhombique, on l'exprime en termes des vecteurs de base  $\mathbf{a} = \hat{x}$ ,  $\mathbf{b} = \hat{y}$  et  $\mathbf{c} = \hat{z}$ , donc sur un réseau effectif carré. Le vecteur est alors  $\mathbf{Q} = \pi\mathbf{a} + \pi\mathbf{b} + \pi\mathbf{c}$ . Pour le réseau tétragonal, on utilise plutôt la base de travail  $\mathbf{a} = \hat{x}$ ,  $\mathbf{b} = \hat{y}$  et  $\mathbf{c} = \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{y} + \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{z}$  ce qui permet aussi d'écrire  $\mathbf{Q} = \pi\mathbf{a} + \pi\mathbf{b} + \pi\mathbf{c}$ . Toutefois, pour le réseau tétragonal, l'antiferromagnétisme est frustré, et il y a une équivalence entre l'expression précédente et  $\mathbf{Q} = \pi\mathbf{a} + \pi\mathbf{b}$ .

Pour pouvoir bien contrôler les effets tridimensionnels, on a choisi de ne pas modifier le paramètre d'ordre supraconducteur. On suppose donc que les paires ne se formeront que dans les plans, ce qui est cohérent avec l'hypothèse qui fait des plans  $\text{CuO}_2$  les responsables de la supraconductivité dans les cuprates.

Rappelons aussi que l'interaction  $U$  est locale seulement, conformément aux prescriptions du modèle de Hubbard. Elle n'a donc pas à être étendue hors des plans. De toute façon, les méthodes utilisées ne permettent pas d'ajouter ce genre d'interaction non-locale.



**Figure 2.8** Le réseau tétragonal à corps centré de LCO, NCO et TBCO se distingue du réseau orthorhombique de YBCO par trois sauts en  $z$  supplémentaires et la possibilité  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, 0)$  comme vecteur antiferromagnétique

## Chapitre 3

# Méthodes de calcul

### 3.1 Problème à N-corps

Comme on l'a déjà mentionné, le modèle de Hubbard est un cas particulier du *problème à N-corps*. Cette appellation sous-entend que  $N$  corps sont en interaction. Ce genre de problème est insoluble, car chacun des corps interagit avec tous les autres, qui eux aussi interagissent avec tous les corps, qui interagissent avec tous, etc. On a donc une infinité d'interactions indirectes dont l'importance respective varie selon le problème. La complexité de ces interactions répétées empêche de trouver une solution générale au problème depuis la fin des années 30.

Néanmoins, depuis ce temps, on a développé quelques outils relativement satisfaisants. Dans cette section, nous présentons les bases du formalisme des *fonctions de Green* pour lesquelles nous cherchons surtout à définir la *self-énergie*. Cela permettra alors de survoler les deux approximations utilisées dans ces recherches : la théorie de champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) et l'approximation de l'amas variationnel (VCA). Pour terminer, nous définirons certains opérateurs avec lesquels on peut mesurer l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans le modèle de Hubbard.

### 3.1.1 Définition du propagateur (fonction de Green)

L'outil le plus important dans le traitement du problème à N-corps est la *fonction de Green* qu'on présente ici de façon très élémentaire. On discute d'abord de la fonction de Green de l'équation de Schrödinger à une particule, qui servira à justifier celle du problème à N-corps. C'est cette dernière, dans le projet, qui permet d'obtenir la valeur des paramètres d'ordre (section 2.3.1 et 2.3.2) qui seront nécessaires pour construire les diagrammes de phases recherchés (section 1.2.2).

#### Solution intégrale aux équations inhomogènes

En mathématique, la fonction de Green est utilisée pour donner la solution de certaines équations différentielles sous forme intégrale. Cette méthode s'applique aux équations non homogènes. Dans le cas général, on écrit l'équation avec l'opérateur différentiel  $\mathcal{L}_x$ , agissant sur  $\mathbf{x}$ , et la source  $f(\mathbf{x})$ , qui détermineront la solution  $y(\mathbf{x})$ .

$$\mathcal{L}_x y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

La *fonction de Green*  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , est alors définie pour obéir à

$$\mathcal{L}_x G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.2)$$

et on obtient la solution intégrale en multipliant (3.2) par  $f(\mathbf{x}')$  de chaque côté et en intégrant sur  $\mathbf{x}'$  [37].

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') = \mathcal{L}_x G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') \quad (3.3)$$

$$\int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \int \mathcal{L}_x G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (3.4)$$

$$f(\mathbf{x}) = \int \mathcal{L}_x G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (3.5)$$

$$\mathcal{L}_x y(\mathbf{x}) = \mathcal{L}_x \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (3.6)$$

$$y(\mathbf{x}) = \int G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')f(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (3.7)$$

### Fonction de Green pour l'équation de Schrödinger

Sans potentiel, l'équation de Schrödinger est homogène et l'absence d'un  $f(\mathbf{x}')$  empêche d'appliquer directement (3.7) pour solutionner avec la fonction de Green.

$$\left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} \right] |\psi(t)\rangle = 0 \quad (3.8)$$

Toutefois, on peut quand même définir l'opérateur  $G_S(t, t')$  :

$$\boxed{G_S(t, t') \equiv -ie^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t')} \quad (3.9)$$

$$\text{où : } \theta(t-t') \equiv \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq t' \\ 1 & \text{si } t > t' \end{cases} \quad (3.10)$$

qui vérifie le critère (3.2) pour l'opérateur différentiel  $\mathcal{L}_S = \left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} \right]$  :

$$\mathcal{L}_S G_S(t, t') = \left[ i \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H} \right] \left( -ie^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t') \right) \quad (3.11)$$

$$= \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t') + i\mathbf{H}e^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t') \quad (3.12)$$

$$= -i\mathbf{H}e^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t') + \delta(t-t') + i\mathbf{H}e^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t') \quad (3.13)$$

$$= \delta(t-t') \quad (3.14)$$

montrant donc que  $G_S(t, t')$  remplit le rôle de fonction de Green pour l'équation de Schrödinger [38].

### Interprétation physique de $G_S(t, t')$

Notons la ressemblance entre l'opérateur  $G_S(t, t')$  et l'opérateur d'évolution habituel du formalisme de Shrodinger  $U(t)$ .

$$U(t) = e^{-i\mathbf{H}t} \quad (3.15)$$

$$G_S(t, t') \equiv -ie^{-i\mathbf{H}(t-t')}\theta(t-t') \quad (3.16)$$

$$= -iU(t-t')\theta(t-t') \quad (3.17)$$

Tout comme  $U(t)$ , l'opérateur  $G_S(t, t')$  permet donc de décrire l'évolution du système. De plus, il est valide pour n'importe quel état de départ  $\psi(t')$ , pourvu que  $t' < t$  (à cause du facteur  $\theta(t-t')$ ) ce qui rend explicite la causalité. Autrement dit, il permet

d'écrire n'importe quel état du système à partir d'un état précédent :

$$\theta(t - t') |\psi(t)\rangle = iG_S(t, t') |\psi(t')\rangle \quad (3.18)$$

Enfin, si on projette cette dernière relation dans une base arbitraire  $|\mathbf{r}\rangle$ , on obtient une fonction de Green scalaire pour chaque état  $|\mathbf{r}\rangle$  de la base.

$$\theta(t - t') \langle \mathbf{r} | \psi(t) \rangle = i \langle \mathbf{r} | G_S(t, t') \int d\mathbf{r}' |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}' | \psi(t') \rangle \quad (3.19)$$

$$\theta(t - t') \psi(\mathbf{r}, t) = i \int \langle \mathbf{r} | G_S(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \psi(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' \quad (3.20)$$

$$= i \int G_S(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \psi(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' \quad (3.21)$$

La fonction de Green

$$G_S(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \equiv \langle \mathbf{r} | G_S(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \quad (3.22)$$

$$= -i \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle \theta(t - t') \quad (3.23)$$

donne alors l'amplitude de probabilité de passer de l'état  $\mathbf{r}'$  au temps  $t'$  à l'état  $\mathbf{r}$  au temps  $t$ , et cela, de façon causale. C'est ce qui lui vaut le nom de *propagateur* [38].

### Propagateur à une particule dans un problème à N-corps

En principe, il n'y a aucune restriction sur le système pour lequel on écrit cette fonction de Green et on pourrait donc s'en servir pour des problèmes à plusieurs particules. On aurait alors des états à N-corps  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$  dans une base  $|\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\rangle$  et la fonction de Green  $G_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N, t')$  dépendrait de deux fois plus de variables que la fonction d'onde. Le problème ne serait aucunement réduit.

Nous définirons donc un objet plus utile : le propagateur d'une *seule* particule dans un système à N-corps. Celui-ci ne sera pas une fonction de Green au sens formel, car les termes d'interaction sont en général des opérateurs quartiques<sup>1</sup> et la définition (3.2) n'est valide que pour un opérateur linéaire. Toutefois, dans le cas sans interaction, le propagateur du problème à N-corps se réduira à la fonction de Green d'une particule libre (3.9). C'est d'ailleurs pourquoi on fait souvent abus de langage en appelant le propagateur fonction de Green. La ressemblance entre les deux nous permettra d'ailleurs de reconnaître et d'isoler la partie venant des interactions (la *self-énergie*), mettant, pour ainsi dire, les difficultés en quarantaine.

1. les opérateurs à deux corps, sont de la forme  $c_{\mathbf{r}_1}^\dagger c_{\mathbf{r}_2} c_{\mathbf{r}_3}^\dagger c_{\mathbf{r}_4}$

Passons à la définition. On se restreint à température nulle, comme pour le reste du projet, et on part de la définition physique d'un propagateur [39].

$$G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t, t') = \begin{array}{l} \text{amplitude de probabilité que l'état fondamental avec} \\ \text{une particule ajoutée dans l'état arbitraire } \mathbf{r}' \text{ au temps } t' \\ \text{se retrouve avec une particule de plus en } \mathbf{r} \text{ au temps } t \end{array} \quad (3.24)$$

On traduit mathématiquement cette définition avec la seconde quantification. Parmi les différentes façons de l'écrire, on choisit la définition du propagateur *causal* [39, 40] :

$$\boxed{G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t, t') = -i \langle \Omega | T c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') | \Omega \rangle} \quad (3.25)$$

notons que les indices  $\mathbf{r}$  sont encore les nombres quantiques d'une base arbitraire d'états à une particule, mais on les a choisis discrets pour mieux faire le lien avec le modèle de Hubbard. Aussi, l'expression est dans la représentation d'Heisenberg et  $T$  n'est pas la température (on est toujours à température nulle) mais *l'opérateur de produit chronologique*, c'est-à-dire :

$$Tc(t)c^\dagger(t') \equiv c(t)c^\dagger(t')\theta(t-t') - c^\dagger(t')c(t)\theta(t'-t) \quad (3.26)$$

Enfin, dans (3.25) le principal inconnu est l'état fondamental du système  $|\Omega\rangle$ . C'est d'ailleurs ce qui rend le propagateur utile ; connaître le propagateur nécessite ou permet, selon le point de vue, de connaître  $|\Omega\rangle$  en partie.

### Lien avec la fonction de Green de l'équation de Schrödinger

Prenons le vide  $|\Omega\rangle = |0\rangle$ , avec le choix  $\epsilon_0 = 0$  pour son énergie [38]. À partir de ce dernier, on peut retrouver la fonction de Green de l'équation de Schrödinger (3.23), qui montre comment se propage une particule seule qu'on crée et qu'on ahinnile. Il suffit de ramener la définition (3.25) dans la représentation de Schrödinger avec  $O(t) = e^{i\hat{H}t} O_S e^{-i\hat{H}t}$  :

$$G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t, t') = -i \langle 0 | T c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') | 0 \rangle \quad (3.27)$$

$$= -i \langle 0 | c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') | 0 \rangle \theta(t-t') + i \langle 0 | c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}}(t) | 0 \rangle \theta(t'-t) \quad (3.28)$$

$$= -i \langle 0 | (e^{i\hat{H}t} c_{\mathbf{r}} e^{-i\hat{H}t}) (e^{i\hat{H}t'} c_{\mathbf{r}'}^\dagger e^{-i\hat{H}t'}) | 0 \rangle \theta(t-t') + 0 \quad (3.29)$$

$$= -i \langle 0 | c_{\mathbf{r}} e^{-i\hat{H}(t-t')} c_{\mathbf{r}'}^\dagger | 0 \rangle e^{i\epsilon_0(t-t')} \theta(t-t') \quad (3.30)$$

$$= -i \langle \mathbf{r} | e^{-i\hat{H}(t-t')} | \mathbf{r}' \rangle \theta(t-t') \quad (3.31)$$

C'est pourquoi on interchange couramment le nom propagateur et fonction de Green.

### Autres définitions du propagateur

Remarquons qu'en développant le produit chronologique (3.26) du propagateur causal (3.25) on trouve qu'il est en deux parties :

$$G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t, t') = -i \langle \Omega | T c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') | \Omega \rangle \quad (3.32)$$

$$= -i \langle \Omega | c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') | \Omega \rangle \theta(t - t') + i \langle \Omega | c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}}(t) | \Omega \rangle \theta(t' - t) \quad (3.33)$$

$$= G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^+(t, t') - G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^-(t, t') \quad (3.34)$$

dont on reconnaît un propagateur de *particules*  $G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^+(t, t')$ , car on y ajoute des particules à l'état fondamental et celui pour les *trous*  $G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^-(t, t')$  où on en annihile. [39]

$$\boxed{G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^+(t, t') \equiv -i \langle \Omega | c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') | \Omega \rangle \theta(t - t')} \quad (3.35)$$

$$\boxed{G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^-(t, t') \equiv -i \langle \Omega | c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}}(t) | \Omega \rangle \theta(t' - t)} \quad (3.36)$$

Enfin, notons au passage, que pour des raisons mathématiques, il est commode de définir les fonctions de Green *retardée* et *avancée*, [39, 40] :

$$\boxed{G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^R(t, t') = -i \langle \Omega | \{ c_{\mathbf{r}}(t), c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') \} | \Omega \rangle \theta(t - t')} \quad (3.37)$$

$$\boxed{G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^A(t, t') = -i \langle \Omega | \{ c_{\mathbf{r}'}^\dagger(t') c_{\mathbf{r}}(t), \} | \Omega \rangle \theta(t' - t)} \quad (3.38)$$

### Propagateur comme solution : relation aux observables

Le propagateur permet de trouver les valeurs moyennes de n'importe quelle observable à un corps. Cela se montre naturellement, car on retrouve une partie du propagateur dans l'expression même de la valeur moyenne d'une observable :

$$\hat{J} = \sum_{\mathbf{r}',\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}'}^\dagger c_{\mathbf{r}} \quad (3.39)$$

$$\langle \Omega | \hat{J} | \Omega \rangle = \sum_{\mathbf{r}',\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} \langle \Omega | c_{\mathbf{r}'}^\dagger c_{\mathbf{r}} | \Omega \rangle \quad (3.40)$$

$$= - \sum_{\mathbf{r}',\mathbf{r}} J_{\mathbf{r}'\mathbf{r}} \lim_{t' \rightarrow t^+} i G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t, t') \quad (3.41)$$

En prenant  $J_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}$  et  $G_{\mathbf{r}'\mathbf{r}}$  respectivement comme des éléments des matrices J et G, on reconnaîtra la trace sur le produit de celles-ci.

$$\boxed{\langle \hat{J} \rangle = \lim_{t' \rightarrow t^+} i \text{Tr} [JG(t, t')]} \quad (3.42)$$

Dans le cas où les éléments de  $J$  comporteraient des dérivées temporelles, il est important de les laisser agir sur  $G(t, t')$  avant de prendre la limite  $t' \rightarrow t^+$ .

Trouver les valeurs moyennes est extrêmement important pour construire le diagramme de phase, puisque les paramètres d'ordre qu'on recherche sont justement des valeurs moyennes d'observables (section 2.3.1 et 2.3.2). La fonction de Green permettra donc de mesurer ceux-ci.

### Traitement numérique : représentation de Lehmann

La représentation de Lehmann n'est qu'une forme alternative pour la fonction de Green. Son nom n'est pas très évocateur, malgré qu'elle ne soit en fait que la transformée de Fourier en temps de (3.25). Celle-ci font intervenir l'énergie du fondamental  $E_0$  et un paramètre infinitésimal  $\eta \rightarrow 0$  nécessaire pour la transformée de Fourier de  $\theta(t)$  (annexe A.4) :

$$G_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = \langle \Omega | c_{\mathbf{r}} \frac{1}{\omega - \hat{H} - E_0 + i\eta} c_{\mathbf{r}'}^\dagger | \Omega \rangle + \langle \Omega | c_{\mathbf{r}'}^\dagger \frac{1}{\omega + \hat{H} - E_0 - i\eta} c_{\mathbf{r}} | \Omega \rangle \quad (3.43)$$

et c'est en y introduisant une relation de fermeture d'états propres du hamiltonien qu'on obtient la représentation de Lehmann :

$$G_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = \sum_m \frac{\langle \Omega | c_{\mathbf{r}} | m \rangle \langle m | c_{\mathbf{r}'}^\dagger | \Omega \rangle}{\omega - E_m - E_0 + i\eta} + \sum_n \frac{\langle \Omega | c_{\mathbf{r}'}^\dagger | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{r}} | \Omega \rangle}{\omega + E_n - E_0 - i\eta} \quad (3.44)$$

C'est la représentation de Lehmann qu'on utilise lors des calculs, car elle se porte bien à une implémentation en liste d'éléments. Pour un système bien défini à moins de 16 orbitales, le programme utilisé, nommé QCM (section 4.1.1), obtient la fonction de Green par diagonalisation exacte avec l'algorithme de Lanczos. Le lecteur voulant plus d'information est invité à consulter les références [41, 42, 43]. On y démontre entre autres l'expression pour les valeurs moyennes dans le domaine des fréquences.

$$\langle \hat{J} \rangle = \frac{1}{N} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \text{Re} \left\{ \text{Tr} [JG(i\omega)] - \frac{\text{Tr} [J]}{i\omega - p} \right\} \quad (3.45)$$

Le facteur  $\frac{1}{N}$  définit la valeur moyenne pour un site de réseau et le terme  $\frac{\text{Tr} [J]}{i\omega - p}$ , où  $p > 0$ , permet d'ignorer la partie du parcours dans le plan complexe autre que  $\int_0^\infty d\omega$  grâce au Lemme de Jordan.

### 3.1.2 Propagateur avec Interactions : self-énergie

#### Représentation d'interaction

À priori, on ne connaît pas l'état fondamental  $|\Omega\rangle$  du système avec interaction. Il n'est donc pas possible d'écrire directement l'expression de son propagateur. Pour contourner le problème, on doit passer à la *représentation d'interaction*. Cette dernière est nommée ainsi par analogie avec les représentations de Schrödinger et d'Heisenberg.

Dans la représentation de Schrödinger, notée  $|\psi_S(t)\rangle$  et  $\hat{O}_S$ , ce sont les états qui dépendent du temps, et dans celle d'Heisenberg notée  $|\psi_H\rangle$  et  $\hat{O}_H(t)$ , ce sont les observables. La représentation d'interaction contiendra les deux, on la notera donc  $|\psi_I(t)\rangle$  et  $\hat{O}_I(t)$ . Pour lier toutes les représentations, on les fait coïncider à  $t=0$  :

$$O_I(0) = O_H(0) = O_S \quad , \quad |\psi_I(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle = |\psi_H\rangle \quad (3.46)$$

La représentation d'interaction est ensuite définie de sorte que les états  $|\psi_I(t)\rangle$  ne contiennent que la dépendance en temps venant des interactions, ce qui laisse la partie sans interaction, qui n'est pas problématique, dans l'évolution des opérateurs  $\hat{O}_I(t)$ . Plus formellement, on doit donc séparer le Hamiltonien en une partie soluble  $\hat{H}_0$  et une partie problématique  $\hat{H}_1$  :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (3.47)$$

On définit ensuite les opérateurs  $\hat{O}_I(t)$  évoluant selon  $\hat{H}_0$ .

$$O_I(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t} O_S e^{-i\hat{H}_0 t} \quad (3.48)$$

En général  $H_0$  et  $H_1$  ne commutent pas, et il faut donc judicieusement définir les états, en leur retirant la dépendance sans interactions :

$$|\psi_I(t)\rangle \equiv e^{i\hat{H}_0 t} |\psi_S(t)\rangle \quad (3.49)$$

$$= e^{i\hat{H}_0 t} e^{-i\hat{H} t} |\psi_H\rangle \quad (3.50)$$

Ces deux conditions mènent aux deux équations du mouvement de la représentation d'interactions. Celle pour les opérateurs est directement analogue à l'équation de Heisenberg :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_I(t) = [\hat{O}_I(t), \hat{H}_0] \quad (3.51)$$

Celle pour les états ressemble à l'équation de Schrödinger, mais avec  $H_1(t)$  qui dépend du temps, elle est appelée *équation de Schwinger-Tomonaga* :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = -\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t} |\psi_S(t)\rangle + i e^{i\hat{H}_0 t} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t)\rangle \quad (3.52)$$

$$= e^{i\hat{H}_0 t} [-\hat{H}_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1] e^{-i\hat{H}_0 t} |\psi_I(t)\rangle \quad (3.53)$$

$$= \hat{H}_1(t) |\psi_I(t)\rangle \quad (3.54)$$

Puisque  $\hat{H}_1$  dépend du temps, l'équation (3.54) a une solution plutôt complexe [40, 44, 45], où les états sont liés dans le temps par  $|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_I(t, t') |\psi_I(t')\rangle$ , avec :

$$\hat{U}_I(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n T \left[ \hat{H}_1(t_1) \hat{H}_1(t_2) \cdots \hat{H}_1(t_n) \right] \quad (3.55)$$

L'expression (3.55) correspond à la théorie des perturbations dépendantes du temps, exprimée dans la forme appelée *série de Dyson*. On peut aussi l'écrire comme une exponentielle,

$$\hat{U}_I(t, t') = T \exp \left[ -i \int_{t'}^t dt_1 \hat{H}_1(t_1) \right] \quad (3.56)$$

et ce, même dans le cas où les  $H_1(t)$  de temps différents ne commutent pas. En effet, l'ordre des opérateurs qui empêcherait normalement de réécrire la série comme une exponentielle est ici imposé par  $T$ , ce qui corrige la situation. D'ordinaire, c'est dans ce contexte qu'on introduit l'opérateur du produit chronologique  $T$ .

## Diagrammes de Feynman

Pour enfin exprimer les propagateurs avec interactions, on s'aide habituellement de leur formulation en *diagrammes de Feynman*. Plusieurs étapes sont nécessaires pour y arriver rigoureusement et nous n'en mentionnerons ici que les grandes lignes. Le lecteur, insatisfait, trouvera les détails dans une des références [39, 40, 44, 46].

Tout d'abord, on doit faire le lien entre l'état fondamental de  $\hat{H}_0$ , qu'on notera  $|\Phi_0\rangle$  et qui est connu, et l'état fondamental pour  $\hat{H}$  complet,  $|\Omega\rangle$  qui lui est inconnu. Cela est possible dans la représentation d'interaction grâce au théorème de *Gell-Mann et Low*. Ce dernier permet d'écrire  $|\Omega\rangle$  avec l'opérateur  $\hat{U}_I(t, t')$  de l'eq. (3.55) :

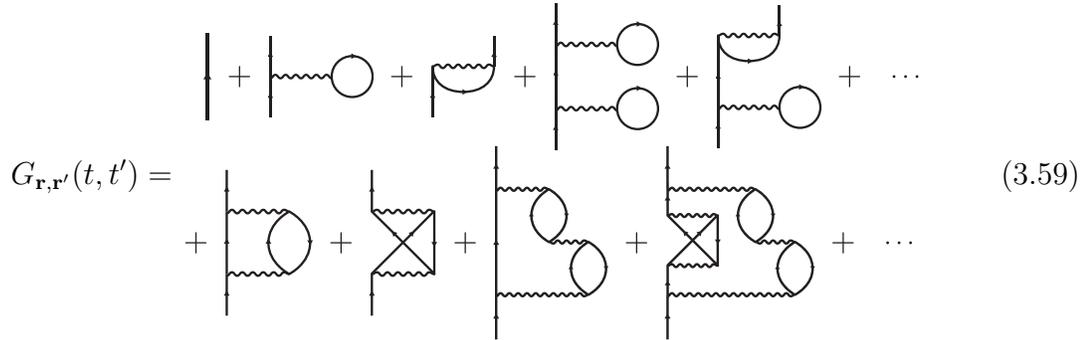
$$|\Omega\rangle = \hat{U}_I(0, -\infty) |\Phi_0\rangle \quad (3.57)$$

Et on peut donc réexprimer le propagateur avec  $|\Phi_0\rangle$ , lui donnant une expression en série qui elle aussi, en principe, est connue :

$$G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t,t') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{\langle \Phi_0 | T[\hat{H}_1(t_1) \dots \hat{H}_1(t_n) c_{\mathbf{r}}(t) c_{\mathbf{r}'}^{\dagger}(t')] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | U(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (3.58)$$

Puisque que  $H_1(t_\nu)$  est habituellement de la forme  $c_{\mathbf{r}_1}^{\dagger}(t_\nu) c_{\mathbf{r}_2}(t_\nu) c_{\mathbf{r}_3}^{\dagger}(t_\nu) c_{\mathbf{r}_4}(t_\nu)$ , il y a une quantité redoutable d'opérateurs d'échelle sous le produit chronologique. Le *théorème de Wick*, découlant directement des règles d'anticommutation de  $c^{\dagger}$  et  $c$ , permet de ré-exprimer la moyenne en encore davantage de termes, mais plus simples. Ils sont tous des produits de paires d'opérateurs de la forme  $\langle \Phi_0 | T c_{\mathbf{r}_i}(t_i) c_{\mathbf{r}_j}^{\dagger}(t_j) | \Phi_0 \rangle$  et on reconnaît alors que ceux-ci sont des fonctions de Green sans interactions  $G_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j}^0(t_i, t_j)$ . L'expression devient alors une série d'intégrales sur des produits de  $G^0$  et de facteurs d'interaction contenus dans  $H_1$ .

Pour le niveau visé par cet ouvrage, il est inutile d'écrire ces termes ou le théorème de Wick. Notons toutefois que c'est à ce point-ci qu'il est possible de traduire la série mathématique en diagrammes de Feynman :



$$G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t,t') = \quad (3.59)$$

Les diagrammes sont composés de traits simples représentant les  $G_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j}^0(t_i, t_j)$  issus du théorème de Wick et de traits ondulés dénotant les facteurs d'interaction  $U_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j}(t_i, t_j)$  venant des  $\hat{H}_1$ . Cela fait en sorte que le nombre de lignes ondulées correspond à l'ordre perturbatif du terme illustré. Les points auxquels ces traits sont attachés sont appelés *vertex* et correspondent aux coordonnées  $\mathbf{r}_i, t_i$  des  $G_0$  et  $U$  qui s'y attachent. Chaque diagramme représente un produit de tels éléments qui doit être intégré sur toutes les possibilités  $\mathbf{r}_i, t_i$  de tous les vertex. Les deux branches libres sont les variables  $\mathbf{r}, t$  et  $\mathbf{r}', t'$  de  $G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(t,t')$ , le propagateur recherché.

## Équation de Dyson et Self-Énergie

Dans le domaine des fréquences, le développement en diagrammes de Feynman permet de trouver l'expression du propagateur sous sa forme la plus simple : L'équation de Dyson.

$$\boxed{G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma} \quad (3.60)$$

Si la fonction de Green,  $G$ , peut prétendre au titre de *solution* du problème à N-corps, l'équation de Dyson nous la montre certainement sous son plus beau jour. La partie sans interaction de la solution,  $G_0$ , y est parfaitement isolée de la partie provenant des interactions,  $\Sigma$ , qu'on appelle *self-énergie*. C'est d'ailleurs cette équation précisément qui définit la self-énergie.

Laissons maintenant la rigueur de côté ramènon (3.60) à une série harmonique.

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma \quad (3.61)$$

$$G = \frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma} \quad (3.62)$$

$$= G_0 \frac{1}{1 - \Sigma G_0} \quad (3.63)$$

$$= G_0 \sum_{n=0}^{\infty} (\Sigma G_0)^n \quad (3.64)$$

$$= G_0 (1 + \Sigma G_0 + (\Sigma G_0)^2 + (\Sigma G_0)^3 + \dots) \quad (3.65)$$

Cette dernière manipulation nous amène à une expression en série, tout comme l'étaient les expressions (3.58) et (3.59). Sans le démontrer ici, notons que ces séries sont toutes équivalentes, sachant que la self-énergie a le développement suivant :

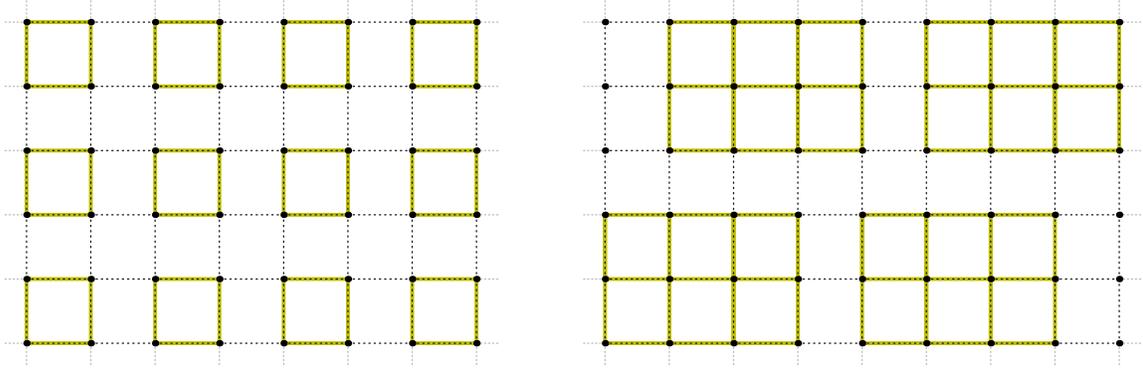
$$\Sigma = \left( \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} + \text{diagramme 3} + \text{diagramme 4} + \dots \right) \quad (3.66)$$

D'ailleurs, les méthodes d'approximations du problème à N-corps consistent généralement à simplifier ce développement. On pourrait par exemple ne garder que les premiers diagrammes de (3.66) et insérer ceux-ci dans l'équation de Dyson. Dans ce projet, on utilisera des prescriptions numériques très spécifiques pour simplifier la self-énergie (sections 3.2.2 et 3.2.3). On parlera donc souvent d'un *espace accessible* pour la self-énergie ou encore d'un écart entre la self-énergie trouvée la véritable self-énergie. De façon plus spécifique, nos méthodes utilisent des systèmes de référence

qu'on résout exactement pour obtenir des self-énergies d'essai. Ces systèmes sont représentés par des *amas*.

## 3.2 Méthodes de calcul sur Amas

Puisqu'il est impossible de diagonaliser l'Hamiltonien de Hubbard pour un réseau infini, il est commode d'utiliser une version amoindrie, un amas, pour approcher le problème. Cet amas fournira une solution exacte dans laquelle on ira chercher la self-énergie (la partie venant des interactions) pour compléter la solution sans interaction, connue, pour le réseau infini. On découpe donc le réseau en un super-réseau d'amas. Dans ce projet, on utilise les amas  $2 \times 2$  et  $4 \times 3$  illustrés à la figure 3.1. C'est aussi vrai pour les réseaux 3D, où ont l'épaisseur d'un seul plan.



**Figure 3.1** Amas utilisés dans le projet

Dans cette construction, un site de position originelle  $\mathbf{r}$  peut être décrit par la position  $\tilde{\mathbf{r}}$  de son amas dans le super-réseau et sa position  $\mathbf{R}$  dans l'amas :  $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$ . Perdre ainsi l'invariance sous translation impose de reconstruire la zone de Brillouin pour le super-réseau seulement. On utilisera donc les vecteurs  $\tilde{\mathbf{k}}$ , sous ensemble des vecteurs  $\mathbf{k}$  du réseau réciproque original. Une fonction indépendante de  $\tilde{\mathbf{k}}$  correspond donc à une fonction identique d'amas en amas et est donc accessible dans la solution de l'amas seule. Pour ce qui suit, on ne s'intéresse qu'à la dépendance en vecteur d'onde du réseau, de sorte qu'on ignorera les indices de spin  $\sigma$  et de site sur l'amas  $\mathbf{R}$  de la base complète  $(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{R}, \sigma, \omega)$ . On peut aussi dire qu'on adopte une notation matricielle pour la dépendance sur  $\mathbf{R}$  [41].

Avec ces considérations, la solution de  $H$ , tel que défini sur le réseau complet,  $G_H(\tilde{\mathbf{k}})$ , inconnue, peut s'écrire comme (3.60) :

$$G_H^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}) = G_{H_0}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_H(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (3.67)$$

Dans cette dernière, il est possible de connaître  $G_0(\tilde{\mathbf{k}})$  et c'est donc la self énergie  $\Sigma_H$  qui constitue le coeur du problème. De la même façon, on peut écrire la solution pour amas (notée avec l'apostrophe), qui, en principe, peut être calculée numériquement :

$$G_{H'}^{-1} = G_{H'_0}^{-1} - \Sigma_{H'} \quad (3.68)$$

Enfin, la forme la plus simple d'approximation sera d'utiliser directement  $\Sigma_{H'}$  comme self-énergie de la solution  $G(\tilde{\mathbf{k}})$ .

$$G_H^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}) \approx G_{H'_0}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}) - \Sigma_{H'} \quad (3.69)$$

Cette approximation équivaut à traiter les sauts interamas comme une perturbation au premier ordre et on l'appelle donc *théorie des perturbations pour amas* (CPT). [41]

Évidemment, la solution de l'amas ne donnera pas systématiquement une self-énergie qui représente bien celle du réseau. Par exemple, en diagonalisant l'amas, il est impossible d'obtenir un ordre à longue portée comme l'antiferromagnétisme et il en est de même pour tout ordre issu d'une brisure spontanée de symétrie. Pour obtenir ce genre de solution, il faut ajouter des paramètres supplémentaires à l'amas, dont la valeur est déterminée par un principe variationnel ou par une méthode autocohérente. Pour explorer certaines de ces méthodes, il existe un cadre théorique très utile : la fonctionnelle de Potthoff.

### 3.2.1 Fonctionnelle de la self-énergie (Potthoff)

La *fonctionnelle de Potthoff* ou *fonctionnelle de self-énergie* [47] offre un cadre théorique pour justifier les approches comme la théorie de champs moyen dynamique sur amas (CDMFT) ou l'approximation de l'amas variationnel (VCA). Nous en donnons ici les concepts élémentaires.

Tout d'abord, il est important de définir ce qu'on entend par *fonctionnelle*. Une fonctionnelle prend comme argument une fonction et elle renvoie un scalaire. Dans

notre cas, les fonctions utilisées en arguments seront les fonctions de Green  $G_{\alpha,\beta}(\omega)$  et les self-énergies  $\Sigma_{\alpha,\beta}(\omega)$  qui sont *fonctions* des variables  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\omega$ . Les indices  $\alpha$  et  $\beta$  sont ici une notation simplifiée de tous les nombres quantiques nécessaires pour bien définir la fonction de Green. Pour la suite, on laissera toujours ces variables implicites. Enfin, un dernier détail important est la définition qu'on donne à la trace fonctionnelle :  $\text{Tr} [\dots] \equiv \frac{1}{T} \sum_{\alpha,\beta,\omega} [\dots]$ , qui sera utilisée tout au long de la section. [47]

Pour arriver à la *fonctionnelle de la self-énergie*, nous partons de la fonctionnelle de Luttinger-Ward  $\Phi_U[G]$ , introduite en 1960 [48], et qui agit sur un espace de fonction de Green. On s'en sert pour deux raisons. Premièrement, elle est *universelle*, c'est-à-dire qu'elle ne dépend que de la partie interagissante du système (indice  $U$ ). Deuxièmement, elle est définie de sorte que :

$$\frac{\delta \Phi_U[G]}{\delta G} = \Sigma[G] \quad (3.70)$$

où la fonctionnelle  $\Sigma[G]$  devient la self-énergie physique  $\Sigma_H$  du système pour sa fonction de Green solution  $G_H$ .

En général, la fonction de Green est liée à la self-énergie de façon univoque :  $G[\Sigma] \leftrightarrow \Sigma[G]$  (excepté aux points critiques et aux changements de phase). Grâce à cela, on peut obtenir la fonction de Green solution à partir de la self-énergie physique :

$$G[\Sigma_H] = G_H \quad (3.71)$$

De plus, cette correspondance  $G[\Sigma] \leftrightarrow \Sigma[G]$  fait qu'il est possible de définir la *transformée de Legendre fonctionnelle* de  $\Phi_U[G]$ . On note celle-ci  $F_U[\Sigma]$  et c'est la fonctionnelle équivalente à  $\Phi_U[G]$  pour l'espace des  $\Sigma$ .

$$F_U[\Sigma] = \Phi_U[G[\Sigma]] - \text{Tr} [\Sigma G[\Sigma]] \quad (3.72)$$

Dans cette expression, la trace agit sur les indices implicites  $\mathbf{r}, \sigma$  de la fonction de Green ainsi que sur les fréquences  $\omega$ . Enfin, la dérivée de  $F_U[\Sigma]$  donne :

$$\frac{\delta F_U[\Sigma]}{\delta \Sigma} = -G[\Sigma] \quad (3.73)$$

### Définition de la fonctionnelle $\Omega$

On peut maintenant définir la *fonctionnelle de self-énergie* [47] :

$$\boxed{\Omega[\Sigma] \equiv \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma} \right] + F_U[\Sigma]} \quad (3.74)$$

Cette dernière fonctionnelle est différente pour chaque système, et puisqu'en général la forme exacte de  $F_U[\Sigma]$  est inconnue, on ne pourra pas la calculer directement.

L'intérêt de  $\Omega[\Sigma]$  vient de son point stationnaire, qui renvoie à une équation fonctionnelle dont on connaît la solution, c'est d'ailleurs cela qui justifie sa définition.

$$\frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} = \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma} - G[\Sigma] \quad (3.75)$$

$$\frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} = 0 \quad \longrightarrow \quad G[\Sigma] = \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma} \quad (3.76)$$

Cette dernière équation trouve sa solution si on l'évalue à la self-énergie physique  $\Sigma = \Sigma_H$ . En effet, avec  $\Sigma_H$ , le côté droit correspond à l'équation de Dyson (3.60) et donne donc la fonction de Green solution  $G_H$ . Or, pour le côté gauche, la relation (3.71),  $G[\Sigma] = G_H$  nous donne aussi cette solution. On trouve donc que la self-énergie pour laquelle  $\Omega[\Sigma]$  est stationnaire est  $\Sigma_H$ , la self-énergie physique.

$$\left. \frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} \right|_{\Sigma_H} = 0 \quad (3.77)$$

Ainsi, la fonctionnelle de Potthoff donne un critère pour trouver la solution du hamiltonien  $H$  en explorant un domaine de self-énergie à la recherche de  $\Sigma_H$ . Notons aussi qu'à son point stationnaire, la fonctionnelle de Potthoff donne le grand potentiel du système. [47]

$$\Omega[\Sigma_H] = \Omega_H \quad (3.78)$$

### Utilisation d'un système de référence avec $\Omega$

On montrera ici qu'il est possible d'obtenir une expression exacte pour la fonctionnelle de Potthoff évaluée à la self-énergie d'un système de référence. En ajoutant des paramètres variationnels à ce dernier, on obtiendra tout un domaine de self-énergies duquel on peut en choisir une qui donne une bonne approximation au système à résoudre. En ce sens, on peut voir l'introduction des paramètres variationnels comme

une façon de construire un ensemble de systèmes de référence.

Le système à résoudre est défini par le hamiltonien  $H$ . On connaît sa solution sans interactions  $G_{H_0}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$  et on cherche sa solution complète  $G_H(\tilde{\mathbf{k}})$  et donc du même coup  $\Sigma_H$ . La fonctionnelle de Potthof de ce système est inconnue à cause de la partie  $F_U[\Sigma]$ .

$$\Omega[\Sigma] = \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma} \right] + F_U[\Sigma] \quad (3.79)$$

Le système de référence, est défini par le hamiltonien  $H'_\lambda$ , où  $\lambda$  dénote l'ensemble de paramètres variationnels. Chaque ensemble de valeurs des paramètres de  $\lambda$  détermine donc un système de référence donné. On doit faire en sorte que  $H'_\lambda$  possède toujours la même partie d'interaction  $U$  que le hamiltonien  $H$ , et alors la transformée de Legendre de la fonctionnelle de Luttinger-Ward,  $F_U[\Sigma]$  sera la même pour les deux systèmes. La fonctionnelle de Potthof du système de référence s'exprimera donc comme :

$$\Omega'[\Sigma] = \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H'_{\lambda_0}}^{-1} - \Sigma} \right] + F_U[\Sigma] \quad (3.80)$$

de sorte qu'on puisse soustraire (3.80) de (3.79) pour obtenir une expression exacte de  $\Omega[\Sigma]$  :

$$\begin{aligned} \Omega[\Sigma] &= \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma} \right] + F_U[\Sigma] \\ &\quad + \Omega'[\Sigma] - \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H'_{\lambda_0}}^{-1} - \Sigma} \right] - F_U[\Sigma] \end{aligned} \quad (3.81)$$

$$= \Omega'[\Sigma] + \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma} \right] - \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H'_{\lambda_0}}^{-1} - \Sigma} \right] \quad (3.82)$$

À ce point, il faut pouvoir résoudre  $H'_\lambda$  exactement. On écrit alors les quantités obtenues  $G_{H'_{\lambda_0}}$  et  $\Sigma_{H'_\lambda}$  et grâce à (3.78), on connaît aussi la valeur de  $\Omega'[\Sigma]$  pour la self-énergie  $\Sigma_{H'_\lambda}$  qui correspond à  $\Omega_{H'_\lambda}$ , le grand potentiel du système de référence. Tout cela fait que pour chacune des self-énergies  $\Sigma_{H'_\lambda}$  accessibles par les ensembles de

paramètres  $\lambda$ , on peut évaluer exactement la fonctionnelle de Potthoff :

$$\Omega[\Sigma_{H'_\lambda}] = \Omega_{H'_\lambda} + \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma_{H'_\lambda}} \right] - \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_{\lambda_0}}^{-1} - \Sigma_{H'_\lambda}} \right] \quad (3.83)$$

$$= \Omega_{H'_\lambda} + \text{Tr} \left[ \ln \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma_{H'_\lambda}} \right] - \text{Tr} [\ln G_{H'_\lambda}] \quad (3.84)$$

On peut alors appliquer le principe variationnel (3.77) à l'ensemble de paramètres variationnels  $\lambda$  et donc on a plus qu'à trouver le point stationnaire d'une fonction[47].

$$\left. \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda_{\text{opt.}}} = 0 \quad (3.85)$$

Les paramètres de l'ensemble optimal  $\lambda_{\text{opt.}}$  détermine ici un système  $H_{\text{opt.}}$ , que l'on peut résoudre et qui nous donne alors la self-énergie  $\Sigma'_{H_{\text{opt.}}}$ . On sait que celle-ci se rapproche beaucoup de  $\Sigma_H$ , la self-énergie de la véritable solution au problème, et cela nous donne un critère de solution. Notons par ailleurs que  $\Sigma'_{H_{\text{opt.}}}$  n'est pas pour autant garantie d'être la self-énergie la plus proche de  $\Sigma_H$  du domaine défini par les valeurs de l'ensemble  $\lambda$ . L'équation (3.85) est donc un bon critère, mais il pourrait en exister de meilleurs.

### 3.2.2 Approximation de l'amas variationnel (VCA)

Dans l'approximation de l'amas variationnel (VCA), on utilise le critère (3.85) pour un ensemble de paramètres variationnels définis sur l'amas. Ces paramètres peuvent être vus comme des *champ de Weiss*, puisque leur rôle est de faire apparaître les paramètres d'ordre recherchés. Dans notre cas, ceux-ci sont l'antiferromagnétisme, représenté par l'opérateur  $\hat{M}$  (section 2.3.1), et la supraconductivité, représentée par l'opérateur  $\hat{D}$  (section 2.3.2). On ajoutera donc ces opérateurs au hamiltonien de référence, avec des contributions respectivement contrôlées par les champs de Weiss  $M_1$  et  $D_1$ . Nous n'aurons pas besoin d'introduire un champ de Weiss pour le paramètre  $\langle \hat{T} \rangle$ , car celui-ci apparaîtra naturellement lors de la coexistence de  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$ .

Il est aussi nécessaire d'ajouter le potentiel chimique de l'amas  $\mu_1$  aux paramètres variationnels pour pouvoir atteindre la *cohérence thermodynamique* pour le nombre de particules. Cela signifie qu'à la solution finale, l'intégrale (3.45) sur la fonction de Green pour calculer  $\langle \hat{n} \rangle$  deviendra équivalente à l'expression thermodynamique

$$\langle \hat{n} \rangle = -\partial\Omega/\partial\mu_1.$$

Au final, on aura donc l'expression suivante pour  $H'_\lambda$ , avec l'ensemble de paramètres variationnels  $\lambda = \{M_1, D_1, \mu_1\}$ . Rappelons que la structure en super-réseau nécessite qu'on retire des sommations tout terme qui lierait deux amas.

$$\begin{aligned} H'_{\{M_1, D_1, \mu_1\}} = & - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu_1 \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \\ & + \underbrace{M_1 \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})}_{\hat{M}} + \underbrace{D_1 \sum_{ij} \Delta_{ij} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + c.h.)}_{\hat{D}} \end{aligned} \quad (3.86)$$

Cet hamiltonien est diagonalisable numériquement, ce qui permet de rechercher le point stationnaire de l'expression (3.84) de la fonctionnelle de Potthoff pour les paramètres  $\lambda = \{M_1, D_1, \mu_1\}$ . Pour y parvenir, il suffit d'utiliser une des nombreuses méthodes numériques pour trouver le point stationnaire d'une fonction. Par exemple, dans ce projet, on utilisait la méthode de Newton-Raphson. La partie longue du calcul est alors de trouver les valeurs de  $\Omega(\mu_1, M_1, D_1)$  car il faut faire une diagonalisation pour chaque ensemble de valeurs des paramètres.

### 3.2.3 Théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT)

Dans la théorie du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT), le système de référence n'est pas constitué de l'amas seul, mais aussi d'un *bain*, servant à simuler l'effet du réseau sur l'amas. Ce dernier est défini sur les *sites de bains*<sup>2</sup> (identifiées par  $\mu$  et  $\nu$ ), ajoutés au hamiltonien  $H'_\lambda$  et sur lesquels il n'y a pas interaction  $U$ . On l'écrit avec les paramètres *de bain*  $\theta_{i,\mu}$ , représentant l'hybridation bain-amas, et  $\epsilon_{\mu,\nu}$ , définissant l'énergie du bain.

$$\begin{aligned} H'_{\theta_{i,\mu}, \epsilon_{\mu,\nu}} = & - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ & + \sum_{i,\mu,\sigma} \theta_{i,\mu,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{\mu\sigma} + c_{\mu\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{\mu,\nu,\sigma} \epsilon_{\mu,\nu,\sigma} (c_{\mu\sigma}^\dagger c_{\nu\sigma} + c_{\nu\sigma}^\dagger c_{\mu\sigma}) \end{aligned} \quad (3.87)$$

La procédure de la CDMFT est de redéfinir ce bain itérativement jusqu'à ce qu'il reproduise le plus fidèlement possible l'effet réel du réseau. On choisit donc un bain de départ, à l'aveugle, qui déterminera ultimement la solution finale. De ce bain, on obtient

2. Le mot *site* est un abus de langage, car les *sites* de bain n'ont pas de localisation spatiale.

la solution correspondante pour le réseau complet, qui nous fournit, par projection, un nouveau bain, avec lequel on recommence la procédure. On réitère jusqu'à ce qu'un bain mène à lui-même, impliquant donc que sa solution est autocohérente. Il s'agit donc d'une méthode itérative à solution autocohérente. [43]

En interprétant les paramètres de bains  $\theta_{i,\mu}$  et  $\epsilon_{\mu,\nu}$  comme les paramètres variationnels  $\lambda$ , on peut voir la CDMFT comme un cas particulier de l'utilisation du critère de Potthoff (3.85). Toutefois, à la section suivante, on définira 12 paramètres  $\theta$  et  $\epsilon$  indépendants ce qui donne un espace de paramètres trop grand pour appliquer facilement le critère de Potthoff<sup>3</sup>. Dans les faits, la boucle itérative de la CDMFT revient plutôt à satisfaire partiellement le critère (3.85). C'est ce point de vue qu'on prend ici.

Commençons avec l'expression explicite pour (3.85) (La dérivée de l'expression (3.84), avec la trace fonctionnelle  $\text{Tr} [\dots] \equiv \frac{1}{T} \sum_{\alpha,\beta,\omega} [\dots]$  et au point stationnaire) :

$$\sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \left( \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma_{H'_\lambda}} - G_{H'} \right)_{\beta\alpha} \left( \frac{\partial \Sigma_{H'_\lambda}}{\partial \lambda} \right)_{\alpha\beta} = 0 \quad (3.88)$$

Cette équation peut être satisfaite de différentes manières et il se trouve que la condition de convergence de la CDMFT tente d'annuler le facteur gauche pour tous les indices  $\alpha, \beta$  :

$$\left( \frac{1}{G_{H_0}^{-1} - \Sigma_{H'_\lambda}} - G_{H'} \right)_{\alpha\beta} \longrightarrow 0 \quad \forall \alpha, \beta \quad (3.89)$$

Pour un amas fini, il faut pondérer les termes en fonction de leur fréquence car il est impossible de satisfaire l'expression pour tout  $\omega$ . Cela montre que la CDMFT remplit un critère moins complet que pour la VCA, mais avec un espace de self-énergies plus complet.

### 3.2.4 Paramètres de bain en CDMFT

En CDMFT (section 3.2.3) on recherche, pour l'amas, la solution la plus proche de celle du réseau infini. Afin d'agrandir l'espace des solutions accessibles, l'amas de 4 sites (2x2) est augmenté d'un bain de 8 orbitales sans interaction  $U$ . On peut voir ce

---

3. La méthode consistant à satisfaire le critère (3.85) directement pour un amas avec bain se nomme Approximation Dynamique pour Impureté en Amas (CDIA) et elle relève encore du défi.

dernier comme un moyen de simuler les degrés de liberté du réseau absents de l'amas seul. Le hamiltonien de l'amas  $\hat{H}'$  sera donc modifié.

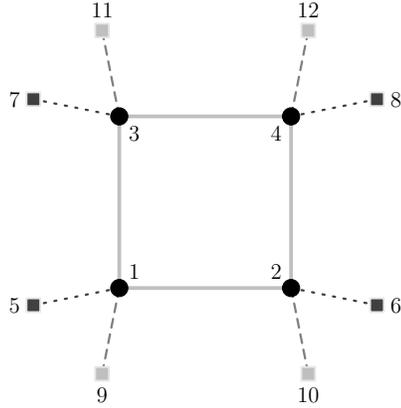
L'objet de cette section est de décrire les paramètres d'hybridation qui modifient  $\hat{H}_1$ . Notons que cette façon de définir les paramètres de bain n'est pas unique [49]. Ils consistent ici en des termes de sauts du bain à l'amas ou des modificateurs de l'énergie des sites de bain, y favorisant ou défavorisant le déplacement des électrons. Grâce à la symétrie de l'amas, on peut les définir en blocs de 4. Puisqu'il y a 8 sites de bain, cela donne deux groupes de paramètres qu'on appelle naturellement *bain 1* et *bain 2* et donc chacun des quatres site d'amas  $i$  est connecté à une orbitale  $\mu$  du bain 1, et à une orbitale  $\nu$ , du bain 2 ce qui donne un total de 12 sites.

$$i \in \{1, 2, 3, 4\} \quad \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \quad \text{où : } \downarrow \equiv (-\uparrow) \quad (3.90)$$

$$\mu \in \{5, 6, 7, 8\} \quad \nu \in \{9, 10, 11, 12\} \quad (3.91)$$

### Paramètres de bain de base

Il y a quatre degrés de liberté standards qu'on ajoute toujours au bain. Premièrement, il y a les paramètres de sauts, noté  $t_{b1}$  pour un saut entre le bain 1 et l'amas et  $t_{b2}$  pour un saut avec le bain 2. Et deuxièmement, on ajoute des énergies  $e_{b1}$  et  $e_{b2}$  à d'éventuels électrons localisés sur les sites des baines 1 et 2, respectivement.

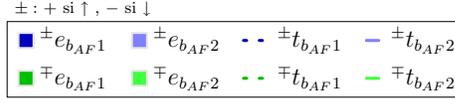
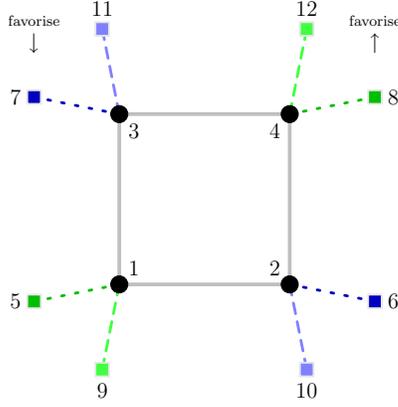


$$\begin{aligned} \hat{H}_b = & e_{b1} \sum_{\mu,\sigma} \hat{n}_{\mu,\sigma} \\ & + e_{b2} \sum_{\nu,\sigma} \hat{n}_{\nu,\sigma} \\ & - t_{b1} \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+4,\sigma} + c.h. \\ & - t_{b2} \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+8,\sigma} + c.h. \end{aligned}$$

### Paramètre de bain antiferromagnétique

Pour obtenir l'antiferromagnétisme, on doit briser l'équivalence entre les spins up et down dans le bain. Pour le faire, on introduit des modificateurs aux paramètres standards, c'est-à-dire qu'ils deviennent  $t_{b1} \pm t_{b_{AF1}}$ ,  $t_{b2} \pm t_{b_{AF2}}$ ,  $e_{b1} \pm e_{b_{AF1}}$  et  $e_{b2} \pm e_{b_{AF2}}$ , avec le signe qui dépend du spin favorisé sur le site en question. Par exemple, si l'orbitale  $5 \uparrow$  a l'énergie de bain  $e_{b1} - e_{b_{AF1}}$ , alors  $5 \downarrow$  aura  $e_{b1} + e_{b_{AF1}}$ , favorisant le spin up. Le

site voisin aura les signes inverses, puisqu'on cherche à avoir l'antiferromagnétisme. De plus, on n'en force pas la direction, puisque les modificateurs peuvent être positifs, négatifs, ou nuls.



$$\begin{aligned} \hat{H}_{b_{AF}} = & e_{b_{AF}1} \sum_{\mu} (-1)^{\mu} (\hat{n}_{\mu\uparrow} - \hat{n}_{\mu\downarrow}) \\ & + e_{b_{AF}2} \sum_{\nu} (-1)^{\nu} (\hat{n}_{\mu\uparrow} - \hat{n}_{\mu\downarrow}) \\ & + t_{b_{AF}1} \sum_i (-1)^i (c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i+4,\uparrow} - c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i+4,\downarrow}) + c.h. \\ & + t_{b_{AF}2} \sum_i (-1)^i (c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i+8,\uparrow} - c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i+8,\downarrow}) + c.h. \end{aligned}$$

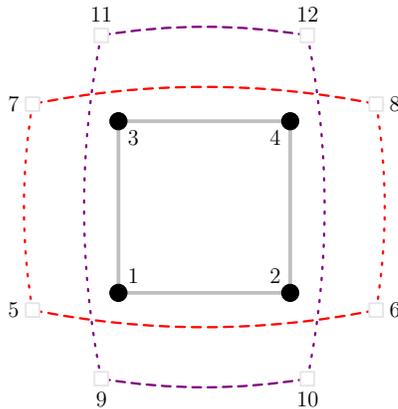
### Paramètre de bain supraconducteur

Pour obtenir des paires supraconductrices dans l'amas, on peut les laisser se former dans le bain. Pour cela, on définit quels sites du bain s'apparieront, en tenant compte des liens définis par les  $t_{b1}$  et  $t_{b2}$  :

$$(\mu, \mu') \in \{(5, 6), (5, 7), (8, 6), (8, 7)\} \quad (3.92)$$

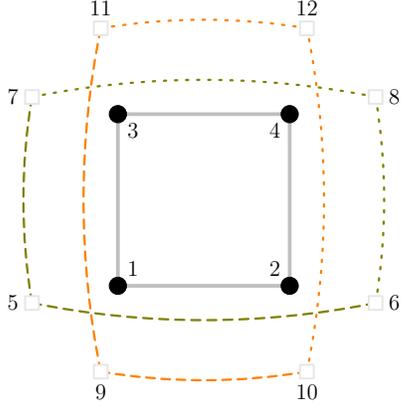
$$(\nu, \nu') \in \{(9, 10), (9, 11), (12, 10), (12, 11)\} \quad (3.93)$$

Pour la supraconductivité singulet, on demande donc des paires en singulets, avec la symétrie de type  $d$ , soit favorisées avec les paramètres  $d_{s1}$  et  $d_{s2}$ , respectivement dans les bains 1 et 2. Attention : pour reproduire correctement le dessin, les sommes sur  $\mu, \nu$  doivent être prises exactement sur les paires énumérées en (3.92) et (3.93) :



$$\begin{aligned} \hat{H}_{d_{SC}} = & + d_{s1} \sum_{(\mu, \mu')} (-1)^{\mu' - \mu} (c_{\mu\uparrow}^{\dagger} c_{\mu'\downarrow}^{\dagger} + c_{\mu'\uparrow}^{\dagger} c_{\mu\downarrow}^{\dagger}) + c.h. \\ & + d_{s2} \sum_{(\nu, \nu')} (-1)^{\nu' - \nu} (c_{\nu\uparrow}^{\dagger} c_{\nu'\downarrow}^{\dagger} + c_{\nu'\uparrow}^{\dagger} c_{\nu\downarrow}^{\dagger}) + c.h. \end{aligned}$$

Pour la supraconductivité triplet, de la même façon, on demande donc des paires en triplets. Cette fois-ci cependant, il faut tenir compte à la fois de la symétrie de type  $d$  et du changement de signe venant du facteur  $e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}$ . Ce sont les paramètres  $t_{d1}$  et  $t_{d2}$  qui génèrent ces paires. Encore une fois, les sommes sur  $\mu, \nu$  doivent être prises exactement sur les paires énumérées en (3.92) et (3.93) :



$$\hat{H}_{t_{SC}} = + t_{d1} \sum_{(\mu, \mu')} (-1)^\mu (c_{\mu\uparrow}^\dagger c_{\mu'\downarrow}^\dagger - c_{\mu'\uparrow}^\dagger c_{\mu\downarrow}^\dagger) + c.h.$$

$$+ t_{d2} \sum_{(\nu, \nu')} (-1)^\nu (c_{\nu\uparrow}^\dagger c_{\nu'\downarrow}^\dagger - c_{\nu'\uparrow}^\dagger c_{\nu\downarrow}^\dagger) + c.h.$$

## Chapitre 4

# Résultats

### 4.1 Détails sur les calculs et l’affichage des résultats

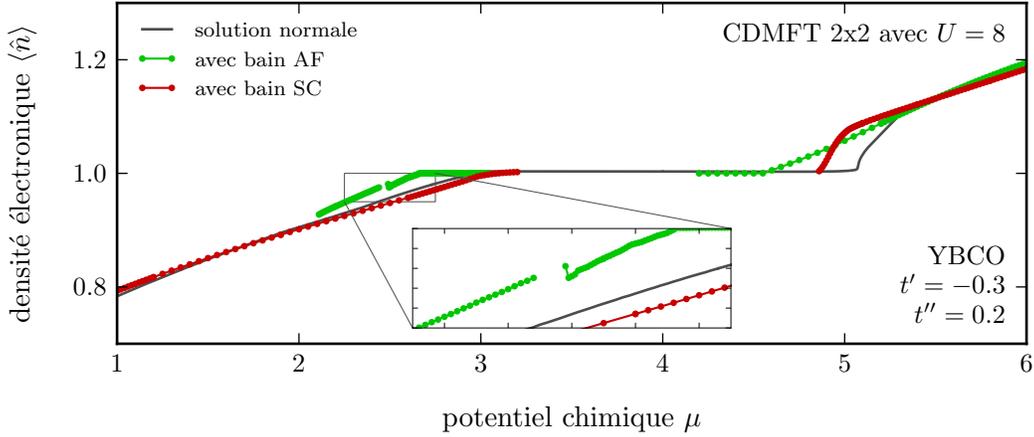
#### 4.1.1 le code QCM

Tous les résultats furent obtenus avec le programme QCM ou son prédécesseur QCT, écrits par le professeur David Sénéchal. Le code implémente les méthodes pour amas VCA et CDMFT (sections 3.2.2 et 3.2.3) et permet beaucoup de flexibilité. Le code QCM transcende beaucoup le niveau de ce projet, et nous ignorerons donc les détails de son fonctionnement. Il est essentiel de mentionner que son solveur d’impureté utilise la diagonalisation exacte, mais pour le reste, nous ne discuterons que de ses entrées et sorties.

#### 4.1.2 Balayage en $\langle \hat{n} \rangle$

Les résultats de ce projet montrent toujours des paramètres d’ordre en fonction de la densité électronique  $\langle \hat{n} \rangle$ . En abscisse ( $x$ ), la valeur de  $\langle \hat{n} \rangle$  d’un point dépend du potentiel chimique  $\mu$  choisi pour son calcul. Celle-ci peut d’ailleurs changer au cours du calcul. En VCA, cette liberté est nécessaire pour atteindre la *cohérence thermodynamique* dont nous ne discuterons pas ici. En CDMFT, c’est le bain qui permet au nombre de particules sur l’amas de varier pendant le calcul. L’impact du choix de  $\mu$  sur la valeur obtenue pour  $\langle \hat{n} \rangle$  est montrée à la figure 4.1.

En ordonnée ( $y$ ), on veut obtenir une valeur non-nulle les paramètres d’ordre recherchés, c’est-à-dire les valeurs moyennes  $\langle \hat{D} \rangle$ ,  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{T} \rangle$ . Pour y arriver il faut



**Figure 4.1** Évolution de la densité électronique  $\langle \hat{n} \rangle$  en fonction du potentiel chimique  $\mu$ . Le  $\langle \hat{n} \rangle$  obtenu dépend des paramètres du modèle, comme le montre la différence entre les solutions supraconductrice (SC) et antiferromagnétique (AF). L’encadré met en évidence que des boucles de calculs indépendantes sont déconnectées.

choisir les valeurs de départ pour les champs de Weiss (en VCA) ou les paramètres de bain (en CDMFT) correspondant. Comme pour le potentiel chimique, ces dernières vont varier jusqu’à la convergence du calcul à une solution. C’est cette solution qui permet de calculer les valeurs moyennes  $\langle \hat{D} \rangle$ ,  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{T} \rangle$ .

La solution obtenue dépend fortement des valeurs de départs pour tous ces paramètres variationnels. Typiquement, une seule solution avec des paramètres d’ordre non nulle existe et on cherche à éviter les solutions ou certains paramètres d’ordre finissent à valeurs nulles. Parfois, plusieurs solutions existent et il est alors difficile de discriminer. La figure 4.1 montre quelle valeur de  $\mu$  mène à la densité  $n$  recherchée pour le cas  $U=8$  en CDMFT. On voit notamment un plateau, le *plateau de Mott*, qui dénote le gap d’énergie entre le domaine pour lequel  $\langle \hat{n} \rangle < 1$  de celui pour lequel  $\langle \hat{n} \rangle > 1$ . La forme de la courbe dépend des paramètres variationnels inclus dans le calcul, de sorte que le choix d’un  $\mu$  n’est pas trivial.

Le plus simple pour obtenir un balayage en  $\langle \hat{n} \rangle$  est de faire une boucle de calcul sur différentes valeurs du potentiel chimique. Pour chaque calcul de la boucle, cependant, les valeurs initiales des paramètres variationnels (les champs de Weiss en VCA et les paramètres de baigns en CDMFT) doivent être déterminées car des valeurs purement arbitraire mènent souvent à un échec du programme. Évidemment, le premier calcul de la boucle utilise les paramètres fournis par l’utilisateur, mais, afin de gagner du

temps, le code QCM utilise les paramètres convergés de la solution précédente pour déterminer les nouveaux paramètres initiaux. Il peut donc arriver, en se déplaçant ainsi de proche en proche, qu'on favorise une solution qui serait instable autrement.

Dans les résultats présentés, pour distinguer les boucles indépendantes, on connectera les points appartenant à une même boucle. Pour l'illustrer, l'encadré de la figure 4.1 met en évidence deux boucles différentes, qui sont donc déconnectées. Remarquons qu'il est pratiquement impossible d'obtenir les courbe complète d'une extrémité à l'autre. Habituellement, on part d'une solution stable, c'est à dire en plein coeur d'une courbe connectée, pour faire deux boucles de calcul, une vers la gauche et une vers la droite, afin obtenir tous les points.

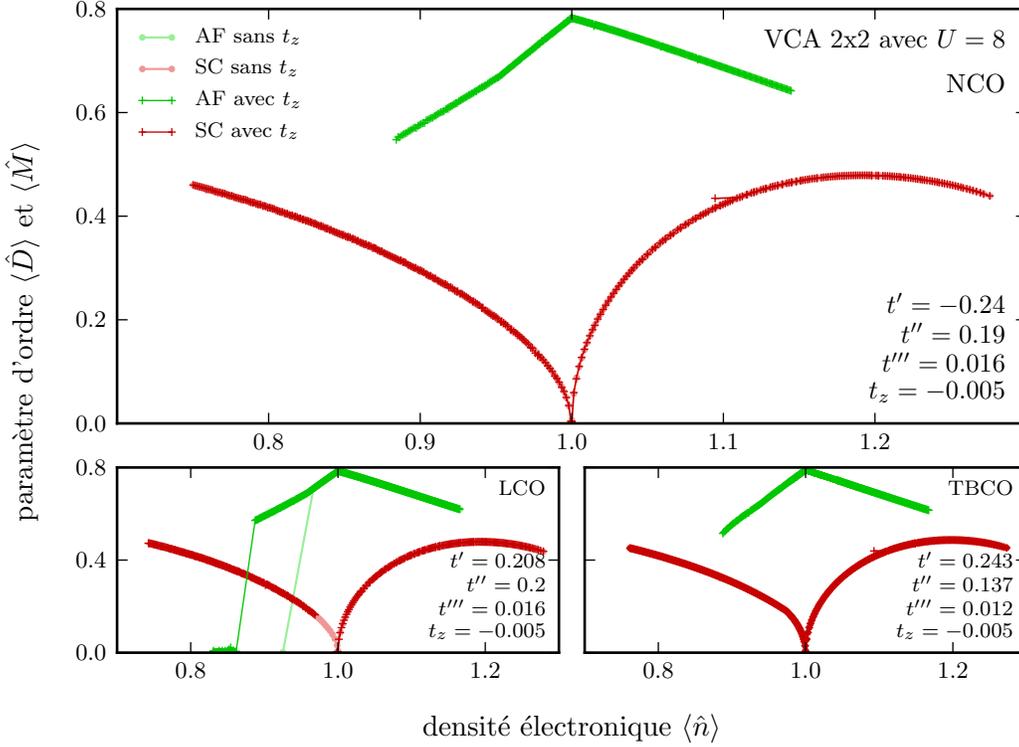
### 4.1.3 Un mot sur l'Annexe A.5

Les paramètres variationnels initiaux, c'est-à-dire les champs de Weiss en VCA et les paramètres de bain en CDMFT, doivent être relativement proches de leur valeur convergée. Pour alléger la discussion, on a mis à l'annexe A.5 les graphiques montrant les paramètres variationnels convergés en fonction de  $\mu$ . Cela évitera d'avoir à mentionner pour chaque résultat quels étaient les paramètres de départ, et les figures s'avéreront peut-être utiles aux utilisateurs voulant reproduire nos résultats.

## 4.2 Résultats pour l'objectif I : sauts interplans

### 4.2.1 $t_z$ réalistes

La figure 4.2 présente les diagrammes de phase à température nulle avec et sans sauts interplans  $t_z$  réalistes, c'est-à-dire pour les paramètres de bandes fournis par Chuck (2.11). Les calculs étaient faits avec la méthode VCA sur un amas 2x2 avec le paramètre d'interaction  $U = 8$ . On rappelle que les plans ne sont couplés que par la relation d'auto-cohérence inhérente à la méthode de Potthoff puisque l'amas utilisé est toujours 2D. On commentera lors de la discussion (section 4.2.3) comment il serait possible de poursuivre au delà de cette restriction. Les paramètres variationnels du modèle sont  $\mu_1$  et  $M_1$  pour le cas AF et  $\mu_1$  et  $D_1$  pour le cas SC. Leurs valeurs convergées de ces paramètres pour le NCO se retrouvent aux figures A.1, A.2 et A.3

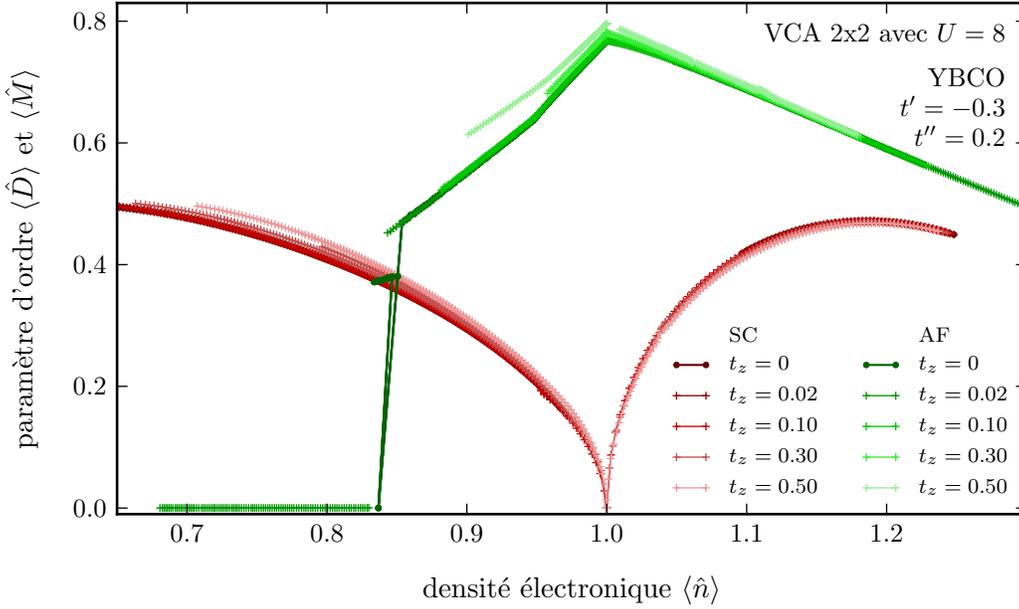


**Figure 4.2** Pour les paramètres LCO, NCO et TBCO, les diagrammes de phases obtenus en VCA 2x2 avec un  $t_z$  réaliste se superposent parfaitement à ceux obtenus pour les cas bidimensionnels.

de l'annexe A.5. On note déjà l'observation qui reviendra pour tous les résultats avec des valeurs faibles de  $t_z$  : les résultats 2D et 3D sont parfaitement superposés, montrant qu'il n'y a pas de distinction entre les deux modèles pour les calculs de paramètres d'ordre.

#### 4.2.2 $t_z$ artificiels

À la figure 4.3, on amplifie artificiellement le terme de saut  $t_z$  jusqu'à 0.5 afin de trouver son effet. Les calculs sont ceux du stagiaire Charles Pichette, en VCA 2x2 pour  $U=8$ . Ils incluaient les paramètres variationnels  $\mu_1$  et  $M_1$  pour le cas AF ainsi que  $\mu_1$  et  $D_1$  pour le cas SC. Les valeurs convergées se retrouvent dans les figures A.4, A.5 et A.6 de l'annexe A.5. On voit que même exagérées, les valeurs de saut en  $z$  jusqu'à 0.3 n'induisent pas de différence dans les résultats. Néanmoins, on voit que le saut interplan de 0.5 renforce un peu l'antiferromagnétisme dans la partie  $\langle \hat{n} \rangle < 1$

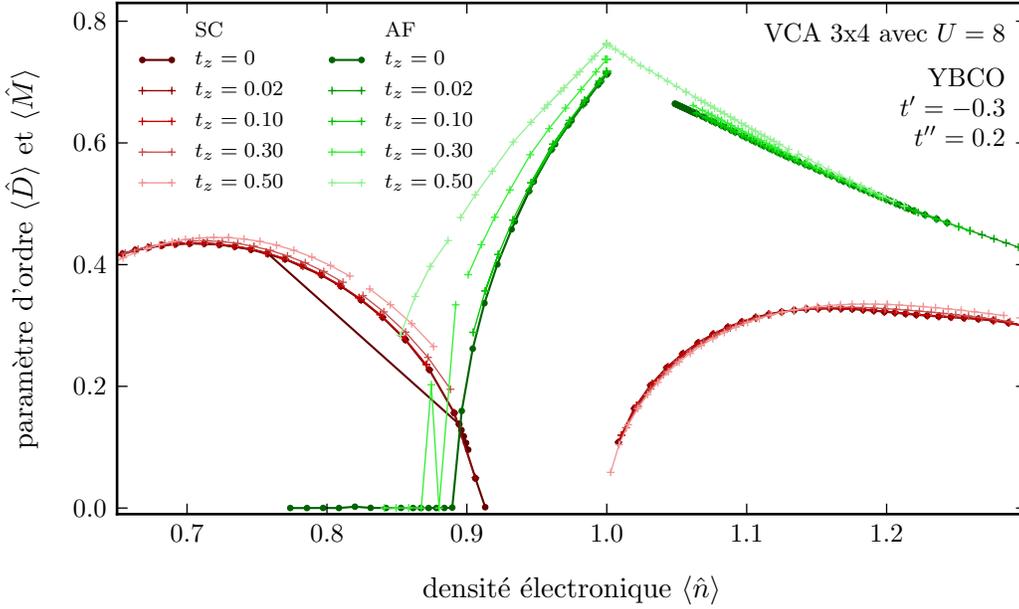


**Figure 4.3** Pour les paramètres de bandes génériques YBCO (2.9), le diagramme de phases en VCA 2x2 montre que les résultats pour un saut interplan  $t_z = 0.02$ ,  $t_z = 0.1$  et  $t_z = 0.3$  sont superposés aux résultats 2D. À  $t_z = 0.5$ , du côté des dopés aux trous le paramètre d'ordre antiferromagnétique est renforcé.

(dopée aux trous) du diagramme de phases, révélant une asymétrie particule-trou dans l'effet de  $t_z$ .

La figure 4.4 montre la même chose en VCA 4x3, avec un effet légèrement accentué. Les calculs sont aussi ceux du stagiaire Charles Pichette pour  $U=8$ . Les valeurs solutions pour les paramètres variationnels  $\mu_1$  et  $M_1$  et  $D_1$  se retrouvent aux figures A.7, A.8 et A.9 de l'annexe A.5. Encore une fois, les valeurs de saut en  $z$  réalistes, 0.02 et de 0.1 n'induisent pas de différence dans les résultats, mais on voit cette fois-ci que les sauts interplans exagérés de 0.3 ainsi que de 0.5 renforcent l'antiferromagnétisme dans la partie  $\langle \hat{n} \rangle < 1$  (dopée aux trous) du diagramme de phase. Il y a donc une asymétrie particule-trou dans l'effet de  $t_z$ .

La figure 4.5 montre aussi les résultats pour les paramètres de bandes du YBCO, avec la même variation dans  $t_z$ , mais en CDMFT avec l'amas 2x2. Toujours avec l'interaction  $U = 8$ , c'est cependant le bain, cette fois-ci, qui contient les paramètres à faire converger :  $e_{b_1}$ ,  $e_{b_2}$ ,  $t_{b_1}$  et  $t_{b_2}$  comme paramètres normaux, avec en plus  $e_{bAF_1}$ ,  $e_{bAF_2}$ ,  $t_{bAF_1}$ ,  $t_{bAF_2}$  dans le cas AF ou avec  $d_{s_1}$  et  $d_{s_2}$  dans le cas SC. Leurs valeurs finales sont affichées dans les figures A.10, A.11 et A.12 de l'annexe A.5. On remarque

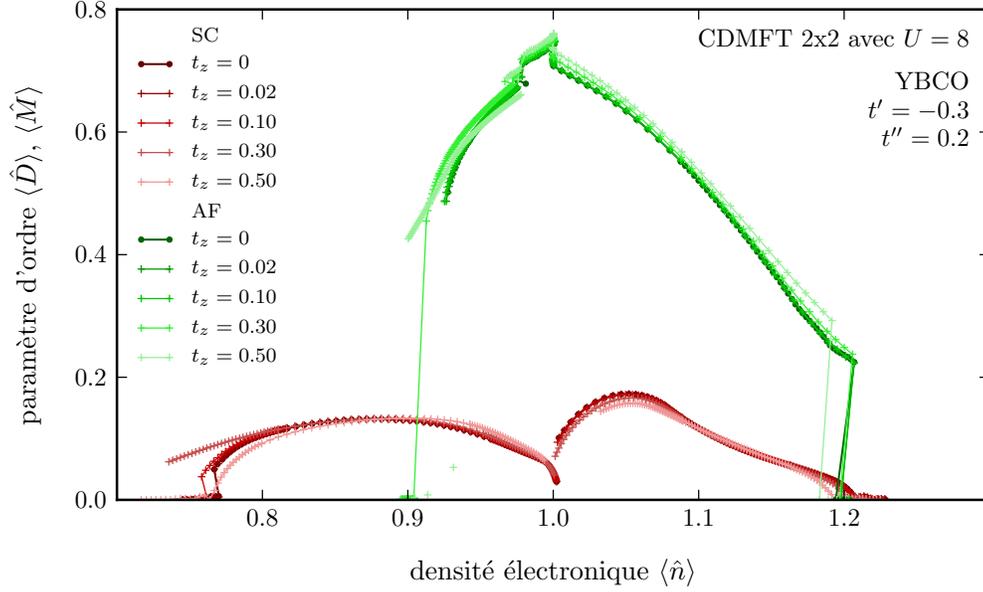


**Figure 4.4** Pour les paramètres de bandes génériques YBCO (2.9), le diagramme de phases en VCA 4x3 montre que les résultats pour un saut interplan  $t_z = 0.02$  et  $t_z = 0.1$  sont parfaitement superposés aux résultats 2D. Lorsque  $t_z$  atteint 0.3 et 0.5 la seule différence a lieu du côté des dopés aux trous, où le paramètre d'ordre antiferromagnétique est renforcé.

que dans ce cas-ci, l'ajout d'un  $t_z$ , même artificiellement élevé, n'influence pas les résultats près du demi remplissage. Les différences quantitatives des courbes pour  $t_z = 0.3$  et  $t_z = 0.5$  sont insignifiantes pour la précision de la méthode et les courbes pour  $t_z = 0.02$  et  $t_z = 0.1$  sont pratiquement superposées aux résultats 2D. Loin du demi remplissage, notamment autour de  $\langle \hat{n} \rangle = 0.75$ , on observe que  $t_z$  semble prolonger le domaine du paramètre d'ordre supraconducteur, mais la méthode a peu de validité dans cette région parce qu'un grand changement dans le nombre d'électrons n'est pas adéquatement modélisé pour un petit amas où le nombre d'électrons doit demeurer entier.

### 4.2.3 Discussion

Des petites valeurs pour  $t_z$ , comme celles prédites par les calculs de DFT, n'ont pas donné d'effet sur le diagramme de phases à température nulle. Cette observation est valide en VCA avec amas 2x2 et 4x3 ou en CDMFT avec amas 2x2, pour des



**Figure 4.5** Diagrammes de phase du YBCO génériques (2.9) montrant qu'un  $t_z$  artificiel variant de 0.02 à 0.5 n'a pas d'impact sur les résultats qualitatifs en CDMFT 2x2.

amas qui sont toujours bidimensionnels. Pour des valeurs artificiellement élevées, cependant, des effets légers ont été remarqués, du côté des dopés aux trous seulement, qui consistaient surtout en un renforcement du paramètre d'ordre antiferromagnétique en VCA.

Le fait que même avec  $t_z$  artificiellement élevé à 0.5 ne donne pas d'effet devrait laisser le lecteur perplexe. En effet, celui-ci correspond à la moitié de la limite tridimensionnelle ( $t_z = 1$ ) et on ne perd aucune propriété du modèle associée aux cuprates. Autant dire qu'on pourrait avoir des cuprates tridimensionnels. Mentionnons donc certains problèmes de notre modélisation qui pourraient être à blâmer.

La première limitation est que le paramètre d'ordre à température nulle n'est probablement pas directement lié à la température critique. C'est-à-dire que les effets tridimensionnels ont peut-être un effet notable à température finie qu'on ne pouvait pas mesurer dans ce projet.

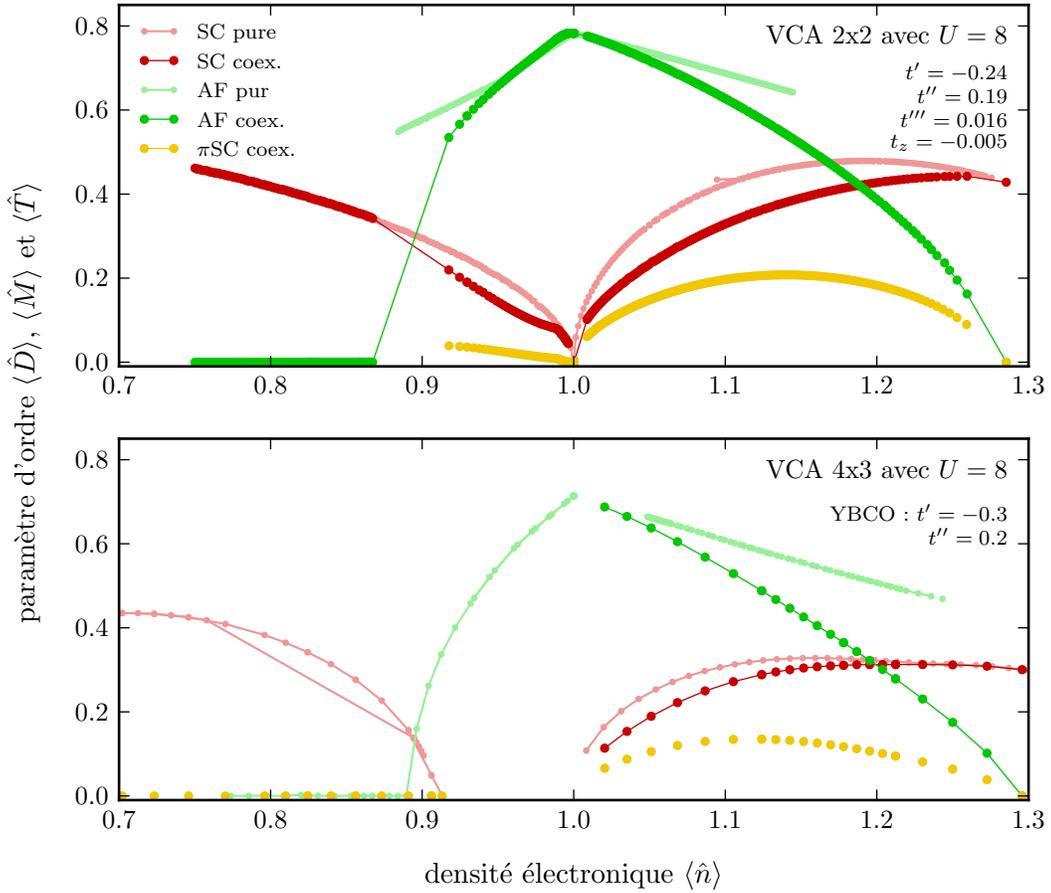
La deuxième limitation est que nos amas sont purement bidimensionnels. Puisque le rôle de l'amas est de fournir la partie de la solution venant des interactions, un amas bidimensionnel ne permet pas de retrouver complètement l'effet des corrélations électroniques entre les plans. Cela fait en sorte que, physiquement, seule la partie non

interagissante de notre modèle est correctement étendue hors du plan, par la relation d'auto-cohérence. De plus, puisque l'antiferromagnétisme et la supraconductivité sont des effets venant des interactions, il n'est pas surprenant qu'ils soient moins affectés par les sauts interplans. Il faudrait utiliser des amas en 3D pour régler le problème. Notons toutefois que la taille limitée des amas (pas plus de 16 sites incluant les bains) restreint beaucoup les possibilités. Nommons en tout de même certaines. Premièrement, il serait possible de travailler avec un amas  $2 \times 2 \times 2$  en VCA. Certains tests préliminaires furent faits dans cette direction mais ils n'ont rien donné de significatif. Deuxièmement, en CDMFT, il serait possible de mettre l'amas  $2 \times 2$  dans le plan  $xz$  plutôt que  $xy$ . Cette approche n'a pas été tentée, il serait intéressant de lancer des tests dans un futur proche.

La troisième limitation est la taille de l'amas, un problème récurrent dans les calculs de diagonalisation exacte. Comme on le voit en VCA  $4 \times 3$  par rapport à la VCA  $2 \times 2$ , les effets de la 3e dimension sont accentués lorsqu'on agrandit l'amas. Il est donc possible que des amas plus grands donnent des résultats plus intéressants sur les effets tridimensionnels dans les cuprates, mais malheureusement, les capacités de calcul devront évoluer beaucoup pour donner suite à cette hypothèse.

La dernière limitation est le caractère homogène du couplage interplan. Puisqu'un effet important dont on cherchait la source est la corrélation entre la  $T_c$  et le nombre de plans  $\text{CuO}_2$  dans la maille élémentaire, il aurait fallu construire un modèle dans lequel les plans sont groupés, comme pour les véritables cristaux.

À cause de cette dernière limitation, on peut dire que notre modèle s'apparente plus aux composés à empilement infini de plans (voir section 1.1.4) qu'aux autres cuprates. Les paramètres de bande utilisés ne sont pas ceux des composés à empilement infini, mais on pourrait tout de même s'attendre à une modulation du paramètre d'ordre due à  $t_z$ , à cause des corrélations observées dans ces matériaux pour  $T_c$ . Or il n'y en a pas, et si on suppose que ce n'est pas dû aux précédents problèmes de notre méthode, on doit identifier une cause physique. On sait que la variation du paramètre  $c$  associée au changement de  $T_c$  s'accompagne d'autres effets, notamment une réduction en oxygène, et aussi un rapprochement des atomes dopants. La modulation en  $T_c$  pourrait donc être liée à des facteurs indirects, comme un changement du dopage effectif dans le plan ou encore une modification de  $U$  par la proximité des oxygènes apicaux [22, 29] puisque les résultats présentés précédemment portent à croire que ce n'est pas le couplage interplan seul qui est responsable du changement de la robustesse de la supraconductivité.

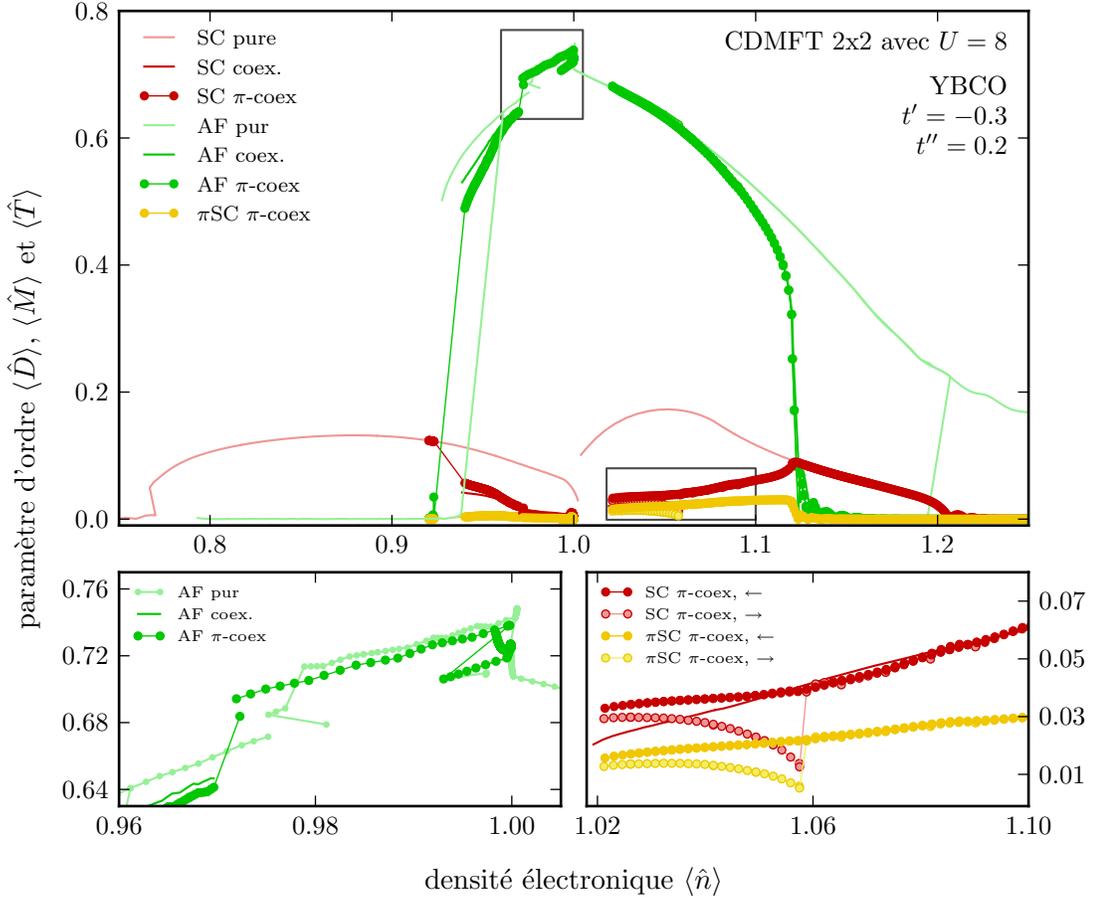


**Figure 4.6** Pour les paramètres du YBCO, les calculs de VCA 2x2 et 4x3 montrent l'existence du paramètre d'ordre  $\langle \hat{T} \rangle$  lorsque les champs de Weiss pour les paramètres d'ordre  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  sont présents. On remarque d'ailleurs que ces derniers sont affaiblis par leur coexistence. La légende est valide pour les deux figures.

## 4.3 Résultats pour l'objectif II : coexistence

### 4.3.1 Coexistence entre $d$ SC, AF et $\pi$ SC

En VCA 2x2 et en VCA 4x3 pour le YBCO, on a laissé coexister les champs de Weiss pour les paramètres d'ordre antiferromagnétique  $\langle \hat{M} \rangle$  et supraconducteur  $\langle \hat{D} \rangle$ . Les résultats sont à la figure 4.6 et les calculs ont été réalisés par le stagiaire Charles Pichette. Pour le paramètre d'ordre supraconducteur en triplet  $\langle \hat{T} \rangle$ , on a calculé sa valeur moyenne sans qu'un champ de Weiss ne favorise son apparition. Les



**Figure 4.7** Pour les paramètres de bande du YBCO, les calculs de CDMFT 2x2 montrent que la coexistence de  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  (AF coex et SC coex) fait diminuer leur valeur par rapport à leur solution pure. En ajoutant la possibilité pour le triplet (calculs  $\pi$ -coex) on confirme l'apparition de  $\langle \hat{T} \rangle$  ( $\pi$ SC). Notons que les courbes pour SC coex et SC  $\pi$ -coex sont pratiquement superposées. Les deux sous-figures correspondent aux zones encadrées qui ont été agrandies pour montrer que les solutions semblent instables. voir le corps du texte.

valeurs des paramètres variationnels sont à l'annexe A.5 aux figures A.14 et A.15. Comme prédit par les travaux de champ moyen [35], le triplet apparaît sans qu'il soit nécessaire de le forcer. On remarque aussi que sa valeur est plus élevée du côté des dopés aux électrons que du côté des dopés aux trous. Les paramètres d'ordre  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  sont tous deux affectés à la baisse, montrant donc qu'ils sont en compétition.

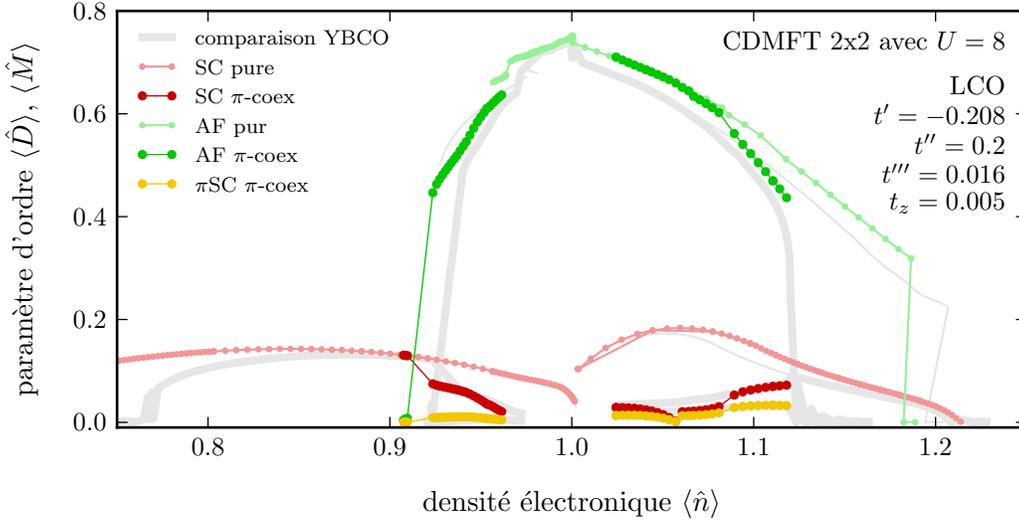
En CDMFT 2x2, toujours pour YBCO, on a calculé le diagramme de phases pour un amas incluant tous les paramètres de bain, y compris ceux favorisant  $\langle \hat{T} \rangle$ . On compare les résultats sont à la figure 4.7 et il s'agit du diagramme de phase

le plus détaillé du projet. Certaines zones encadrées sont agrandies pour y voir les détails. Les paramètres de bords convergés sont présentés aux figures A.16, à A.28. Tout d’abord, on voit dans la figure 4.7 qu’encore une fois, la coexistence abaisse les valeurs de l’antiferromagnétisme  $\langle \hat{M} \rangle$  et de la supraconductivité  $\langle \hat{D} \rangle$  comme pour une compétition. L’effet est plus grand lorsqu’on s’éloigne du demi remplissage. L’existence de la supraconductivité triplet  $\langle \hat{T} \rangle$  est confirmée par les résultats, mais ne semble pas jouer un rôle dans cette compétition car les résultats avec et sans le triplet sont presque parfaitement superposés. Enfin, il semble y avoir des instabilités dans les solutions, et elles ont été agrandies pour en voir les détails.

La première zone d’instabilité réside dans la zone sous-dopée aux trous et affecte le paramètre d’ordre antiferromagnétique. On l’a agrandi dans la sous-figure de gauche. À cet endroit, le comportement de  $\langle \hat{M} \rangle$  semble assez chaotique pour discréditer les résultats, mais ceux-ci furent répétitivement obtenus avec différents points de départ (6 essais pour cette figure) et pour d’autres paramètres de bande (figure 4.8), et le même comportement existe dans tous les résultats 3D (figure 4.5). La solution à  $\mu \lesssim 1$  semble s’arrêter brusquement à  $\mu = 0.97$  et on trouve alors une autre solution, déconnectée de la précédente, plus basse, qui se prolonge jusqu’à  $\langle \hat{n} \rangle = 0.94$ . Il y a donc deux solutions indépendantes, séparées, qui donnent toutes les deux lieu à des paramètres d’ordre  $\langle \hat{M} \rangle$ ,  $\langle \hat{D} \rangle$  et  $\langle \hat{T} \rangle$  non-nuls. Ensuite, un changement de phase de premier ordre (chute brusque de  $\langle \hat{M} \rangle$ ) nous amène à l’état supraconducteur. Nous en discutons davantage à la section 4.3.3.

La deuxième zone d’instabilité réside dans le secteur sous-dopé aux électrons et affecte davantage les paramètres  $\langle \hat{D} \rangle$  et  $\langle \hat{T} \rangle$ . On l’a agrandie dans la sous-figure de droite. Le phénomène est plus simple, il s’agit d’hystérèse entre deux solutions se chevauchant. En partant du demi remplissage, les paramètres  $\langle \hat{T} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  diminuent, ce qui favorise momentanément  $\langle \hat{M} \rangle$ , avant de sauter brusquement vers la solution plus élevée pour  $\langle \hat{T} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$ , rabaisant alors  $\langle \hat{M} \rangle$ . À l’opposé, en partant loin du demi remplissage, la boucle retombe systématiquement sur la solution la plus élevée pour  $\langle \hat{T} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$ . Enfin, la solution la plus stable semble être celle qui part de la gauche et qui défavorise  $\langle \hat{T} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  au profit de  $\langle \hat{M} \rangle$ , puisque 3 points de départ indépendants des boucles de calculs ont convergé sur cette solution.

Finalement, on a aussi calculé le diagramme de phases pour les paramètres du LCO, visible à la figure 4.8. Ce dernier inclut le faible saut interplan  $t_z = 0.005$ , dont les effets peuvent être négligés conformément aux conclusions de la section 4.2. Qualitativement, le diagramme est équivalent à celui de la figure 4.12. Cela montre que



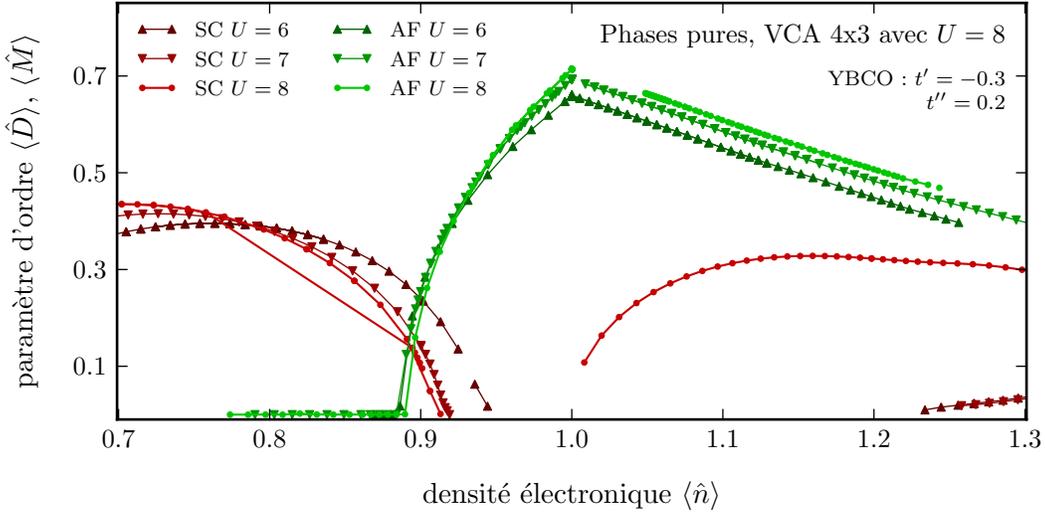
**Figure 4.8** Diagramme équivalent à celui de la figure 4.7, mais pour les paramètres de bandes LCO. CDMFT 2x2, coexistence de  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  et  $\langle \hat{T} \rangle$

les résultats sont reproductibles pour d'autres paramètres de bandes. Les différences quantitatives sont trop spécifiques pour en tirer des conclusions.

### 4.3.2 Variation de $U$

La figure 4.9 montre les résultats de la VCA 4x3 sans coexistence avec le paramètre  $U$  variant de 6 à 8. Les calculs sont ceux du stagiaire Charles Pichette et les valeurs des paramètres variationnels  $\mu_1$ ,  $M_1$  et  $D_1$  se retrouvent à la figure A.30. Il est connu que le changement de  $U$  a moins d'impact en VCA qu'en CDMFT et on peut le voir dans ces résultats, où on remarque que le paramètre d'ordre antiferromagnétique ne change pas beaucoup d'une valeur de  $U$  à l'autre. Du côté des dopés aux trous, on remarque que le paramètre d'ordre supraconducteur s'éloigne du demi remplissage avec l'augmentation de  $U$ . Du côté des dopés aux électrons, le comportement est étrange et la supraconductivité n'apparaît que loin du demi-remplissage pour  $U = 6$  et  $U = 7$ . Cette dernière observation est unique au cas de la VCA 4x3 et nous n'en tirerons donc pas de conclusions.

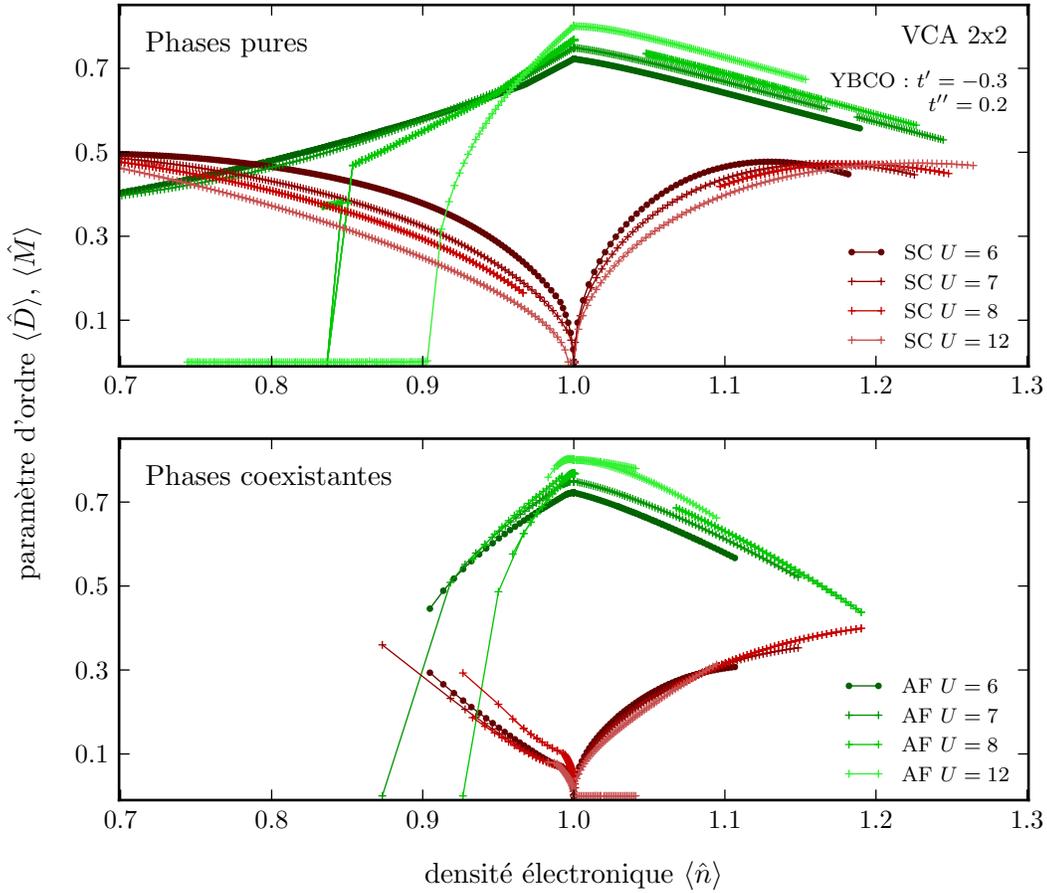
La figure 4.10 montre, elle, des résultats avec  $U$  variant de 6 à 12 en VCA et cette fois les calculs sont pour l'amas 2x2. On a aussi calculé le diagramme pour  $U = 12$ , et pour les phases coexistantes. Les calculs sont encore ceux de Charles Pichette, et



**Figure 4.9** Changement du diagramme de phase en fonction de  $U$  pour les valeurs de  $U=6,7$  et  $8$  en VCA  $4 \times 3$  pour les paramètres du YBCO. Phases pures seulement pour  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$ .

les valeurs des paramètres variationnels  $\mu_1$ ,  $M_1$  et  $D_1$  se retrouvent à la figure A.29 et. Le changement de  $U$  a ici un effet remarquable, celui de modifier la transition antiferromagnétique du côté des dopés aux trous. En effet, le paramètre d'ordre qui s'éloignait sans s'éteindre pour  $U = 6$  et  $U = 7$  s'éteint en une transition de premier ordre pour  $U = 8$ , qui devient une transition de deuxième ordre à  $U = 12$ . À cette dernière valeur de  $U$ , l'allure du paramètre d'ordre antiferromagnétique ressemble d'ailleurs beaucoup à celle pour l'amas  $4 \times 3$  (figure 4.9). Sinon, l'augmentation de  $U$  semble renforcer le paramètre d'ordre antiferromagnétique alors qu'il affaiblit le paramètre d'ordre supraconducteur, un effet qui semble toutefois moins marqué pour le cas où les phases coexistent.

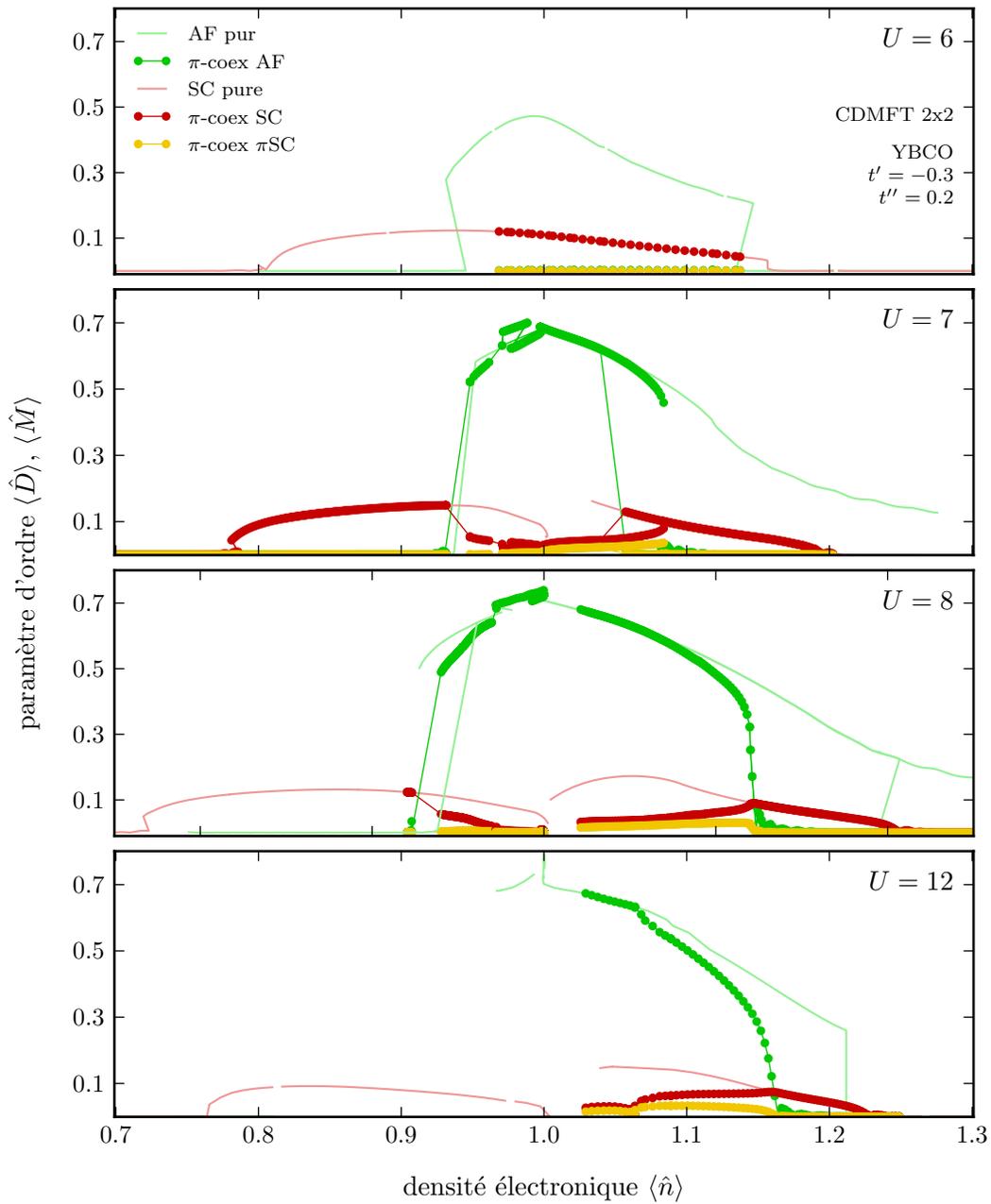
La figure 4.11 montre les résultats pour  $U$  qui varie de 6 à 12 en CDMFT  $2 \times 2$  avec les phases pures et coexistantes pour les paramètres de bande du YBCO. Les calculs pour le cas  $U = 7$  sont ceux de Charles Pichette et les valeurs obtenues pour les paramètres de bain se retrouvent aux figures A.16, à A.28. On remarquera tout d'abord que le cas  $U = 8$  est le même qu'à la figure 4.7 et le cas  $U = 7$  présente plusieurs particularités qu'on présente dans les agrandissement de la figure 4.12. Enfin, remarquons qu'avec  $U = 6$ , la supraconductivité ne s'annule pas au demi-remplissage car cette valeur pour l'interaction ne génère pas de gap de Mott. On peut le voir dans la relation de  $\langle \hat{n} \rangle$  en fonction de  $\mu$  (figure A.16), où il n'y a pas de plateau de Mott.



**Figure 4.10** Changement du diagramme de phase en fonction de  $U$  pour les valeurs de  $U=6, 7, 8$  et  $12$  en VCA  $2 \times 2$  pour les paramètres du YBCO. Solutions pures en haut et solution en coexistence de  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  seulement en bas ( $\langle \hat{T} \rangle$  n'a pas été calculé). Chacune des légendes s'applique aux deux graphiques.

Pour les effets de la variation de  $U$  en CDMFT, commençons par regarder la supraconductivité pure. On voit qu'avec l'augmentation de  $U$ , le domaine d'existence de la SC pure s'élargit progressivement, avec une largeur maximale à  $U = 8$  et en même temps, le paramètre d'ordre s'affaiblit. Du point de vue qualitatif, le comportement est le même d'un  $U$  à l'autre, sauf pour  $U = 6$  lorsque la phase ne s'annule pas à  $\langle \hat{n} \rangle = 1$ .

Plutôt que de s'affaiblir comme la supraconductivité, l'antiferromagnétisme gagne en force avec l'augmentation de  $U$ . D'abord très faible à  $U = 6$ , son domaine s'élargit ensuite et la valeur de son paramètre d'ordre augmente. Cette tendance ne tient pas pour  $U = 12$ , cependant, et on peut voir que du côté des dopés aux trous, le paramètre



**Figure 4.11** Changement du diagramme de phases en fonction de  $U$  pour les valeurs de  $U=6,7,8$  et  $12$  en CDMFT 2x2 pour les paramètres du YBCO avec la coexistence de  $\langle \hat{M} \rangle$  et  $\langle \hat{D} \rangle$  et  $\langle \hat{T} \rangle$ . Le cas  $U = 7$  est agrandi à la figure 4.12

d'ordre qui existe pour  $\langle \hat{n} \rangle < 0.97$  à  $U = 7$  et  $U = 8$  fut impossible à trouver pour  $U = 12$ , malgré plusieurs essais. Cela entraîne d'ailleurs la disparition de la zone de coexistence.

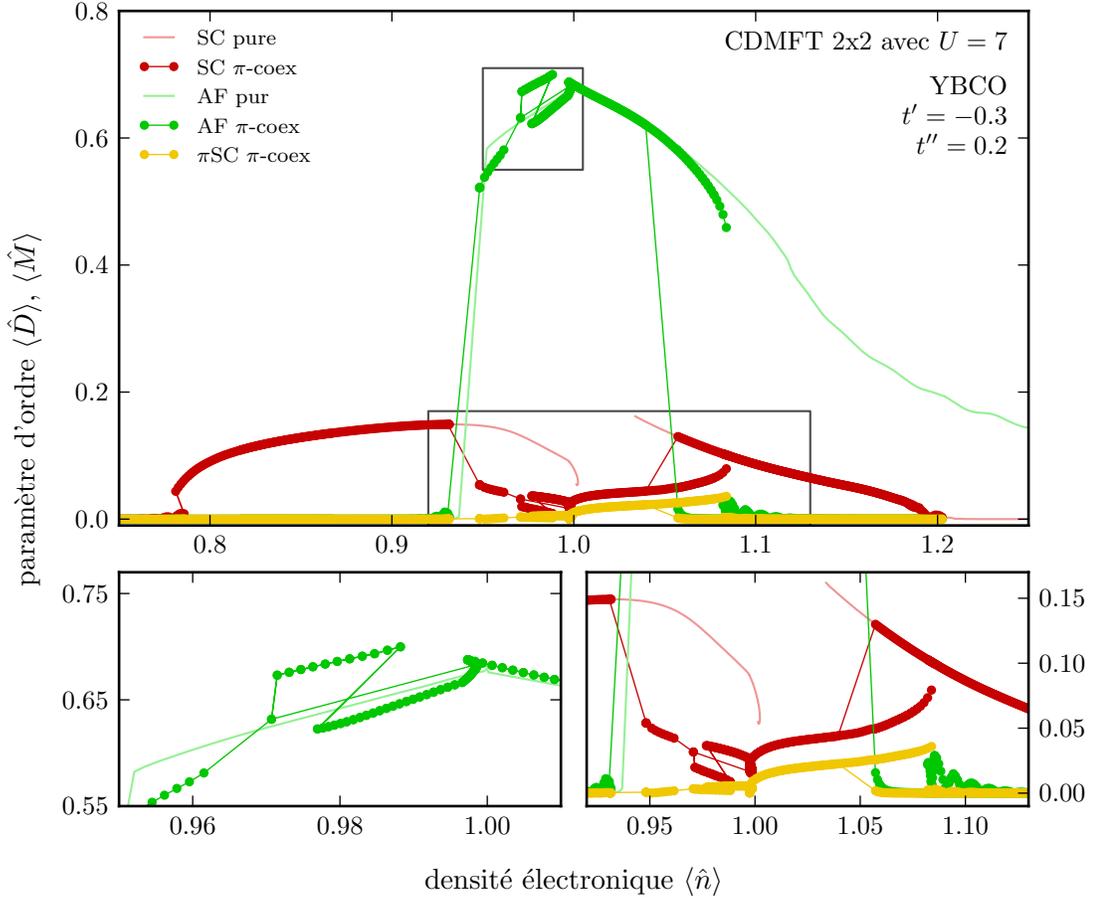
Notons maintenant les particularités des solutions en coexistence et nous discuterons des implications dans la section suivante. D'abord, le comportement à  $U = 6$  est très différent de celui pour les autres valeurs de  $U$ . La phase supraconductrice est alors dominante et ne laisse pas l'antiferromagnétisme coexister. Le comportement pour  $U$  plus élevé dépend ensuite de quel côté du diagramme on regarde. Pour  $\langle \hat{n} \rangle < 1$ , du côté des dopés aux trous, en coexistence, la supraconductivité est affaiblie et l'antiferromagnétisme disparaît en une transition de premier ordre. On voit que les zones d'instabilités identifiées lors de l'analyse de la figure 4.7 plus tôt semblent changer beaucoup de  $U = 7$  à  $U = 8$  pour finalement complètement disparaître à  $U = 12$ , qui ne présente d'ailleurs aucune coexistence. Pour  $\langle \hat{n} \rangle > 1$ , du côté des dopés aux électrons, l'antiferromagnétisme s'éteint dans une transition de premier ordre très claire à  $U = 7$ . On peut d'ailleurs voir l'hystérèse associée à celle-ci, car deux solutions différentes existent à la transition, une pour  $\langle \hat{n} \rangle$  croissant et l'autre pour  $\langle \hat{n} \rangle$  décroissant (voir figure 4.12). Pour  $U = 8$  cette transition passe au deuxième ordre : il n'y a plus d'hystérèse et le paramètre d'ordre s'éteint progressivement. Ce comportement est aussi visible à  $U = 12$  qui, pour finir, présente la solution de coexistence qu'on avait identifiée du côté des dopés aux électrons, près du demi-remplissage à la figure 4.7. C'est en fait un affaiblissement de la supraconductivité qui change brusquement en un affaiblissement de l'antiferromagnétisme.

À la figure 4.12, le diagramme pour  $U = 7$  est mis en évidence pour montrer qu'il présente les mêmes zones d'instabilités que celles identifiées pour  $U = 8$ , mais que celles-ci sont plus accentuées.

### 4.3.3 Discussion

De toute évidence, étant donné que les paramètres d'ordre supraconducteur  $\langle \hat{D} \rangle$  et antiferromagnétique  $\langle \hat{M} \rangle$  sont toujours affectés à la baisse lorsqu'on les laisse coexister, on peut affirmer que l'antiferromagnétisme et la supraconductivité sont en compétition dans le modèle de Hubbard. Cela confirme les connaissances qu'on avait du phénomène et apporte un soutien de plus aux hypothèses comme celle de Sachdev.

En VCA 2x2 ainsi qu'en CDMFT avec  $U=8$  et  $U=12$ , la coexistence fait changer la transition de phase magnétique du côté des dopés aux électrons, causant une asymétrie de plus dans les résultats. Du côté des dopés aux trous, c'est-à-dire pour  $\langle \hat{n} \rangle < 1$ , le paramètre d'ordre antiferromagnétique,  $\langle \hat{M} \rangle$ , s'éteint de façon discontinue

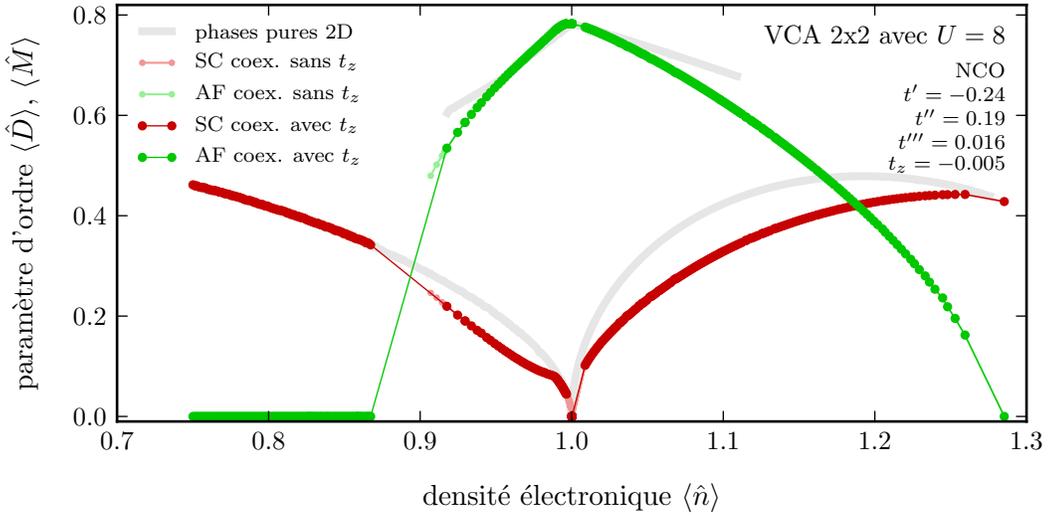


**Figure 4.12** Diagramme équivalent à celui de la figure 4.12, mais pour  $U=7$ . L'accent est mis sur les zone d'instabilités, plus prononcées qu'à  $U = 8$ .

en fonction du dopage, dans une transition de premier ordre. Par opposition, du côté des dopés aux électrons, avec  $\langle \hat{n} \rangle > 1$ , la coexistence de phases ainsi que l'action d'un  $U$  élevé font changer la transition en une transition de deuxième ordre, c'est à dire que  $\langle \hat{M} \rangle$  s'éteint de façon progressive jusqu'à 0. Il s'agit donc d'un effet exclusif de la coexistence montrant que l'antiferromagnétisme est plus fortement affecté par sa compétition avec la supraconductivité du côté des dopés aux électrons. Ces résultats donnent un nouveau point de vue sur des résultats de Capone et Kotliar, [34], où on n'incluait pas les sauts  $t'$  et  $t''$ , empêchant donc de voir les différences du côté des dopés aux électrons. Dans ces travaux, on avait conclu que l'antiferromagnétisme était robuste à la compétition, alors qu'on voit ici que ça ne semble pas tenir. Enfin, en VCA 4x3, les deux transitions deviennent continues et il est donc possible que le comportement soit aussi lié à la taille de l'amas. L'ordre de la transition est difficile

à vérifier expérimentalement car il faudrait changer le dopage de manière continue comme on le fait ici.

Enfin, du côté des dopés aux trous en CDMFT, on a remarqué que certaines instabilités pour  $U = 7$  et  $U = 8$  précèdent la disparition de la coexistence pour  $U = 12$ . Ces instabilités ont la forme de discontinuités dans le paramètre d'ordre qu'on retrouve environ à  $\langle \hat{n} \rangle = 0.97$ , c'est-à-dire près du dopage où s'éteint l'antiferromagnétisme dans les données expérimentales. Ces discontinuités pourraient donc être des traces d'un changement de phase magnétique du modèle qu'on ne peut pas voir avec les méthodes utilisées. Par exemple, il est impossible de mesurer des ondes de densité de charge ou de spin incommensurables, mais cela n'empêche pas celles-ci d'exister dans les véritables solutions du modèle. Si l'hamiltonien de Hubbard représente bien les cuprates, on devrait voir ces phases se manifester aux endroits où elles sont mesurées expérimentalement. Par exemple, la solution interprétée comme de l'antiferromagnétisme entre  $\langle \hat{n} \rangle = 0.93$  et  $\langle \hat{n} \rangle = 0.97$  dans nos résultats rappelle la position de la transition pseudogap dans les expériences. Cela suggère que la CDMFT 2x2 capte peut-être une partie de la physique responsable du pseudogap mais que l'approximation est trop grossière, et cette physique se manifeste donc par l'apparition d'antiferromagnétisme plus éloigné du demi remplissage. Si c'est le cas, cela veut dire que le modèle de Hubbard complet est encore plus proche des cuprates que le suggère nos résultats. On ne voit pas ces instabilités en VCA, laissant croire qu'elles apparaissent grâce aux degrés de liberté plus nombreux en CDMFT. On apportera d'autres observations allant dans ce sens à la section 4.4.2.



**Figure 4.13** CDMFT 2x2 pour YBCO incluant  $t_z$  et la coexistence de phase

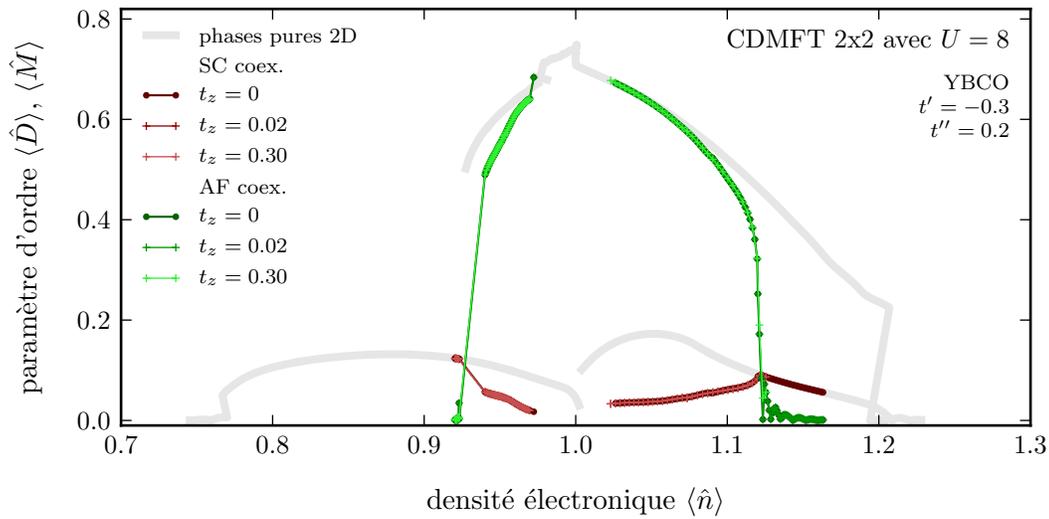
## 4.4 Observations supplémentaires

### 4.4.1 Coexistence et sauts interplans

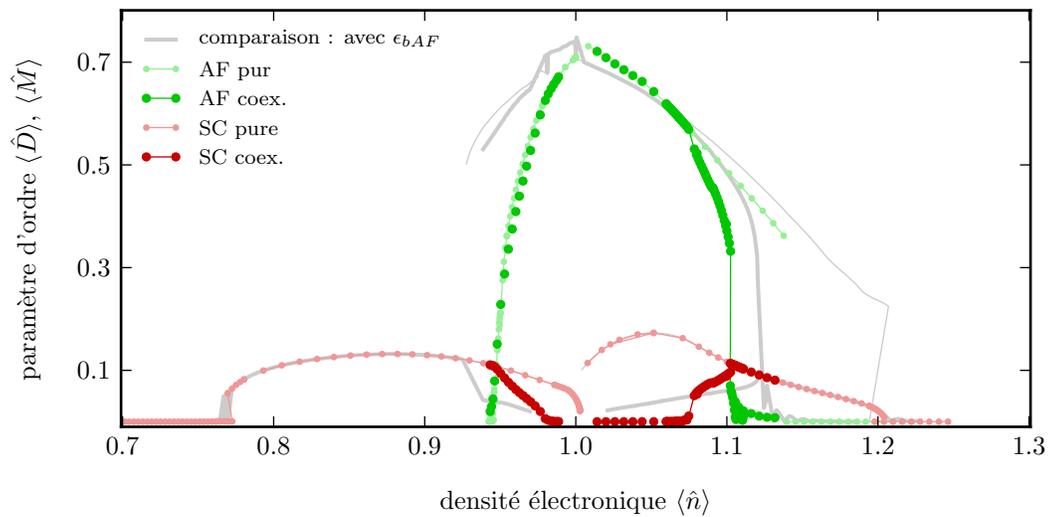
Après avoir obtenu les résultats indépendamment pour l'effet des sauts interplans et l'effet de la coexistence, il est naturel de se demander si les  $t_z$  se manifestent lors de la coexistence. Les figures 4.13 et 4.14 montrent que ceux-ci n'ont pas plus d'effet que dans le cas des phases pures. En un premier temps on montre les résultats de la VCA 2x2 pour les paramètres réalistes du NCO et dans un deuxième temps ceux pour le YBCO avec des  $t_z$  artificiels. Les paramètres variationnels convergés sont les même que dans le cas 2D, aux figures A.14 et A.16 à A.28.

### 4.4.2 Effet des énergies de bains AF

Les figures 4.15 et 4.16 montrent des résultats de CDMFT avec  $U = 8$  qu'on avait d'abord discrédités parce qu'ils leur manquaient les paramètres de bain  $e_{b_{AF}}$ . En principe, des degrés de liberté en moins devraient diminuer la validité des résultats. La figure 4.15 est pour le YBCO et la figure 4.16 pour le LCO. Les paramètres convergés sont aux figures A.31 à A.33 de l'annexe A.5.

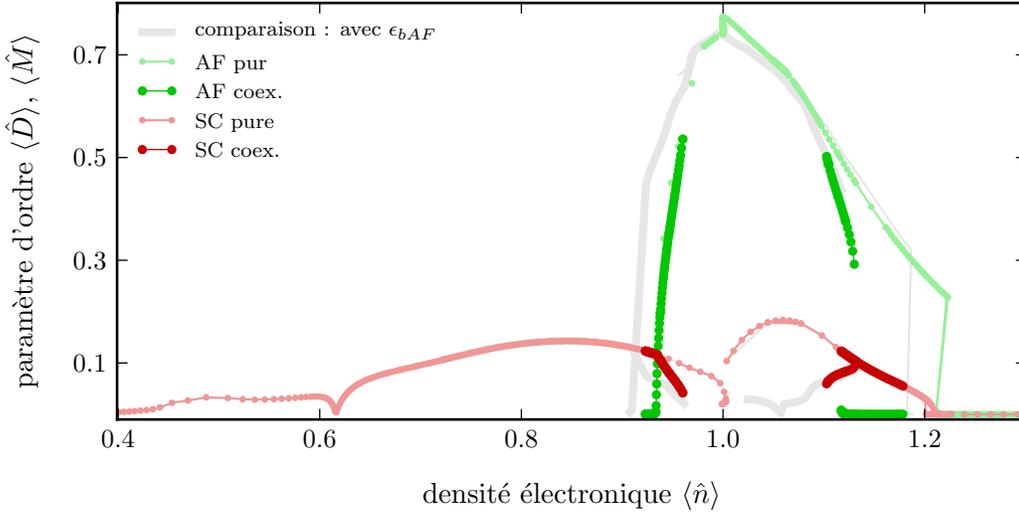


**Figure 4.14** VCA 2x2 pour YBCO incluant  $t_z$  et la coexistence de phase



**Figure 4.15** CDMFT 2x2 pour YBCO sans les  $e_{bAF}$

On ajoute ces résultats parce qu'ils montrent bien l'impact que peut avoir un paramètre de bain supplémentaire dans la méthode. On voit ici les changements de phases de l'antiferromagnétique radicalement modifiées. Dans les résultats précédents, la transition du côté des dopés aux trous était de premier ordre et celle du côté des dopés aux électrons à  $U = 8$  était de deuxième ordre. Dans le cas présent, sans les  $e_{bAF}$ , c'est exactement le contraire, la transition du côté des dopés aux trous est de



**Figure 4.16** CDMFT 2x2 pour LCO sans les  $e_{b_{AF}}$

second ordre et celle du côté des dopés aux électrons est du premier ordre. De plus, l'antiferromagnétisme offre ici une compétition plus féroce à la supraconductivité, qui ne subsiste pas jusqu'au demi-remplissage. Cet impact est plutôt grave et montre l'importance d'avoir de nombreux paramètres de bain. On voit aussi que la CDMFT permet d'explorer un éventail important de résultats pour des différences minimales dans le système de référence.

Dans cet ordre d'idée, on peut faire suite à l'analyse des instabilités trouvées dans la section 4.3.1. En effet, on voit que sans les  $e_{b_{AF}}$ , la solution ne comporte pas les instabilités. Cela appuie l'interprétation qu'on en faisait comme étant des traces d'une solution plus complète du modèle. Si c'est le cas, on peut ajouter l'observation suivante : pour le côté des dopés aux trous, le diagramme de phase obtenu avec les  $e_{b_{AF}}$  (figure 4.7) satisfait davantage aux attentes venant des résultats expérimentaux, grâce aux instabilités qu'on interprète comme des traces de phases magnétiques, que celui sans les  $e_{b_{AF}}$  (4.15). Cependant, pour le côté des dopés aux électrons, c'est l'inverse, notamment parce que la supraconductivité en coexistence avec l'antiferromagnétisme sans  $e_{b_{AF}}$  se manifeste plus loin du demi-remplissage. Comme question d'ouverture, on pourrait donc suggérer que l'asymétrie électron-trou observé expérimentalement requiert peut-être de laisser certaines différences dans les degrés de liberté du modèle théorique utilisé. Cela se traduirait ici par l'utilisation des paramètres de bain complet du côté des dopés aux trous et des paramètres incomplet (sans  $e_{b_{AF}}$ ) du côté des dopés aux électrons.

## Conclusion

Pour finir, rappelons que dans la recherche d'un modèle théorique pour expliquer les cuprates, on cherche fondamentalement à éliminer les mauvaises hypothèses et à faire briller celles qui sont bonnes. En ce sens, l'objectif du projet était de vérifier deux choses : premièrement la pertinence d'ajouter des considérations tridimensionnelles au modèle de Hubbard, et deuxièmement, l'importance de la compétition entre phases dans le diagramme. Avec ces objectifs, on doit évaluer la valeur théorique du modèle et non tenter de prédire les véritables propriétés des cuprates. Donc voici les conclusions de ce projet, ainsi que les directions naturelles qu'il faudrait choisir pour le poursuivre.

Pour les considérations tridimensionnelles, comme on l'a vu, les sauts interplans doivent être très faibles pour rester cohérents avec la théorie des bandes. Cela fait en sorte qu'il n'y a pratiquement aucun effet tridimensionnel dans nos résultats. Pour l'instant, cette conclusion est restreinte par les méthodes utilisées, soit en CDMFT et en VCA, sur de petits amas bidimensionnels, et sans l'effet de la température. Cependant, elle semble en contradiction avec les corrélations expérimentales montrant la température critique qui varie avec l'espacement interplan ou encore avec le nombre de plans par maille. Bref, il faudra confirmer nos résultats pour le modèle de Hubbard avec d'autres méthodes, mais dans l'éventualité où ils seraient confirmés, ils impliqueraient une de deux possibilités : soit le modèle de Hubbard ne contient pas les degrés de liberté nécessaires pour modéliser correctement la troisième dimension dans les cuprates, ou alors il faut que les corrélations expérimentales avec les paramètres en  $z$  viennent d'une source indirecte, par exemple, le changement du potentiel chimique effectif dans les plans  $\text{CuO}_2$ .

Pour ce qui est de la coexistence, il n'y a pas de doutes que les paramètres d'ordre choisis pour la supraconductivité et l'antiferromagnétisme sont en compétition. Cette compétition affecte d'ailleurs fortement les deux phases, surtout du côté aux électrons, où la transition antiferromagnétique pourrait bien être déplacée comme le propose

Sachdev. Ces changements de phase magnétiques sont d'ailleurs très sensibles à la méthode utilisée et à la taille de l'amas comme l'ont montré les résultats de VCA  $4 \times 3$  et ceux de CDMFT sans les énergies de bains magnétiques. Et finalement, on a vu que le paramètre d'ordre supraconducteur en triplet de spin apparaît bel et bien dans le système lorsque les deux autres coexistent.

Naturellement, certaines pistes restent inexplorées. Tout d'abord, il faudrait voir l'effet des sauts interplans dans des amas tridimensionnels. Cette tâche sera facile à accomplir en VCA, mais demandera plus d'ingéniosité en CDMFT, parce que le bain fait qu'on est déjà près du nombre maximum de site permis en diagonalisation exacte. Ensuite, à beaucoup plus long terme, il faudra faire des calculs à température finie pour voir si les sauts interplans ajoutent une sensibilité du paramètre d'ordre aux fluctuations thermique. Après ces deux vérifications, il sera possible de confirmer ou d'infirmer les résultats de ce projet. Enfin, en CDMFT, les résultats pour différents ensembles de paramètres de bains magnétiques montrent que le comportement des phases en coexistances est très sensibles aux degrés de liberté présents dans le système de référence utilisé. Il faudrait donc faire une étude plus systématique de ces paramètres pour tirer les tendances, car cela permettrait de parfaire notre compréhension du bain en CDMFT. Bref, il y a encore beaucoup à faire, mais nous avançons petit à petit vers une modélisation adéquate pour les cuprates. Ce n'est qu'une question de temps.

# Annexes

## A.1 Relation de dispersion de $H_K$

On substitue les opérateurs de création et d'annihilation transformés de Fourier :

$$c_i^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c^\dagger(\mathbf{k}) \quad c_i \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c(\mathbf{k}) \quad (\text{A.1})$$

dans l'Hamiltonien  $H_K$  avec le spin implicite.

$$H_K = - \sum_{i,j} t_{ij} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) \quad (\text{A.2})$$

$$= - \sum_{i,j} t_{ij} \left( \frac{1}{N} \left( \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c^\dagger(\mathbf{k}) \right) \left( \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} c(\mathbf{k}') \right) \right) \quad (\text{A.3})$$

$$+ \frac{1}{N} \left( \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} c^\dagger(\mathbf{k}) \right) \left( \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i} c(\mathbf{k}') \right) \quad (\text{A.4})$$

$$= - \sum_{i,j} t_{ij} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left( e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i)} \right) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}') \quad (\text{A.5})$$

On ne s'intéresse alors qu'à la distance intersite  $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i = \mathbf{s}$ . Puisqu'en général l'amplitude de saut ne dépend que de la distance on écrit  $t_{ij} = t_{|\mathbf{s}|}$  et pour ne pas compter deux fois les même saut, un facteur  $\frac{1}{2}$  est alors nécessaire.

$$= - \sum_{i,\mathbf{s},\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{t_{|\mathbf{s}|}}{2} \frac{1}{N} \left( e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - \mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}_i+\mathbf{s}))} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i+\mathbf{s}) - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i)} \right) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}') \quad (\text{A.6})$$

$$= - \sum_{\mathbf{s},\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{t_{|\mathbf{s}|}}{2} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_i} \left( e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{s}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} \right) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}') \quad (\text{A.7})$$

avec l'expression  $\delta_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_r e^{ir(k-k')}$  on a :

$$= - \sum_{s,k,k'} \frac{t_{|s|}}{2} \delta_{k,k'} \left( e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{s}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}} \right) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}') \quad (\text{A.8})$$

$$= - \sum_{s,k} t_{|s|} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \quad (\text{A.9})$$

$$= - \sum_{\mathbf{k}} \left( \sum_{\mathbf{s}} t_{|s|} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \right) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \quad (\text{A.10})$$

On finit donc avec :

$$\hat{H}_K = - \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c^\dagger(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}) \quad (\text{A.11})$$

Où on a définit :

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\mathbf{s}} t_{|s|} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}) \quad (\text{A.12})$$

## A.2 Transformées de Fourier de $\hat{M}$ et $\hat{D}$

On substitue les opérateurs création et annihilation transformée de Fourier dans les opérateurs  $\hat{M}$  et  $\hat{D}$ , comme on l'a fait pour  $\hat{H}_K$  à l'annexe A.1.

### Paramètre antiferromagnétique $\hat{M}$

Avec (A.1) dans le paramètre d'ordre antiferromagnétique :

$$\hat{M}_{\mathbf{Q}} \equiv \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (\text{A.13})$$

$$= \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \right) \quad (\text{A.14})$$

$$= \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \frac{1}{N} \left( \left( \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \left( \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \right) - \left( \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \left( \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'\downarrow} \right) \right) \quad (\text{A.15})$$

$$= \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{r}_i \cdot (\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} \right) \quad (\text{A.16})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\mathbf{r}_i \cdot (\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{Q})} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} \right) \quad (\text{A.17})$$

avec l'expression  $\delta_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_r e^{-ir(k-k')}$  on a :

$$= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} \right) \quad (\text{A.18})$$

d'où finalement :

$$\hat{M}_{\mathbf{Q}} = \sum_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{(\mathbf{k}+\mathbf{Q})\downarrow} \right) \quad (\text{A.19})$$

### Paramètre supraconducteur $\hat{D}$

Avec (A.1) dans le paramètre d'ordre supraconducteur :

$$\hat{D} \equiv \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right) + c.h. \quad (\text{A.20})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( \left( \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \left( \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) + \left( \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \left( \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) \right) + c.h. \quad (\text{A.21})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) + c.h. \quad (\text{A.22})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{ij\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_{ij} \left( e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i + \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_j)} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j + \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i)} \right) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + c.h. \quad (\text{A.23})$$

Le facteur  $\Delta_{ij}$  pour la symétrie de type  $d$  est tel qu'il ne laisse que deux termes dans la somme en  $j$  :

$$\Delta_{ij} \equiv \begin{cases} +\frac{1}{2} & \text{si } \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i = \hat{\mathbf{e}}_x & \rightarrow & \mathbf{r}_j = \hat{\mathbf{e}}_x + \mathbf{r}_i \\ -\frac{1}{2} & \text{si } \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i = \hat{\mathbf{e}}_y & \rightarrow & \mathbf{r}_j = \hat{\mathbf{e}}_y + \mathbf{r}_i \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (\text{A.24})$$

Avec les deux termes (A.24) dans (A.23), on a :

$$\hat{D} = \frac{1}{N} \sum_{i\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left( \left( +\frac{1}{2} \right) \left( e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i + \mathbf{k}'\cdot(\mathbf{e}_x + \mathbf{r}_i))} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{e}_x + \mathbf{r}_i) + \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i)} \right) \right. \\ \left. + \left( -\frac{1}{2} \right) \left( e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i + \mathbf{k}'\cdot(\mathbf{e}_y + \mathbf{r}_i))} + e^{-i(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{e}_y + \mathbf{r}_i) + \mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_i)} \right) \right) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + c.h. \quad (\text{A.25})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} \left( \left( e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{e}_x} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_x} \right) \right. \\ \left. - \left( e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{e}_y} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_y} \right) \right) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + c.h. \quad (\text{A.26})$$

on utilise alors l'expression  $\delta_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_r e^{-ir(k-k')}$  :

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} \left( \left( e^{-ik'_x} + e^{-ik_x} \right) - \left( e^{-ik'_y} + e^{-ik_y} \right) \right) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger + c.h. \quad (\text{A.27})$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_x - \cos k_y) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c.h. \quad (\text{A.28})$$

D'où finalement

$$\boxed{\hat{D} = \sum_{\mathbf{k}} (\cos k_x - \cos k_y) \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right)} \quad (\text{A.29})$$

### A.3 Commutateur de $\hat{M}$ et $\hat{D}$

On cherche le commutateur du paramètre d'ordre antiferromagnétique :

$$\hat{M} \equiv \sum_l e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_l} \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \right) \quad (\text{A.30})$$

avec le paramètre d'ordre supraconducteur :

$$\hat{D} \equiv \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right) + c.h. \quad (\text{A.31})$$

Avant de commencer, certaines définitions simplifieront la tâche. D'abord, pour le paramètre d'ordre antiferromagnétique :

$$\hat{M}_l \equiv c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \quad (\text{A.32})$$

$$\hat{M} \equiv \sum_l e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_l} \hat{M}_l \quad (\text{A.33})$$

Ensuite pour le paramètre d'ordre supraconducteur

$$\hat{D}_{ij} \equiv c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \quad (\text{A.34})$$

$$\hat{D}_0 \equiv \sum_{ij} \Delta_{ij} \hat{D}_{ij} \quad (\text{A.35})$$

$$\hat{D} = \hat{D}_0 + \hat{D}_0^\dagger \quad (\text{A.36})$$

Ainsi, on peut simplifier le calcul du commutateur :

$$[\hat{M}, \hat{D}] = [\hat{M}, \hat{D}_0 + \hat{D}_0^\dagger] \quad \text{avec (A.36)} \quad (\text{A.37})$$

$$= [\hat{M}, \hat{D}_0] + [\hat{M}, \hat{D}_0^\dagger] \quad (\text{A.38})$$

$$= [\hat{M}, \hat{D}_0] + [\hat{M}^\dagger, \hat{D}_0^\dagger] \quad \text{puisque } \hat{M} \text{ est hermitique} \quad (\text{A.39})$$

$$= [\hat{M}, \hat{D}_0] + [\hat{D}_0, \hat{M}]^\dagger \quad (\text{A.40})$$

$$= [\hat{M}, \hat{D}_0] - [\hat{M}, \hat{D}_0]^\dagger \quad (\text{A.41})$$

en continuant seulement avec

$$[\hat{M}, \hat{D}_0] = \left[ \sum_l e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_l} \hat{M}_l, \sum_{ij} \Delta_{ij} \hat{D}_{ij} \right] \quad \text{avec (A.33) et (A.35)} \quad (\text{A.42})$$

$$= \sum_{ij} \sum_l \Delta_{ij} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_l} [\hat{M}_l, \hat{D}_{ij}] \quad \text{le commutateur étant linéaire} \quad (\text{A.43})$$

Et on peut se concentrer sur les relations de commutation de  $c^\dagger$  et  $c$  :

$$[\hat{M}_l, \hat{D}_{ij}] = \hat{M}_l \hat{D}_{ij} - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.44})$$

$$= \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \right) \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right) - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.45})$$

$$= c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.46})$$

$$= c_{l\uparrow}^\dagger \left( \delta_{il} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \right) c_{j\downarrow}^\dagger + c_{l\uparrow}^\dagger \left( \delta_{jl} - c_{j\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} \right) c_{i\downarrow}^\dagger + c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \left( \delta_{jl} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \right) + c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \left( \delta_{il} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \right) - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.47})$$

$$= \delta_{il} c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger - c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger - c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{il} c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger - c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.48})$$

$$= \delta_{il} c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger + \delta_{il} c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger - c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger - c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger - c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger - c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.49})$$

$$= \delta_{il} c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger + \delta_{il} c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger + c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} - c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.50})$$

$$= \delta_{il} c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger + \delta_{il} c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger + \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \right) \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} - c_{l\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} \right) - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.51})$$

$$= \delta_{il} c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \delta_{jl} c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger + \delta_{il} c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger + \hat{D}_{ij} \hat{M}_l - \hat{D}_{ij} \hat{M}_l \quad (\text{A.52})$$

$$= \delta_{il} \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) + \delta_{jl} \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.53})$$

On remment (A.53) dans (A.43) on obtient donc :

$$[\hat{M}, \hat{D}_0] = \sum_{ij} \sum_l \Delta_{ij} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_l} \left( \delta_{il} \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{l\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) + \delta_{jl} \left( c_{l\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + c_{l\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \right) \right) \quad (\text{A.54})$$

$$= \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) + e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \left( c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \right) \right) \quad (\text{A.55})$$

$$= \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) + e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \left( -c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger - c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \right) \right) \quad (\text{A.56})$$

$$= \sum_{ij} \Delta_{ij} \left( e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} - e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \right) \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.57})$$

$$= \sum_{ij} \Delta_{ij} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( 1 - e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \right) \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.58})$$

Dans le cas du réseau carré,  $\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$  est une combinaison des vecteurs  $a\hat{x}$  et  $a\hat{y}$ , de

sorte qu'avec  $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ , on sait que  $e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} = -1$ . On a donc :

$$[\hat{M}, \hat{D}_0] = 2 \sum_{ij} \Delta_{ij} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.59})$$

$$= -2i\hat{T}_0 \quad (\text{A.60})$$

où :

$$\hat{T}_0 \equiv i \sum_{ij} \Delta_{ij} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) \quad (\text{A.61})$$

Cela permet maintenant de réécrire le commutateur (A.41) comme

$$[\hat{M}, \hat{D}] = [\hat{M}, \hat{D}_0] - [\hat{M}, \hat{D}_0]^\dagger \quad (\text{A.62})$$

$$= -2i\hat{T}_0 - (-2i\hat{T}_0)^\dagger \quad (\text{A.63})$$

$$= -2i \left( \hat{T}_0 + \hat{T}_0^\dagger \right) \equiv -2i\hat{T} \quad (\text{A.64})$$

$$\boxed{[\hat{M}, \hat{D}] = -2i\hat{T}} \quad (\text{A.65})$$

$$\boxed{\hat{T} \equiv i \sum_{ij} \Delta_{ij} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} \left( c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger \right) + c.h} \quad (\text{A.66})$$

## A.4 Représentation de Lehmann de la fonction de Green

On part de la fonction de Green causale (3.25) où on supposera l'invariance dans le temps de sorte qu'on puisse fixer un temps à 0 pour simplifier. Les indices  $a$  et  $b$

peuvent être des positions ou des vecteurs d'onde, ça n'a pas d'importance.

$$iG_{ab}(t) \equiv \langle \Omega | T c_a(0) c_b^\dagger(t) | \Omega \rangle \quad (\text{A.67})$$

$$= \langle \Omega | c_a(0) c_b^\dagger(t) | \Omega \rangle \theta(t) - \langle \Omega | c_b^\dagger(t) c_a(0) | \Omega \rangle \theta(-t) \quad (\text{A.68})$$

$$= \langle \Omega | c_a e^{i\hat{H}t} c_b^\dagger e^{-i\hat{H}t} | \Omega \rangle \theta(t) - \langle \Omega | e^{i\hat{H}t} c_b^\dagger e^{-i\hat{H}t} c_a | \Omega \rangle \theta(-t) \quad (\text{A.69})$$

$$= \sum_n \langle \Omega | c_a e^{i\hat{H}t} | n \rangle \langle n | c_b^\dagger e^{-i\hat{H}t} | \Omega \rangle \theta(t) \\ - \sum_m \langle \Omega | e^{i\hat{H}t} c_b^\dagger | m \rangle \langle m | e^{-i\hat{H}t} c_a | \Omega \rangle \theta(-t) \quad (\text{A.70})$$

$$= \sum_n \langle \Omega | c_a e^{iE_n t} | n \rangle \langle n | c_b^\dagger e^{-iE_0 t} | \Omega \rangle \theta(t) \\ - \sum_m \langle \Omega | e^{iE_0 t} c_b^\dagger | m \rangle \langle m | e^{-iE_m t} c_a | \Omega \rangle \theta(-t) \quad (\text{A.71})$$

$$= \sum_n \langle \Omega | c_a | n \rangle \langle n | c_b^\dagger | \Omega \rangle e^{i(E_n - E_0)t} \theta(t) \\ - \sum_m \langle \Omega | c_b^\dagger | m \rangle \langle m | c_a | \Omega \rangle e^{i(E_0 - E_m)t} \theta(-t) \quad (\text{A.72})$$

on prend alors la transformée de Fourier

$$-iG_{ab}(\omega) = \sum_n \langle \Omega | c_a | n \rangle \langle n | c_b^\dagger | \Omega \rangle \int_0^\infty e^{i(E_n - E_0 - \omega)t} \\ - \sum_m \langle \Omega | c_b^\dagger | m \rangle \langle m | c_a | \Omega \rangle \int_{-\infty}^0 e^{i(E_0 - E_m - \omega)t} \quad (\text{A.73})$$

on doit ajouter un facteur de convergence pour que l'intégrale soit définie. Dans la première  $t > 0$  donc on ajoute  $e^{i(i\eta)t}$  et dans la deuxième  $t < 0$  donc on ajoute  $e^{i(-i\eta)t}$ . On fera tendre implicitement  $\eta \rightarrow 0$  pour que l'intégrale reste inchangée.

$$\begin{aligned}
&= \sum_n \langle \Omega | c_a | n \rangle \langle n | c_b^\dagger | \Omega \rangle \int_0^\infty e^{i(E_n - E_0 - \omega + i\eta)t} \\
&\quad - \sum_m \langle \Omega | c_b^\dagger | m \rangle \langle m | c_a | \Omega \rangle \int_{-\infty}^0 e^{i(E_0 - E_m - \omega - i\eta)t} \tag{A.74}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_n \langle \Omega | c_a | n \rangle \langle n | c_b^\dagger | \Omega \rangle \frac{(-i) [e^{i(E_n - E_0 - \omega + i\eta)t}]_0^\infty}{E_n - E_0 - \omega + i\eta} \\
&\quad - \sum_m \langle \Omega | c_b^\dagger | m \rangle \langle m | c_a | \Omega \rangle \frac{(-i) [e^{i(E_0 - E_m - \omega - i\eta)t}]_{-\infty}^0}{E_0 - E_m - \omega - i\eta} \tag{A.75}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_n \langle \Omega | c_a | n \rangle \langle n | c_b^\dagger | \Omega \rangle \frac{i}{E_n - E_0 - \omega + i\eta} \\
&\quad - \sum_m \langle \Omega | c_b^\dagger | m \rangle \langle m | c_a | \Omega \rangle \frac{(-i)}{E_0 - E_m - \omega - i\eta} \tag{A.76}
\end{aligned}$$

En jouant avec les signes, on a la représentation de Lehmann :

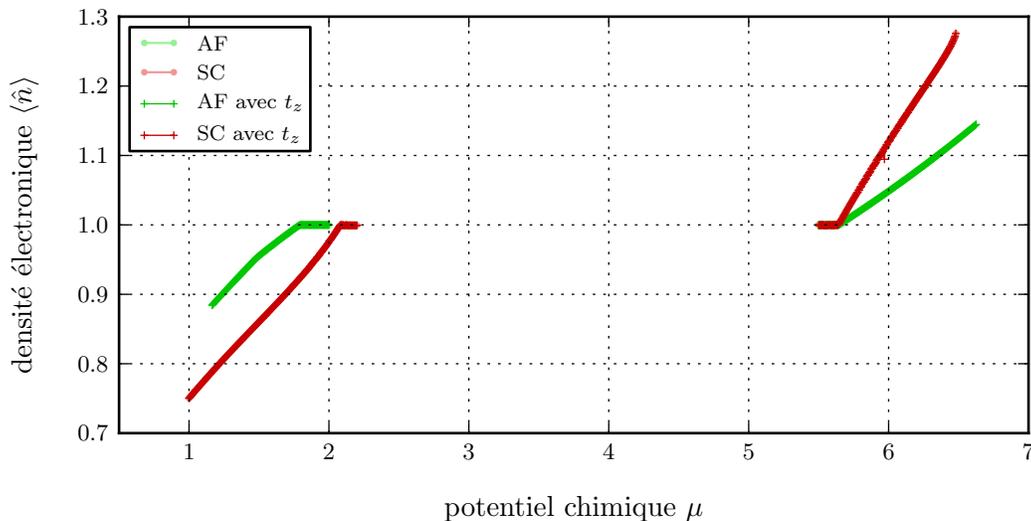
$$\boxed{G_{ab}(\omega) = \sum_n \frac{\langle \Omega | c_a | n \rangle \langle n | c_b^\dagger | \Omega \rangle}{\omega - (E_n - E_0) - i\eta} + \sum_m \frac{\langle \Omega | c_b^\dagger | m \rangle \langle m | c_a | \Omega \rangle}{\omega + (E_m - E_0) + i\eta}} \tag{A.77}$$

En plaçant judicieusement le dénominateur, on obtient une version sans sommes :

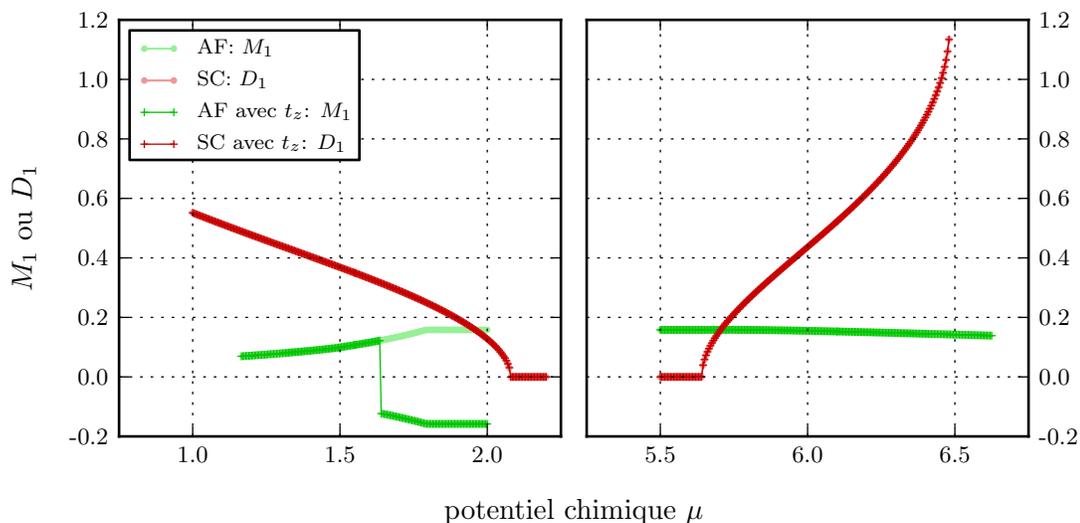
$$\boxed{G_{ab}(\omega) = \langle \Omega | c_a \frac{1}{\omega - (\hat{H} - E_0) - i\eta} c_b^\dagger | \Omega \rangle + \langle \Omega | c_b^\dagger \frac{1}{\omega + (\hat{H} - E_0) + i\eta} c_a | \Omega \rangle} \tag{A.78}$$

## A.5 Paramètres convergés de tous les calculs

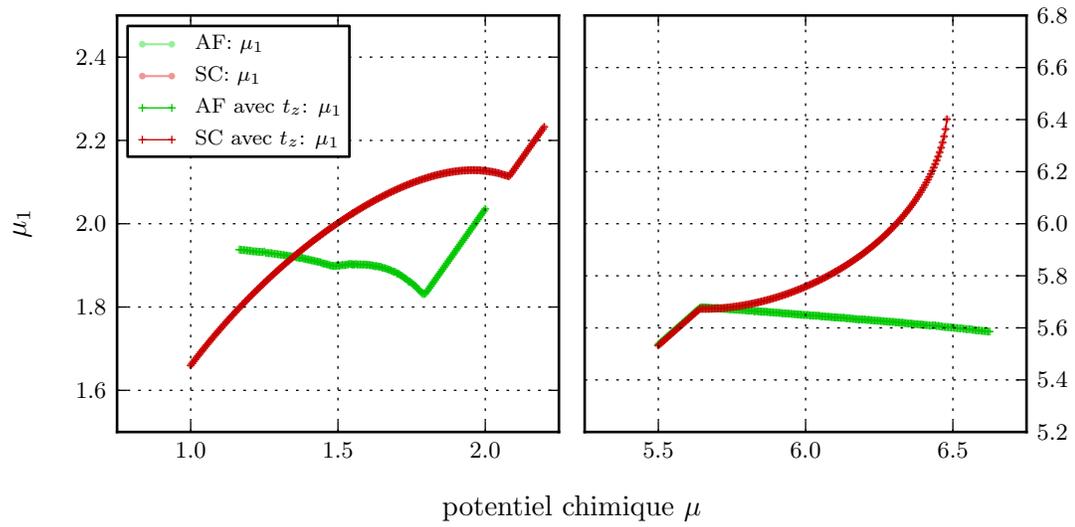
Cette annexe contient toute l'information nécessaire pour pousser d'avantage l'analyse des résultats ou encore pour faciliter la reproduction de ceux-ci. Il est préférable de connaître plus en détail les méthodes et le programme QCM avant de s'y référer.



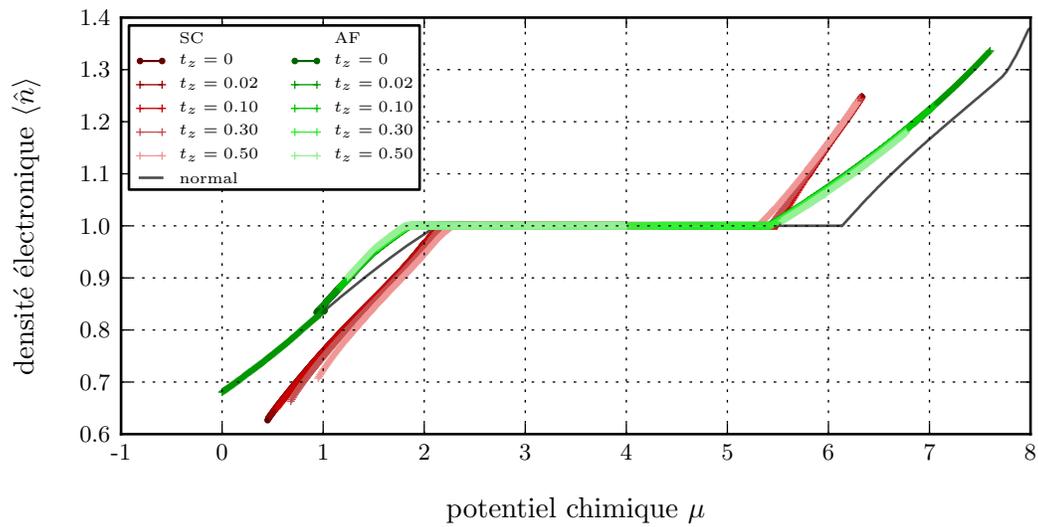
**Figure A.1** VCA 2x2, NCO,  $t_z$  réaliste, relation entre  $\langle \hat{n} \rangle$  et  $\mu$



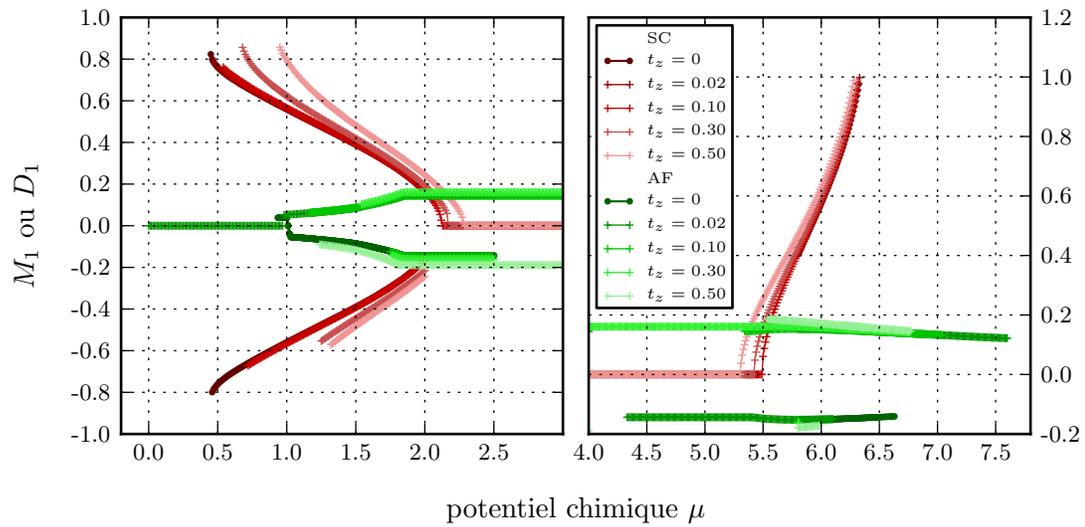
**Figure A.2** VCA 2x2, NCO,  $t_z$  réaliste, valeurs convergées pour  $M_1$  et  $D_1$



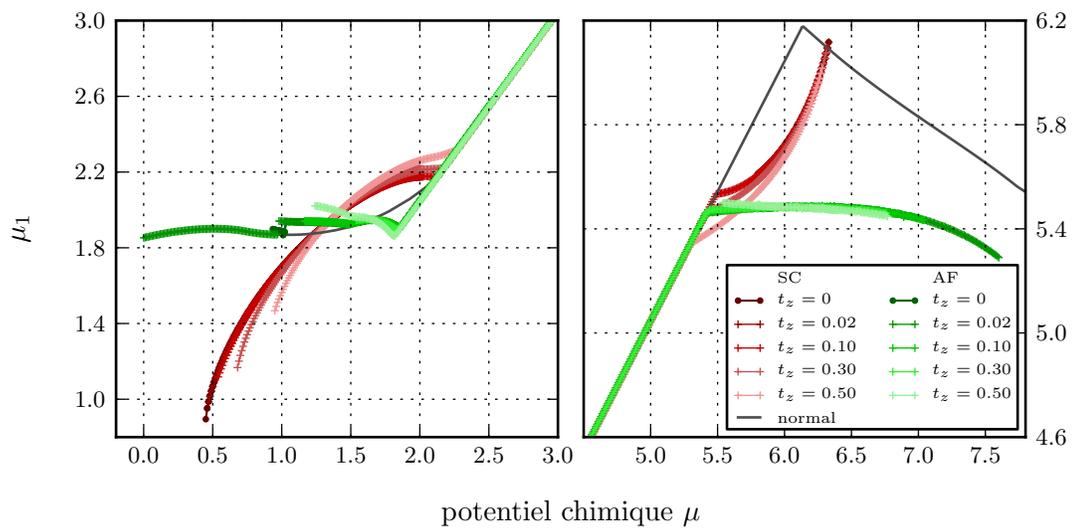
**Figure A.3** VCA 2x2, NCO,  $t_z$  réaliste, valeurs convergées pour  $\mu_1$



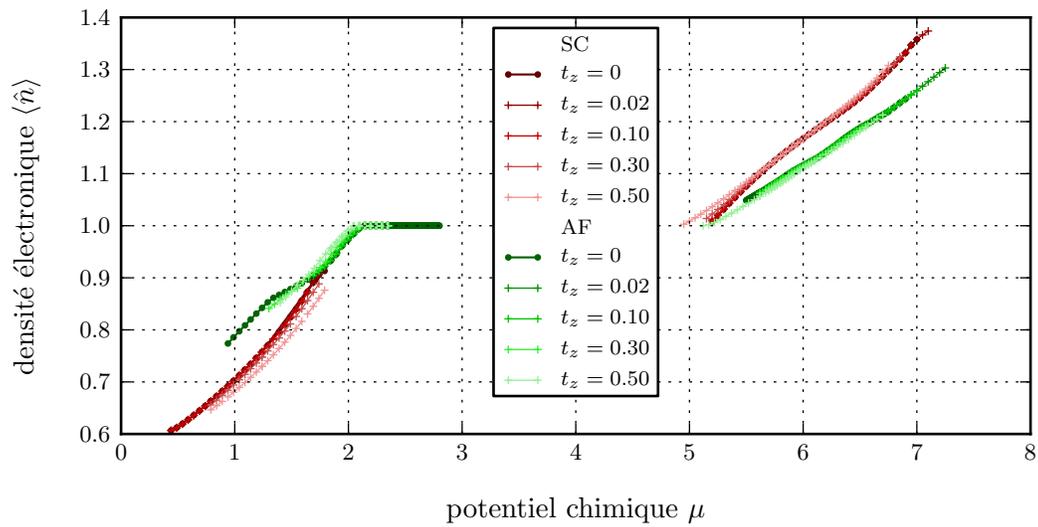
**Figure A.4** VCA 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, relation entre  $\langle \hat{n} \rangle$  et  $\mu$



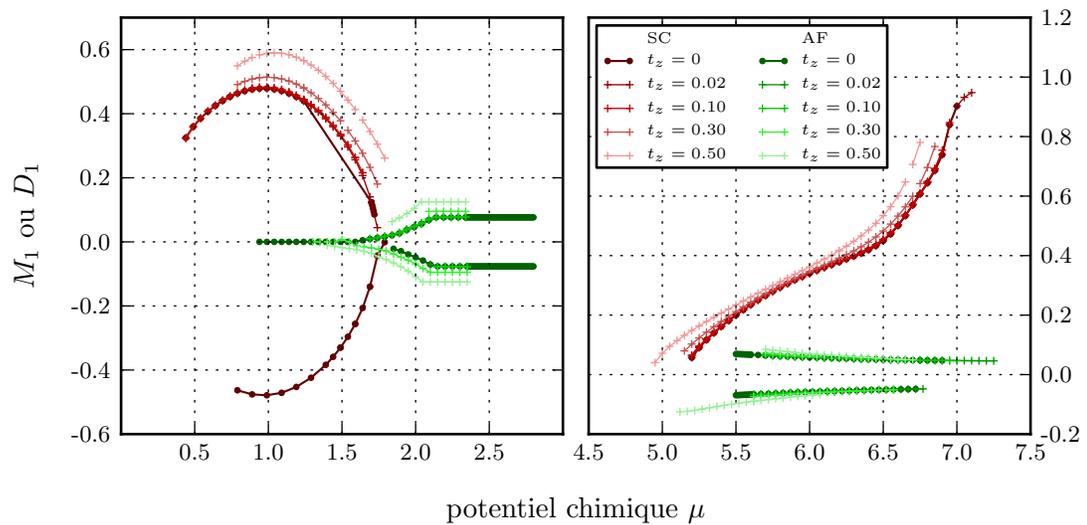
**Figure A.5** VCA 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, valeurs convergées de  $M_1$  et  $D_1$



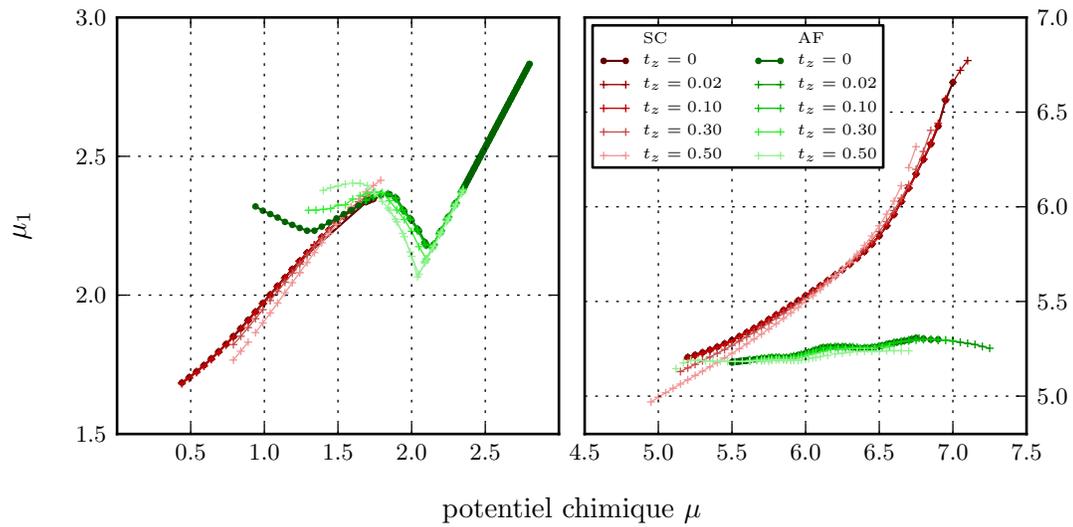
**Figure A.6** VCA 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, valeurs convergées pour  $\mu_1$



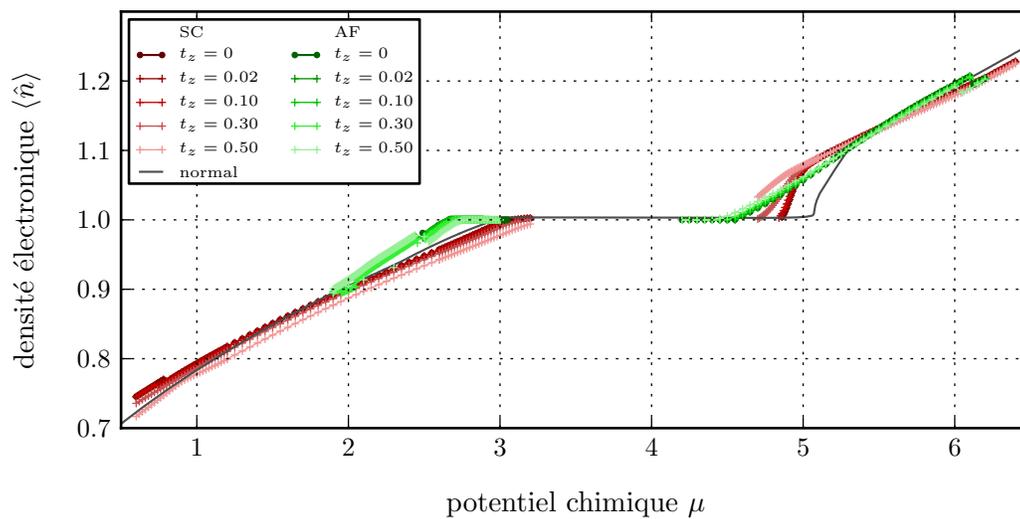
**Figure A.7** VCA 4x3, YBCO,  $t_z$  artificiels, relation entre  $\langle \hat{n} \rangle$  et  $\mu$



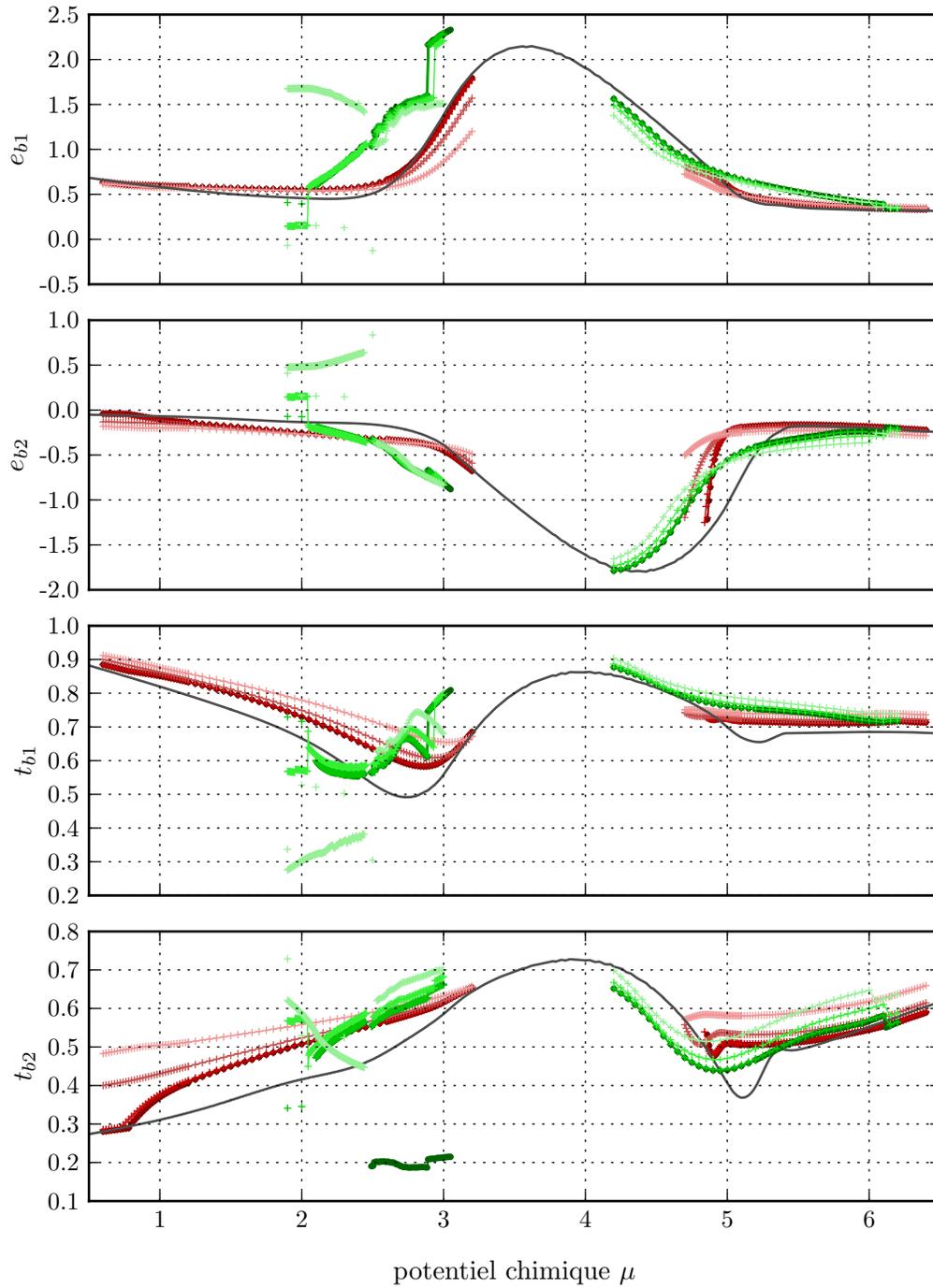
**Figure A.8** VCA 4x3, YBCO,  $t_z$  artificiels, valeurs convergées de  $M_1$  et  $D_1$



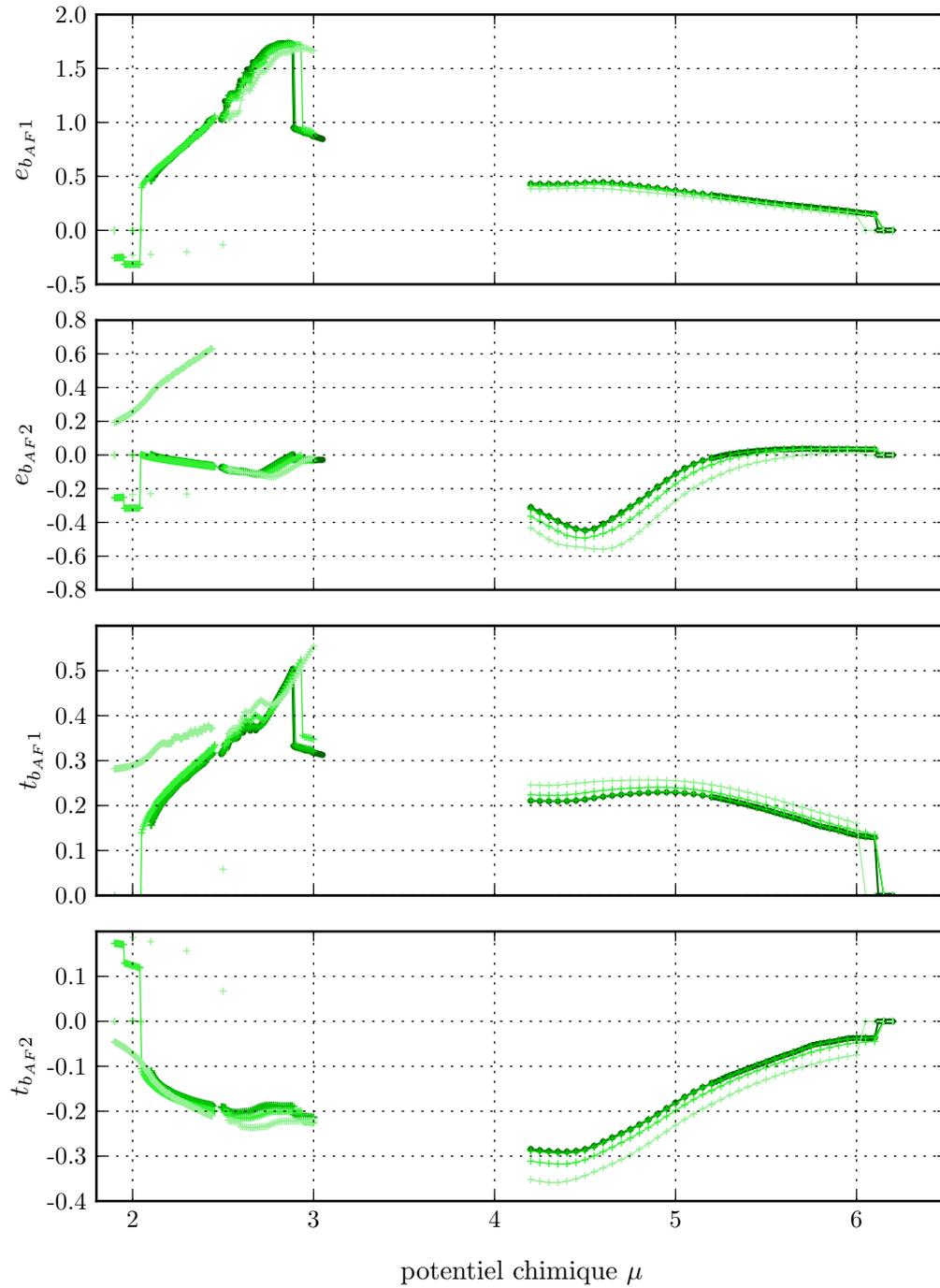
**Figure A.9** VCA 4x3, YBCO,  $t_z$  artificiels, valeurs convergées pour  $\mu_1$



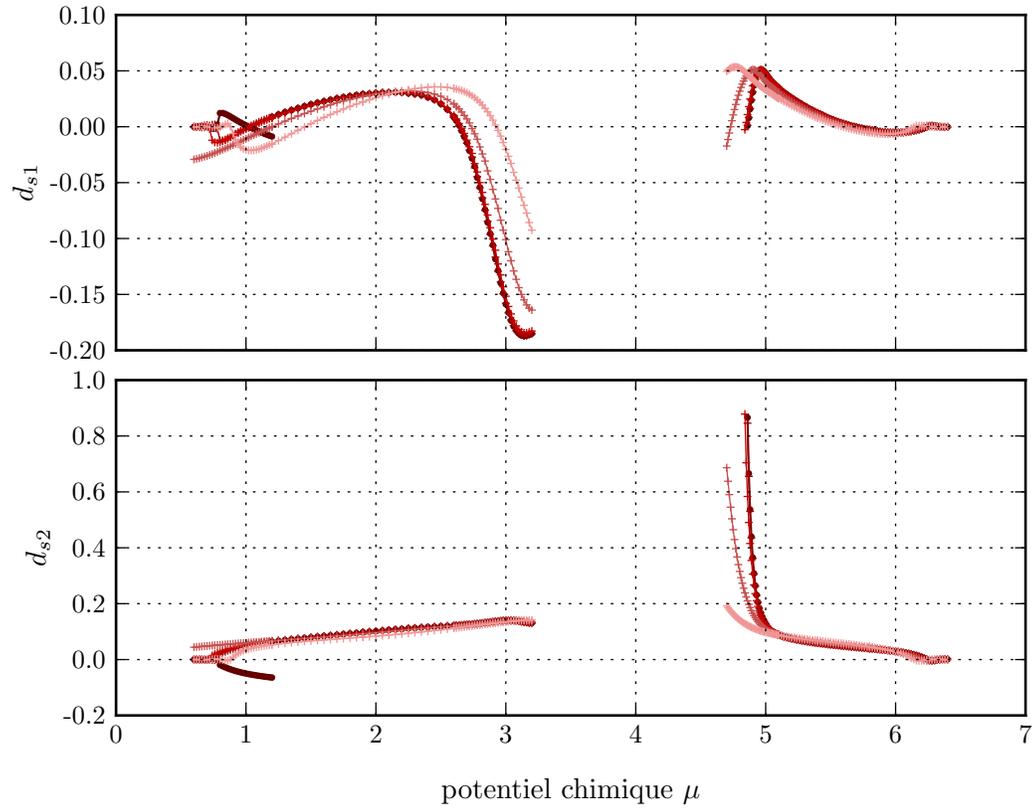
**Figure A.10** CDMFT 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, relation entre  $\langle \hat{n} \rangle$  et  $\mu$



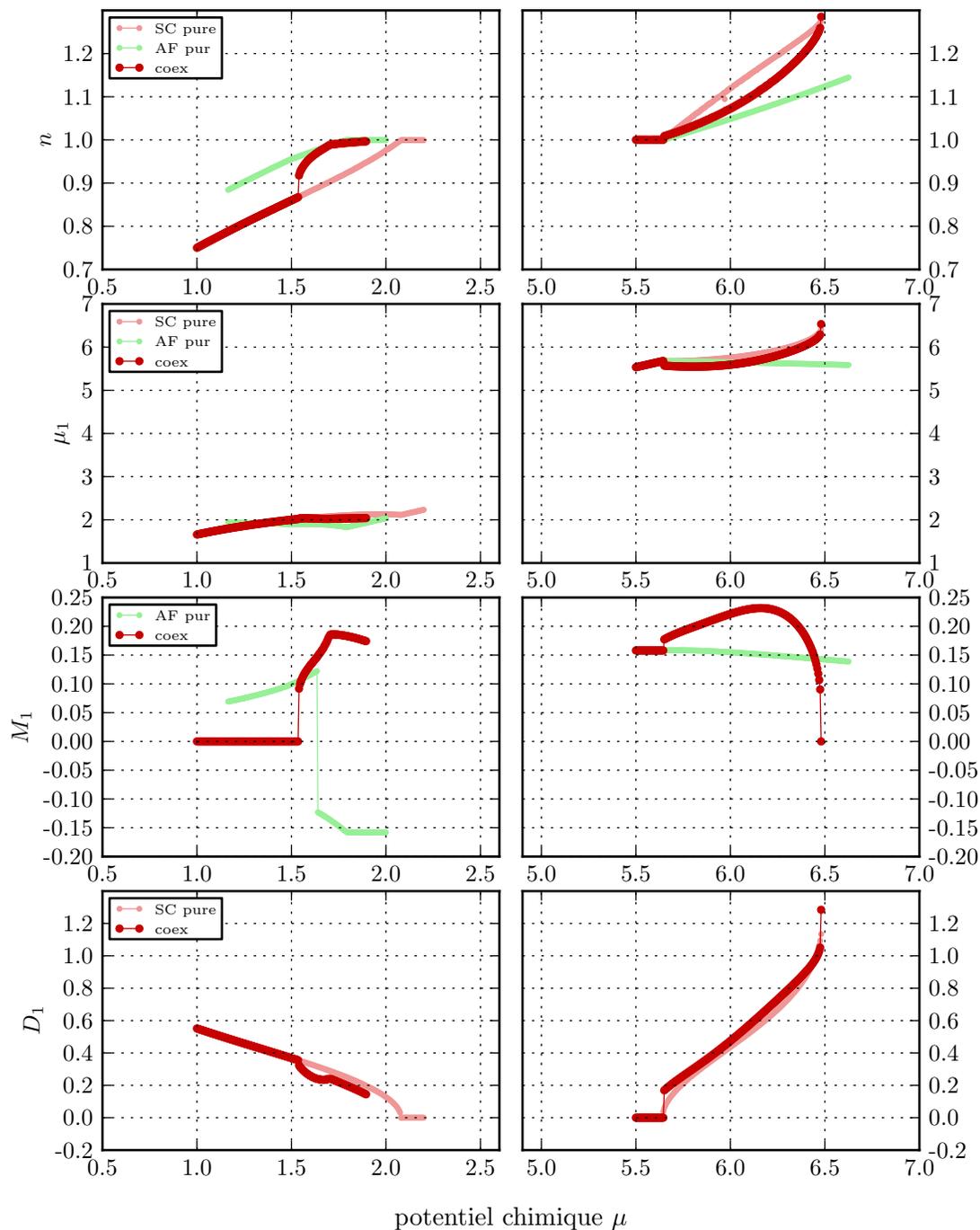
**Figure A.11** CDMFT 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, paramètres du bain normal, utiliser la légende de la figure A.10



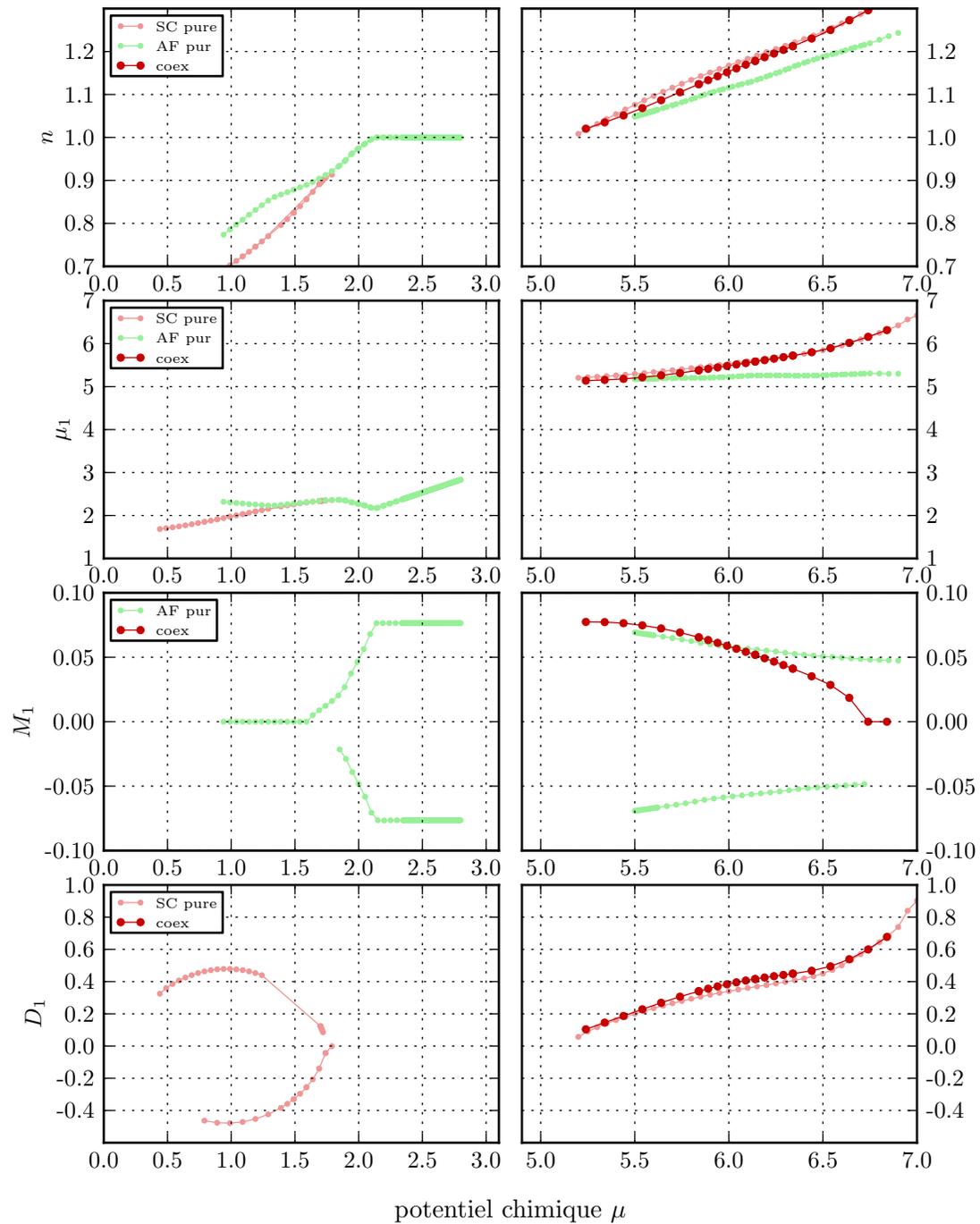
**Figure A.12** CDMFT 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, paramètres du bain AF, utiliser la légende de la figure A.10



**Figure A.13** CDMFT 2x2, YBCO,  $t_z$  artificiels, paramètres du bain SC, utiliser la légende de la figure A.10



**Figure A.14** VCA 2x2, YBCO, phases en coexistence, relation entre  $\langle \hat{n} \rangle$  et  $\mu$  et paramètres  $\mu_1$ ,  $M_1$  et  $D_1$  convergés.



**Figure A.15** VCA 4x3, YBCO, phases en coexistence, relation entre  $\langle \hat{n} \rangle$  et  $\mu$  et paramètres  $\mu_1$ ,  $M_1$  et  $D_1$  convergés.

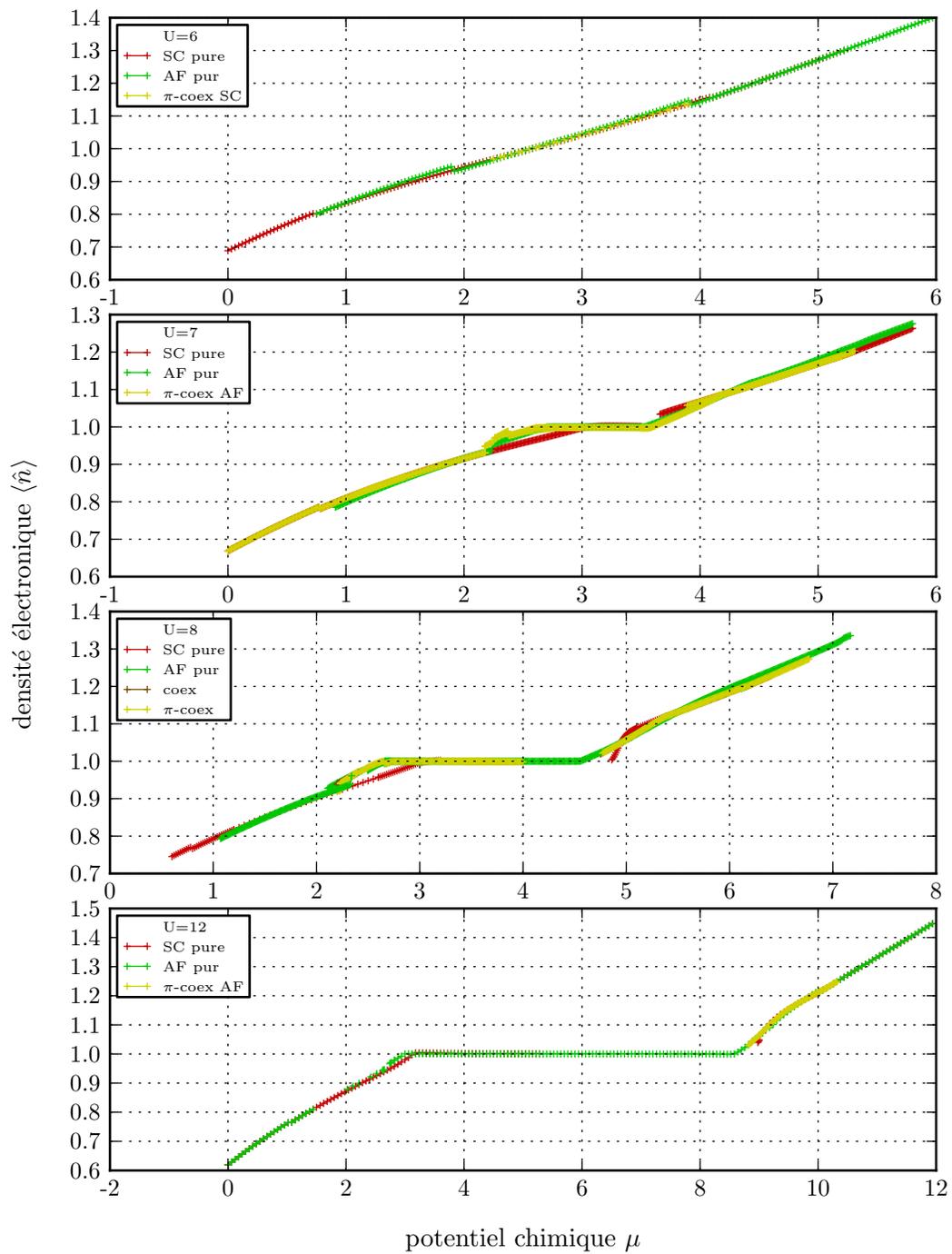
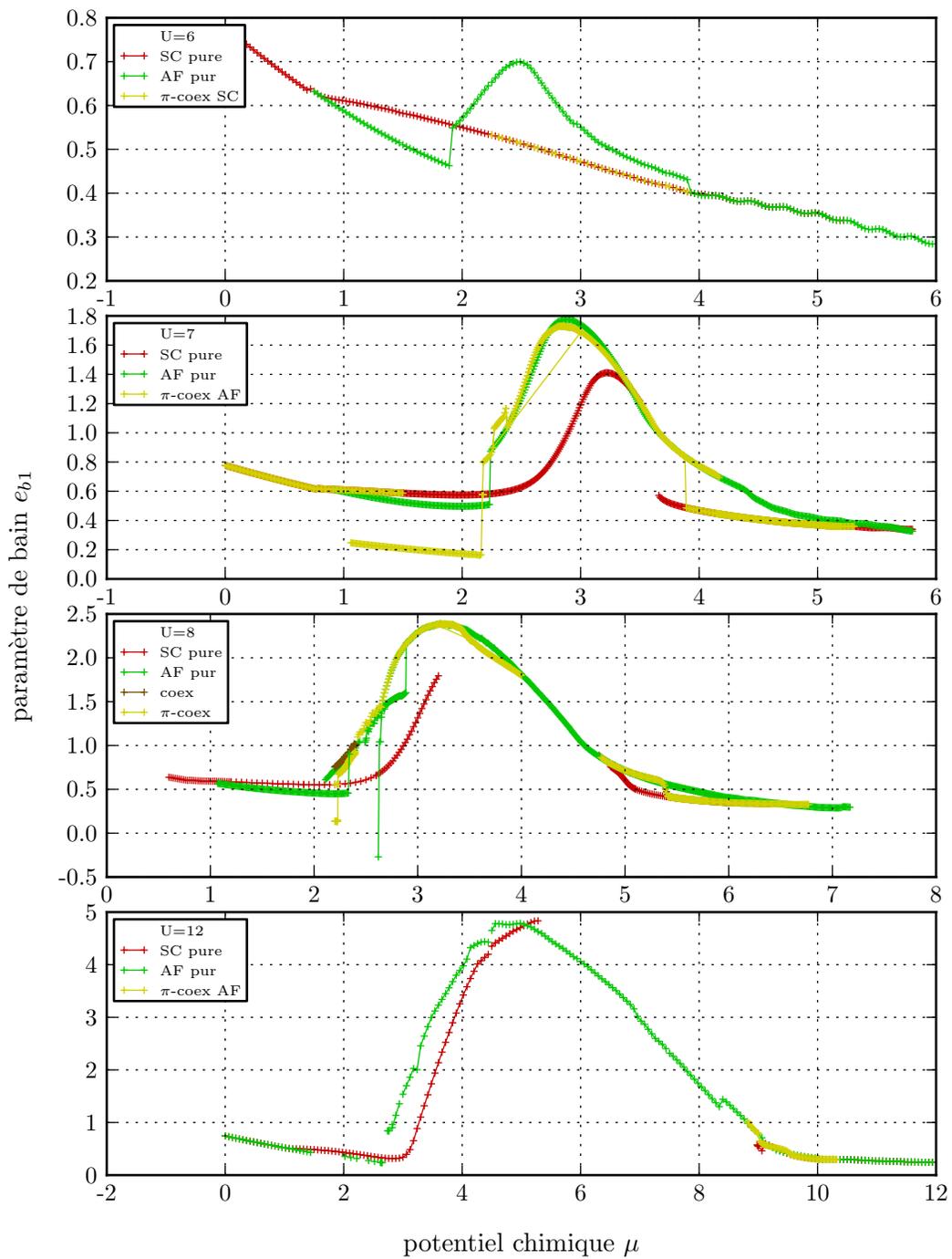
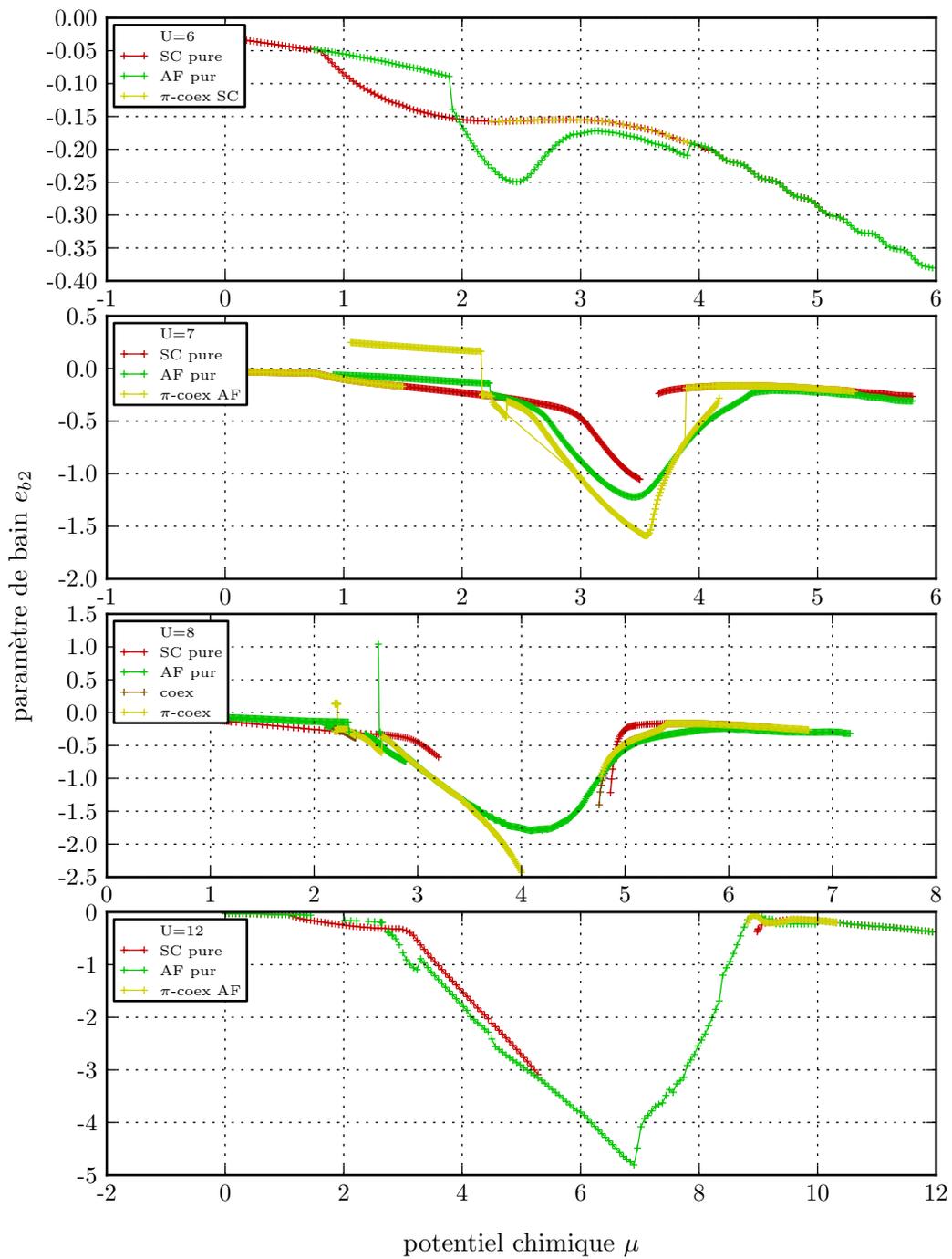


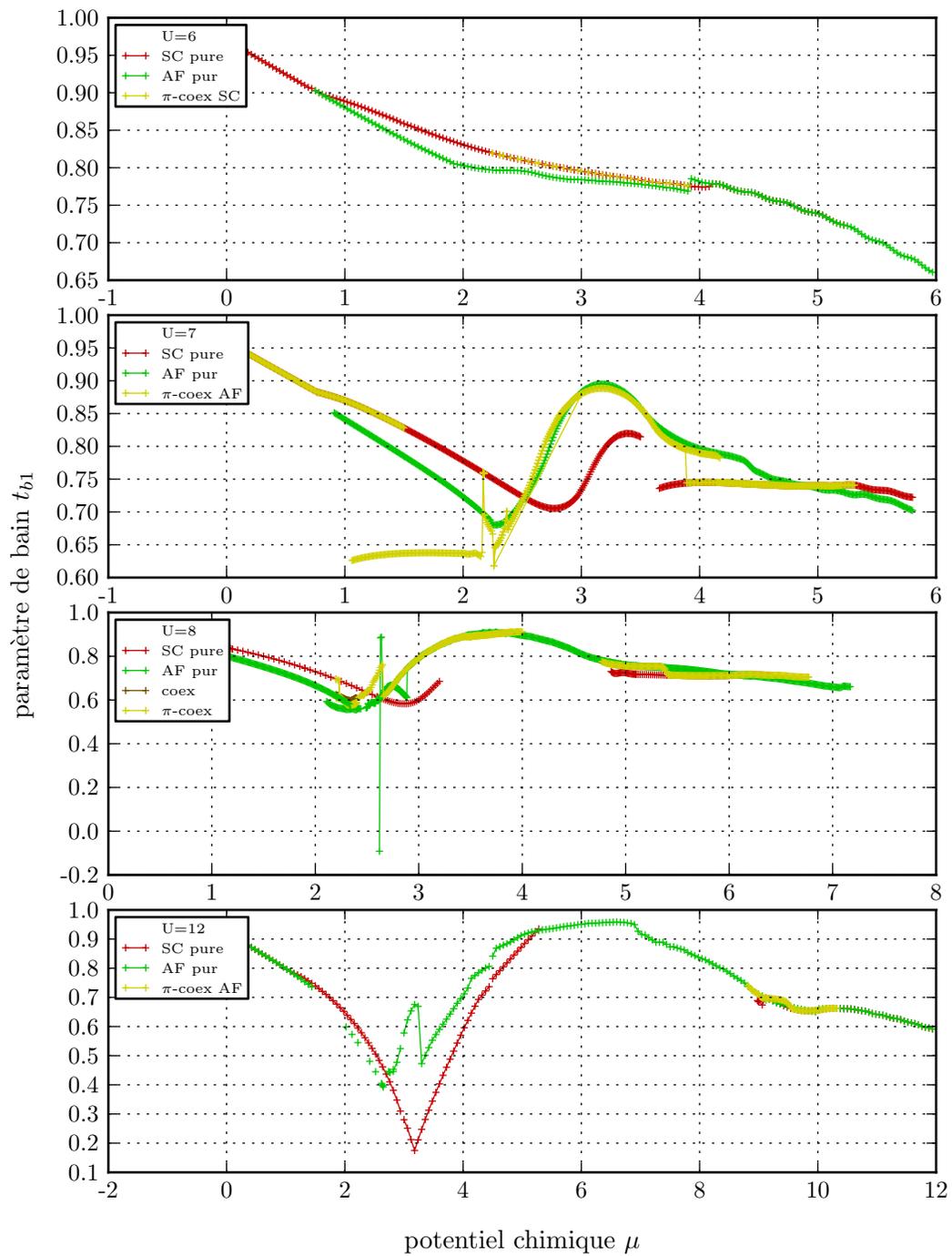
Figure A.16 CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $n$



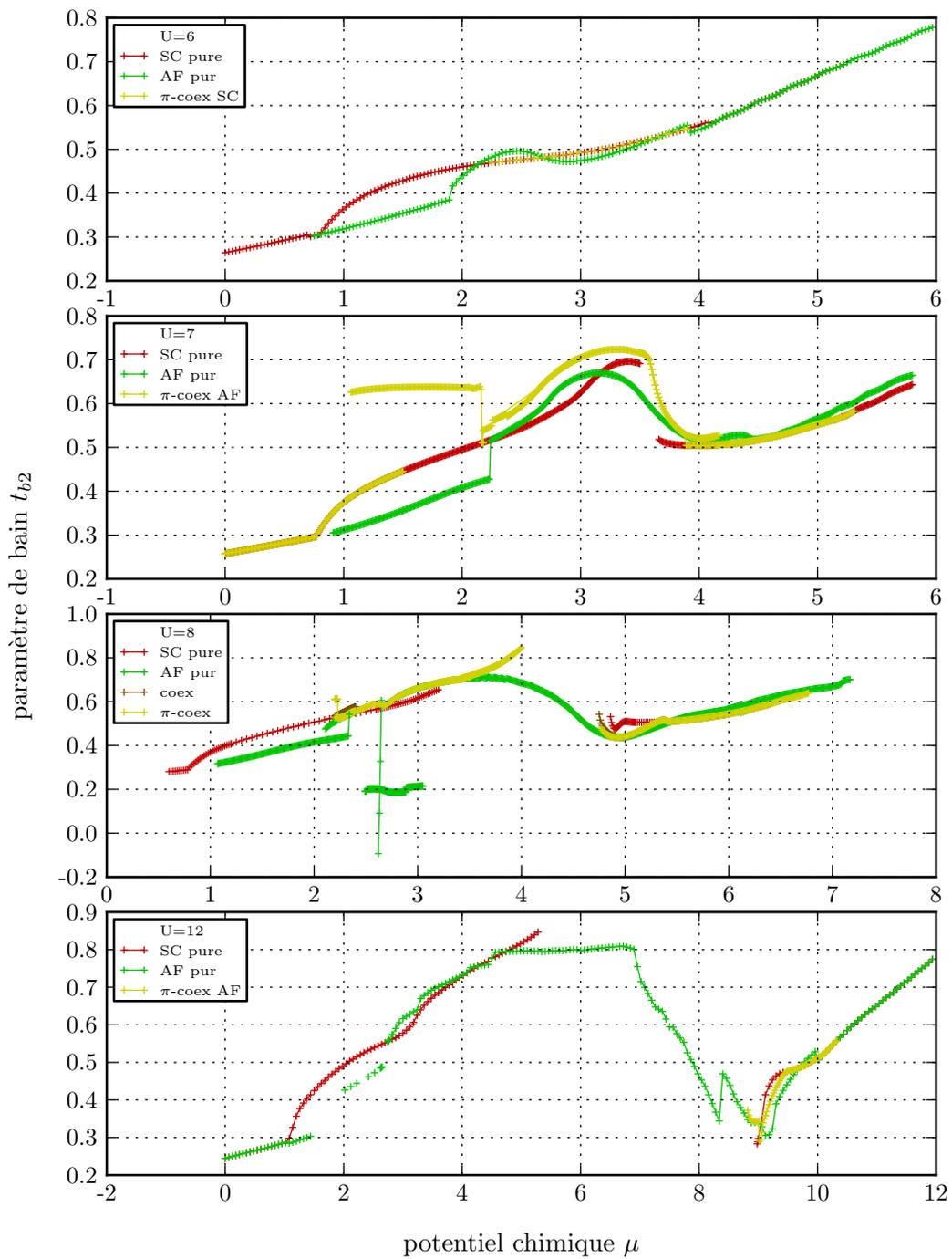
**Figure A.17** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $e_{b1}$



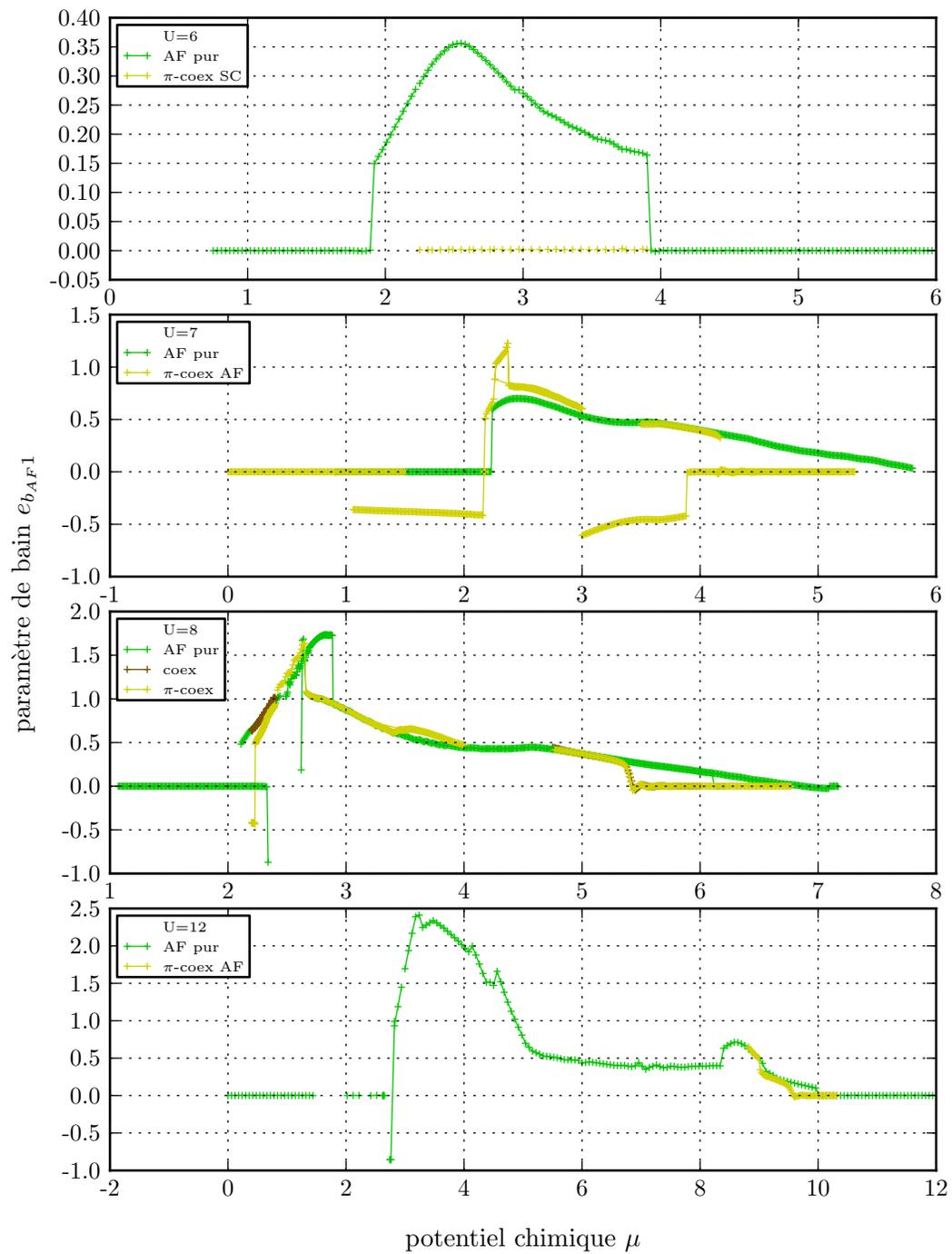
**Figure A.18** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $e_{b2}$



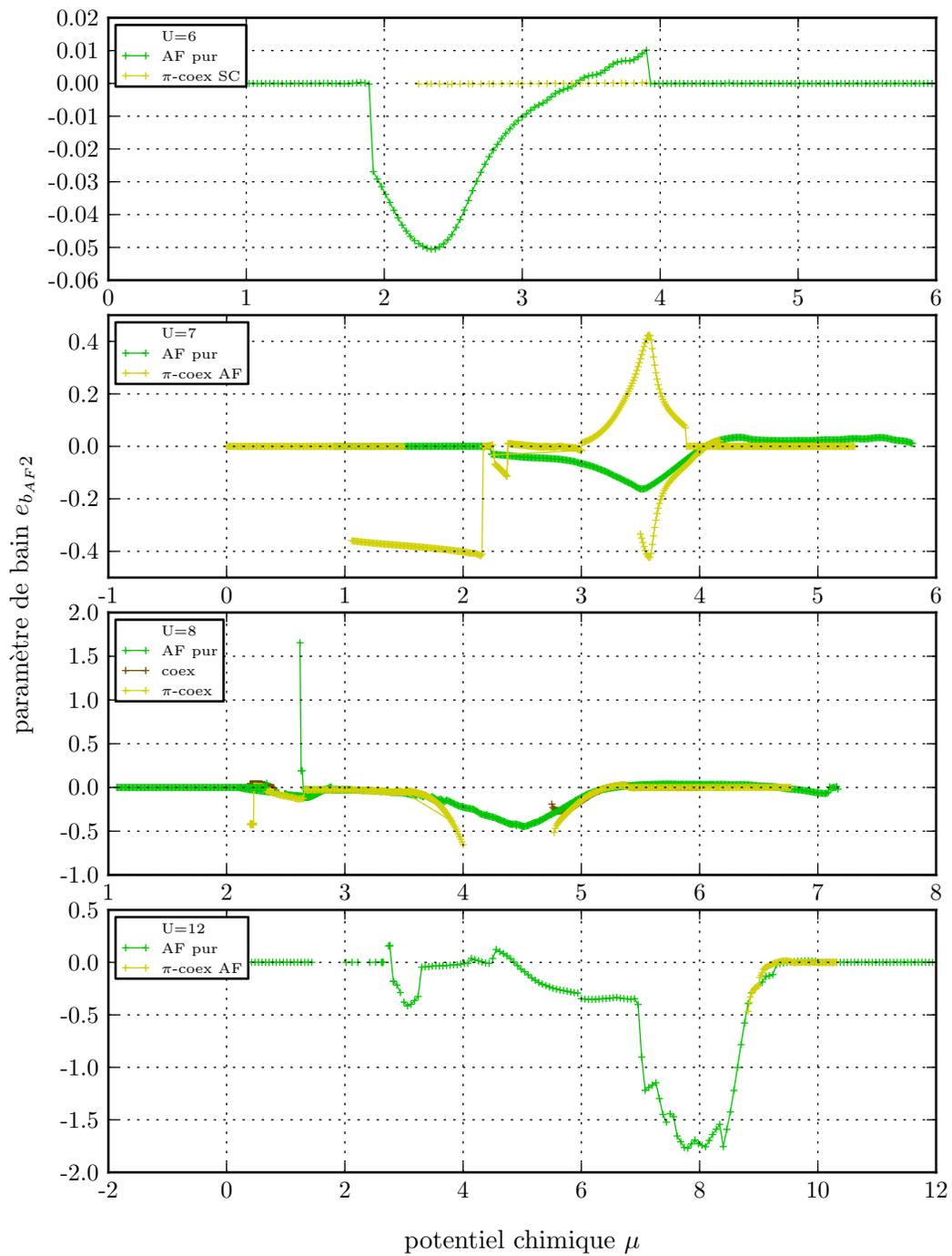
**Figure A.19** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $t_{b1}$



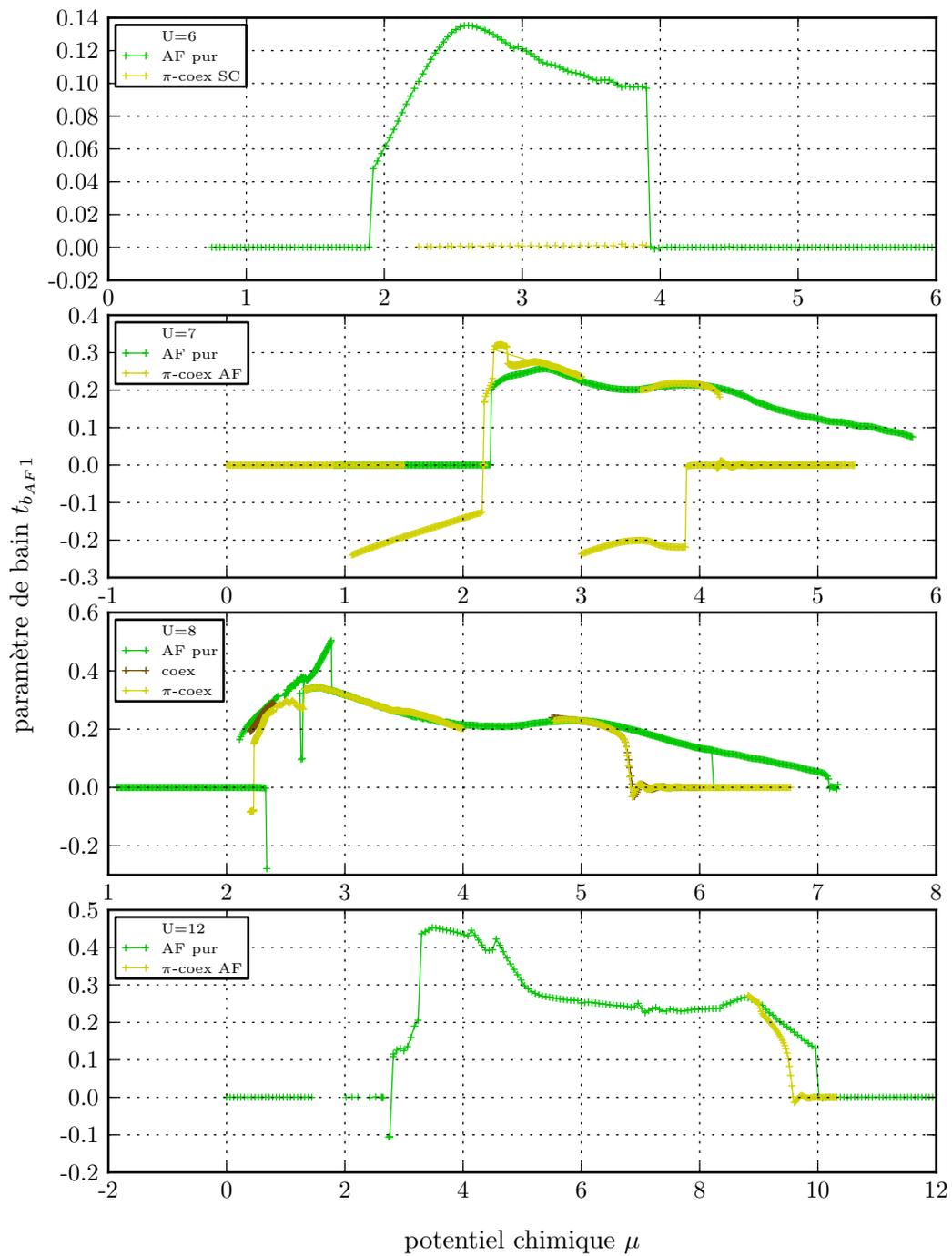
**Figure A.20** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $t_{b2}$



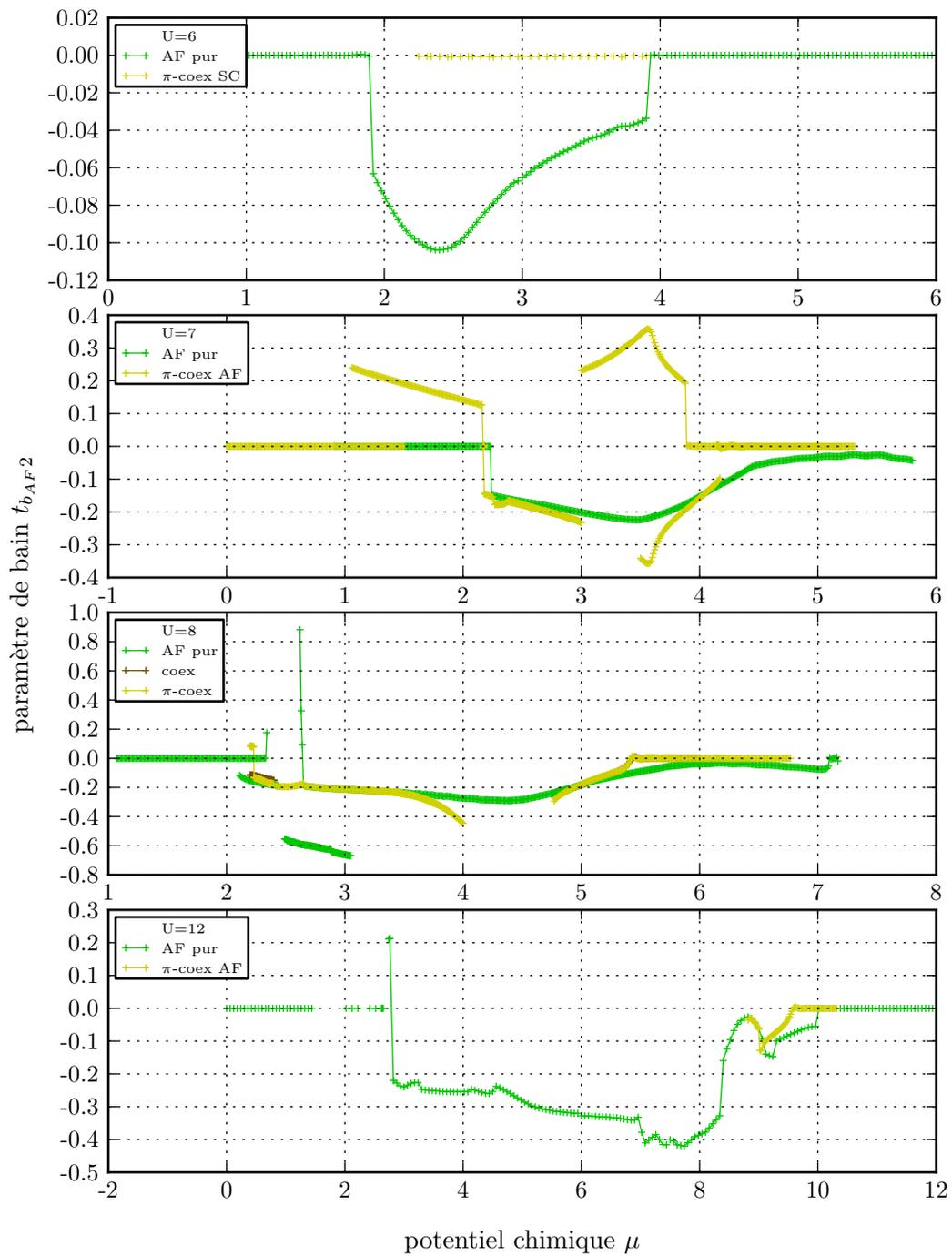
**Figure A.21** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $e_{b_{AF}1}$



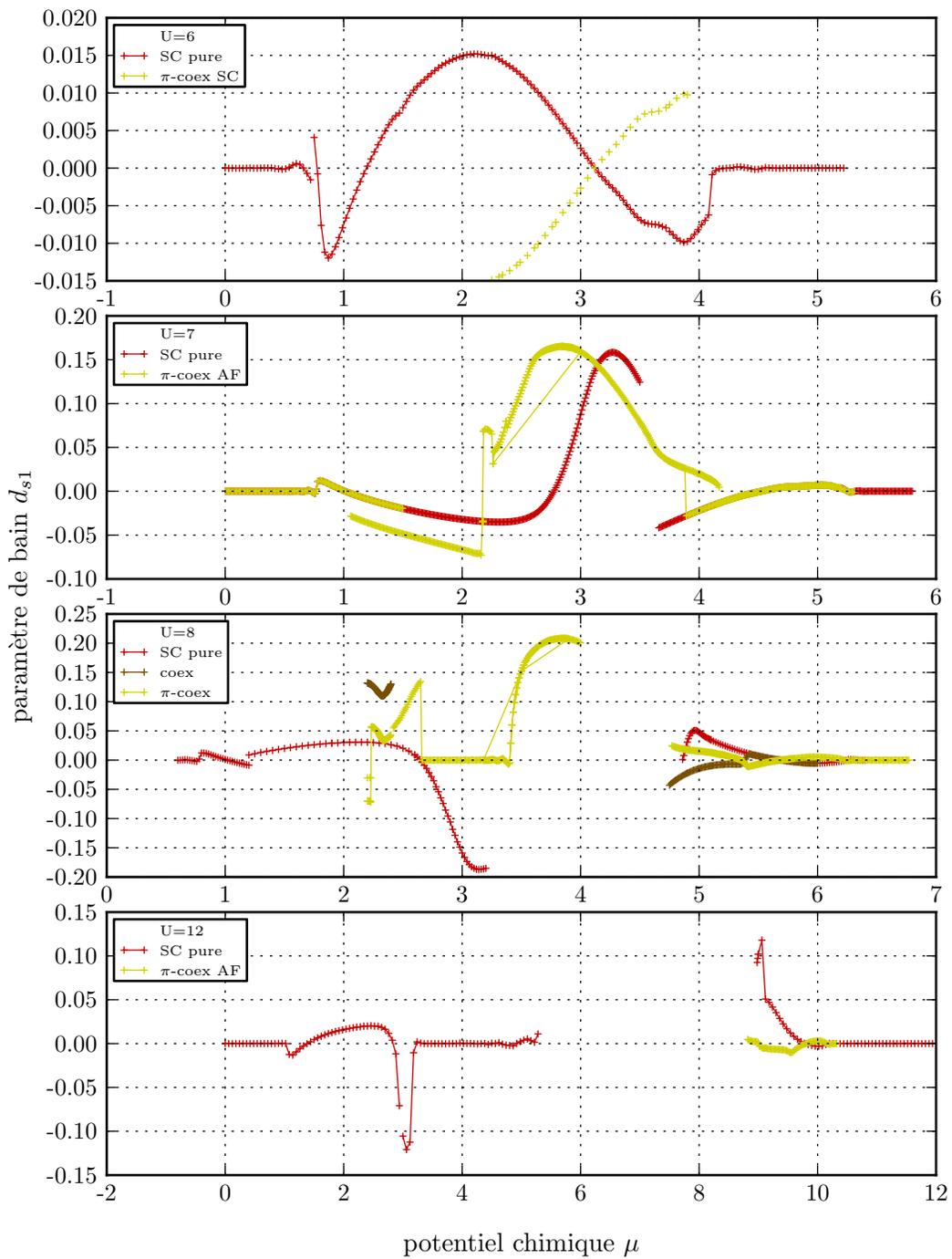
**Figure A.22** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $e_{b_{AF}2}$



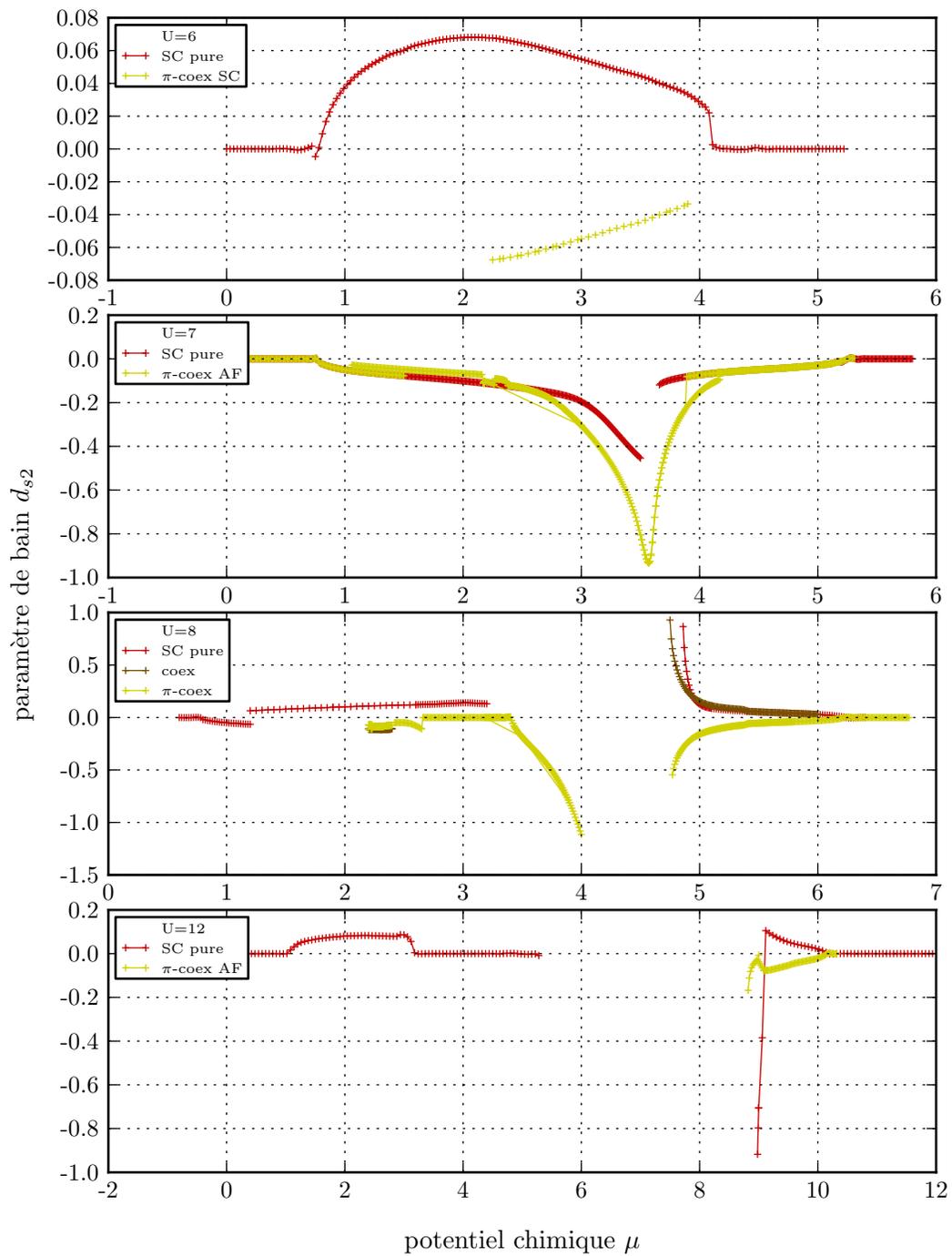
**Figure A.23** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $t_{b_{AF}1}$



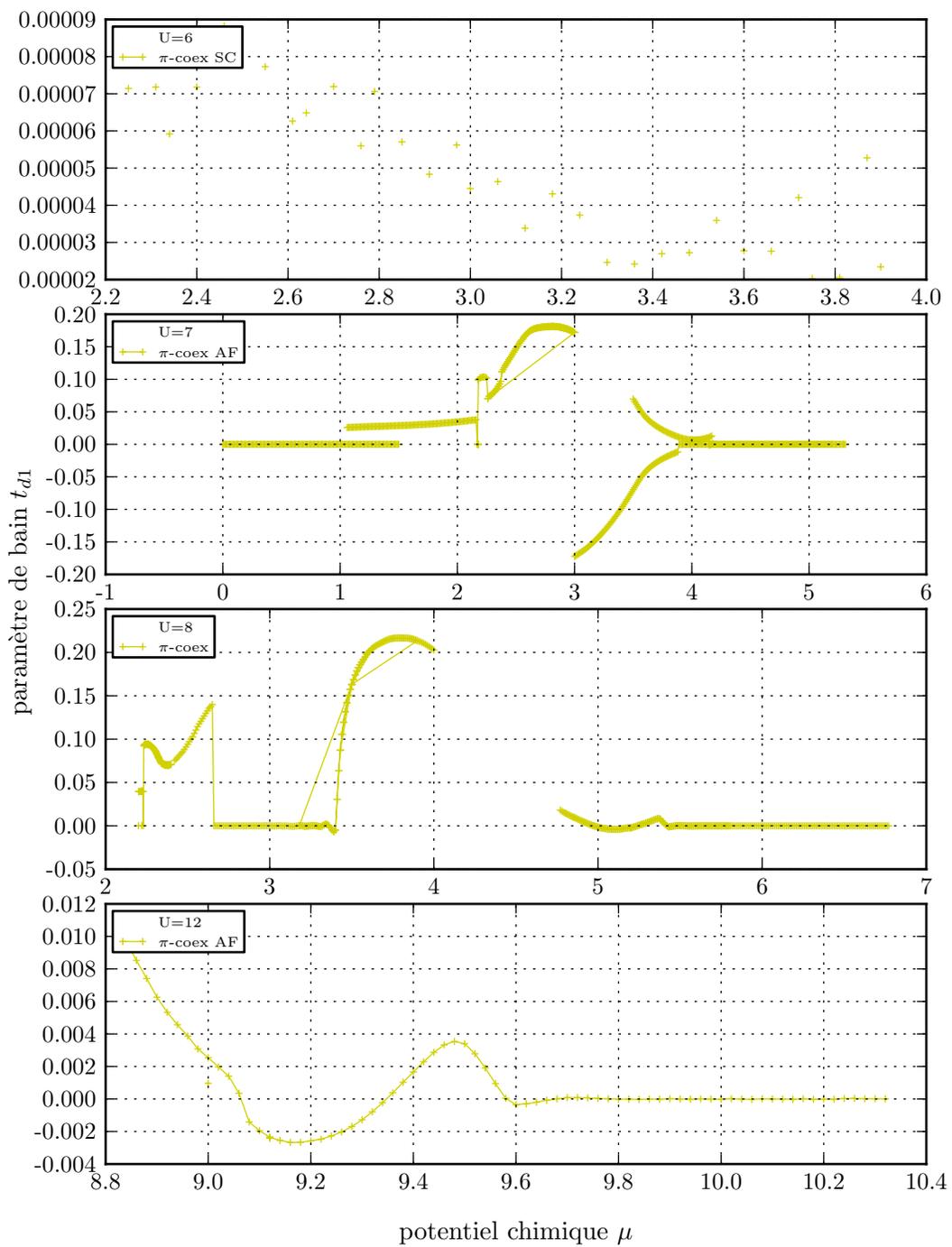
**Figure A.24** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $t_{b_{AF}^2}$



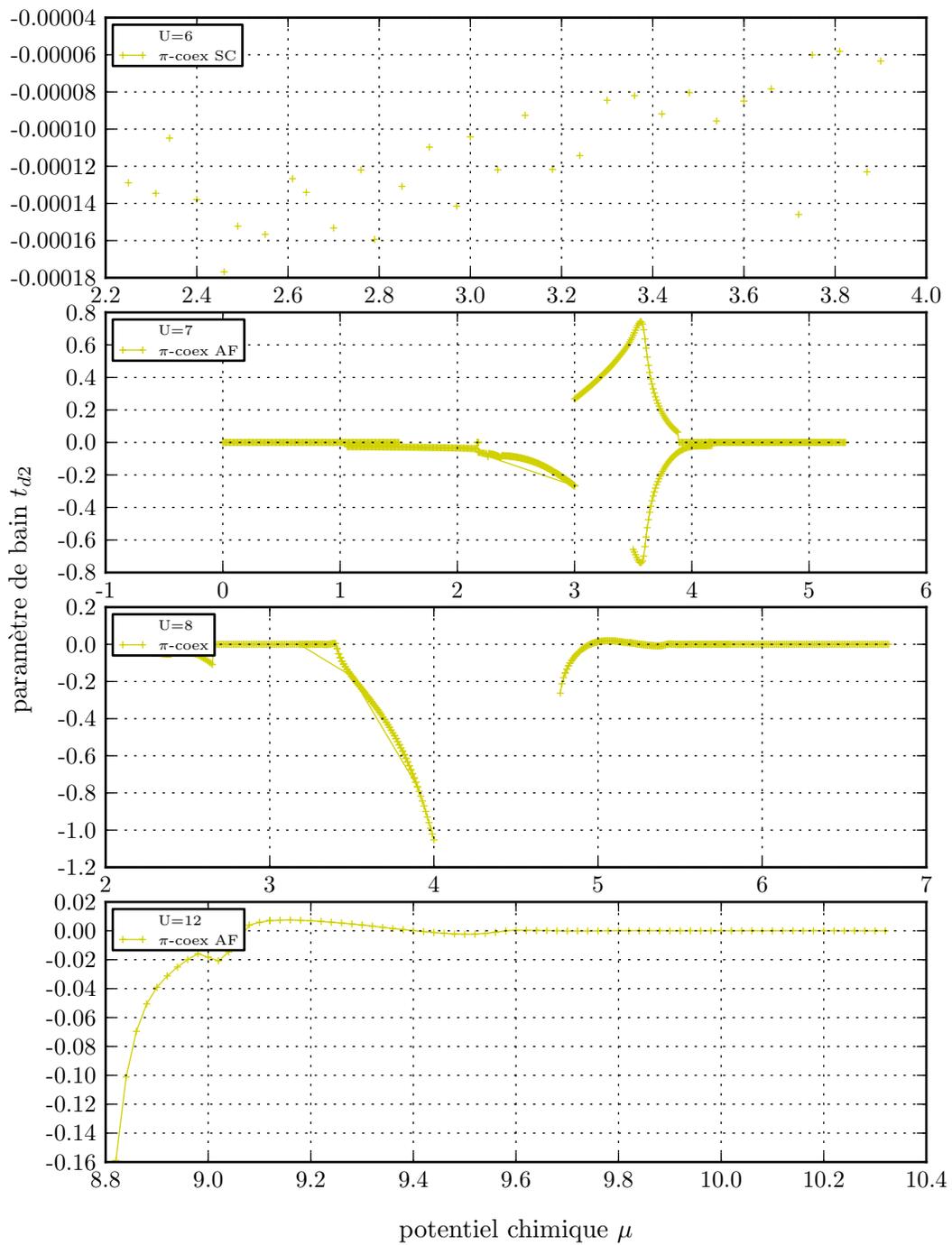
**Figure A.25** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $d_{s1}$



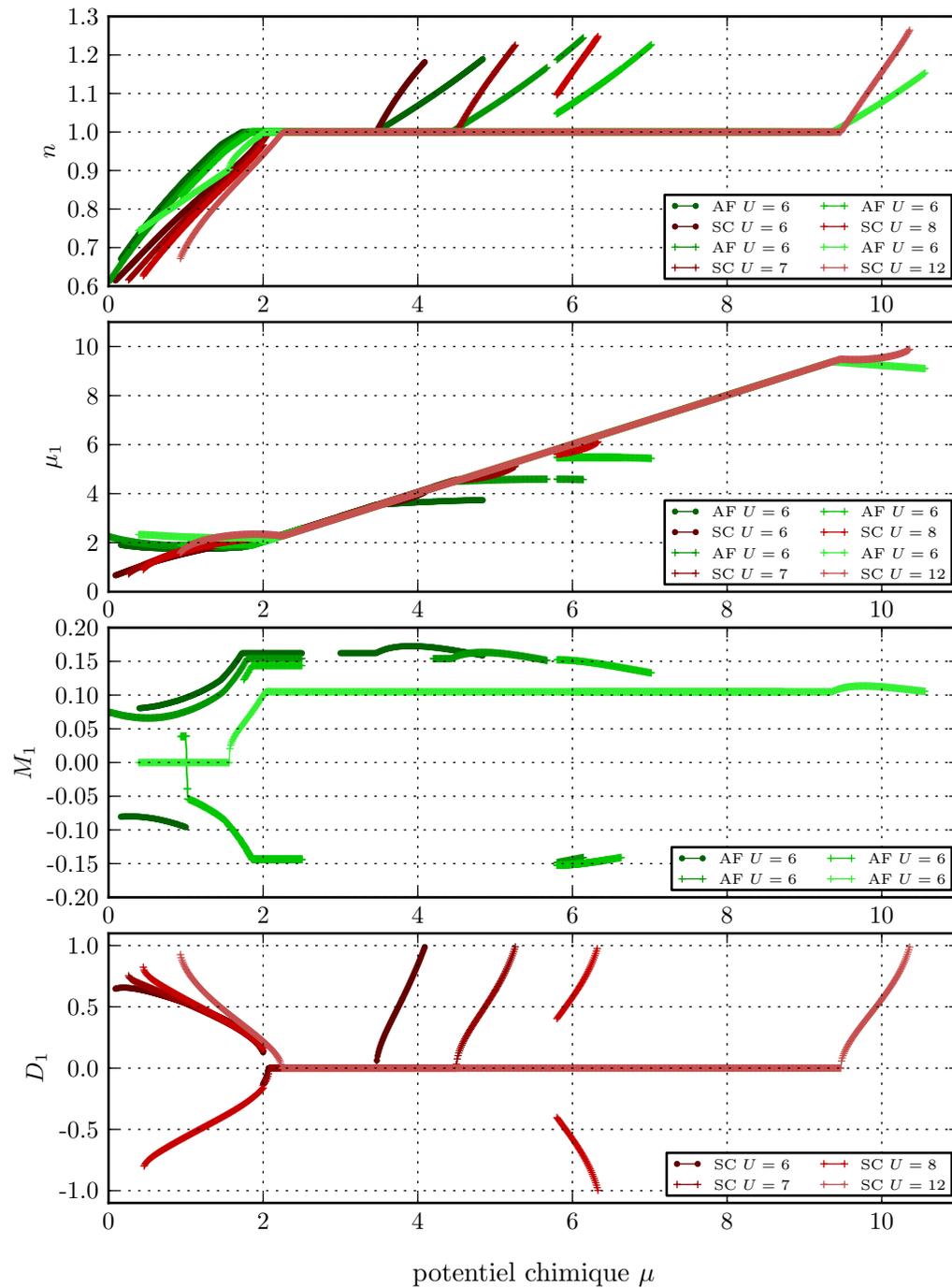
**Figure A.26** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $d_{s2}$



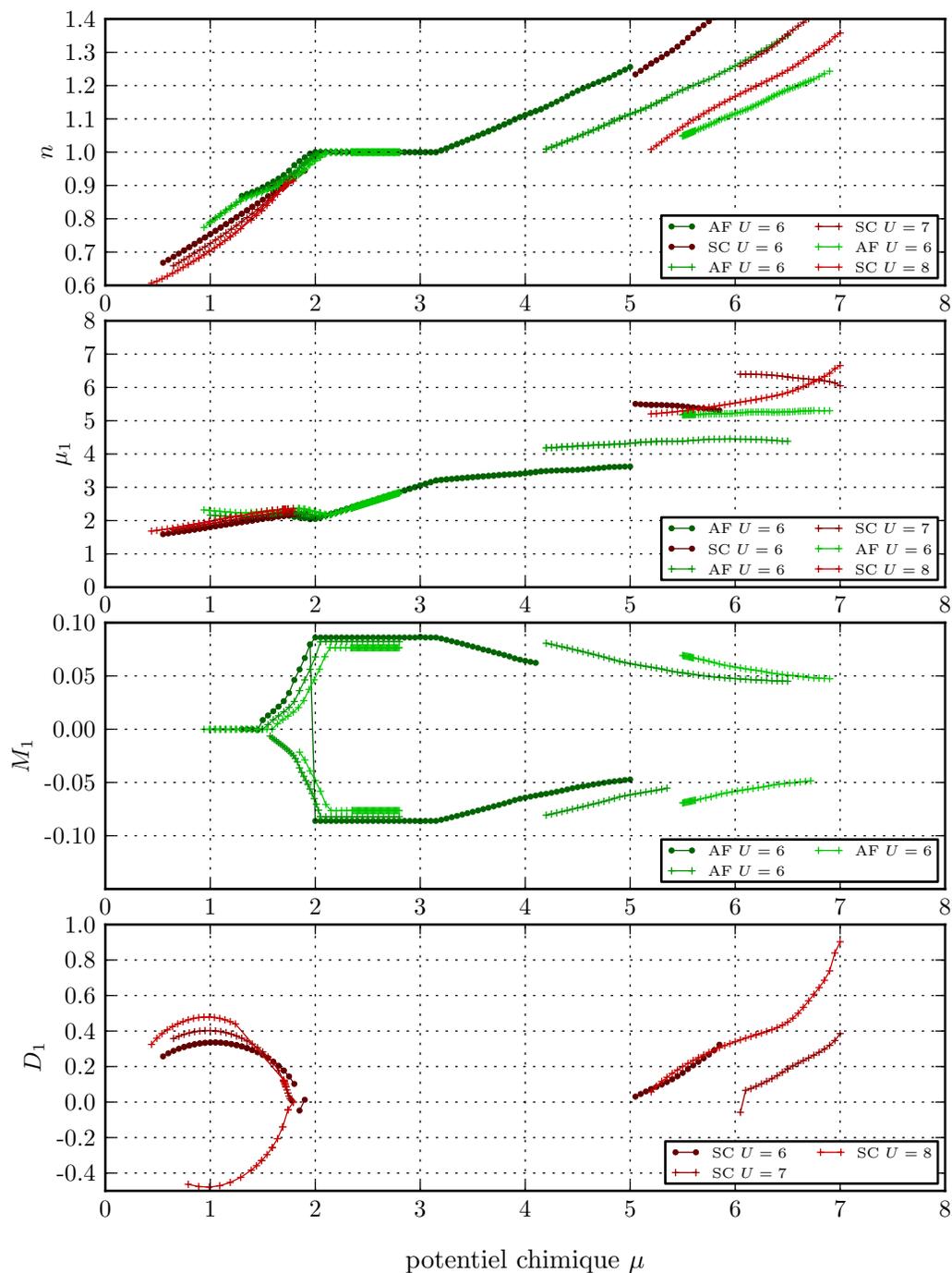
**Figure A.27** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $t_{d1}$



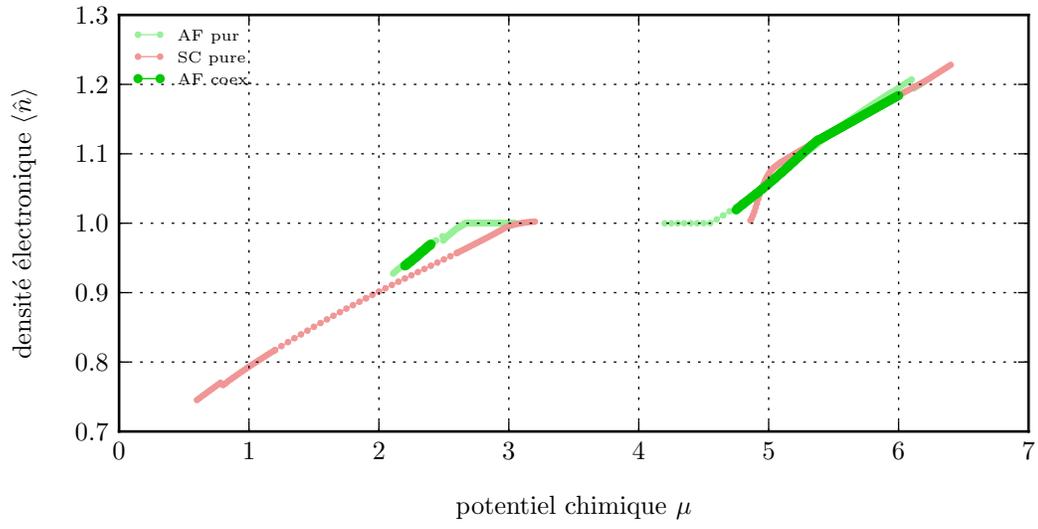
**Figure A.28** CDMFT 2x2, YBCO, variation de  $U$ , paramètre  $t_{d2}$



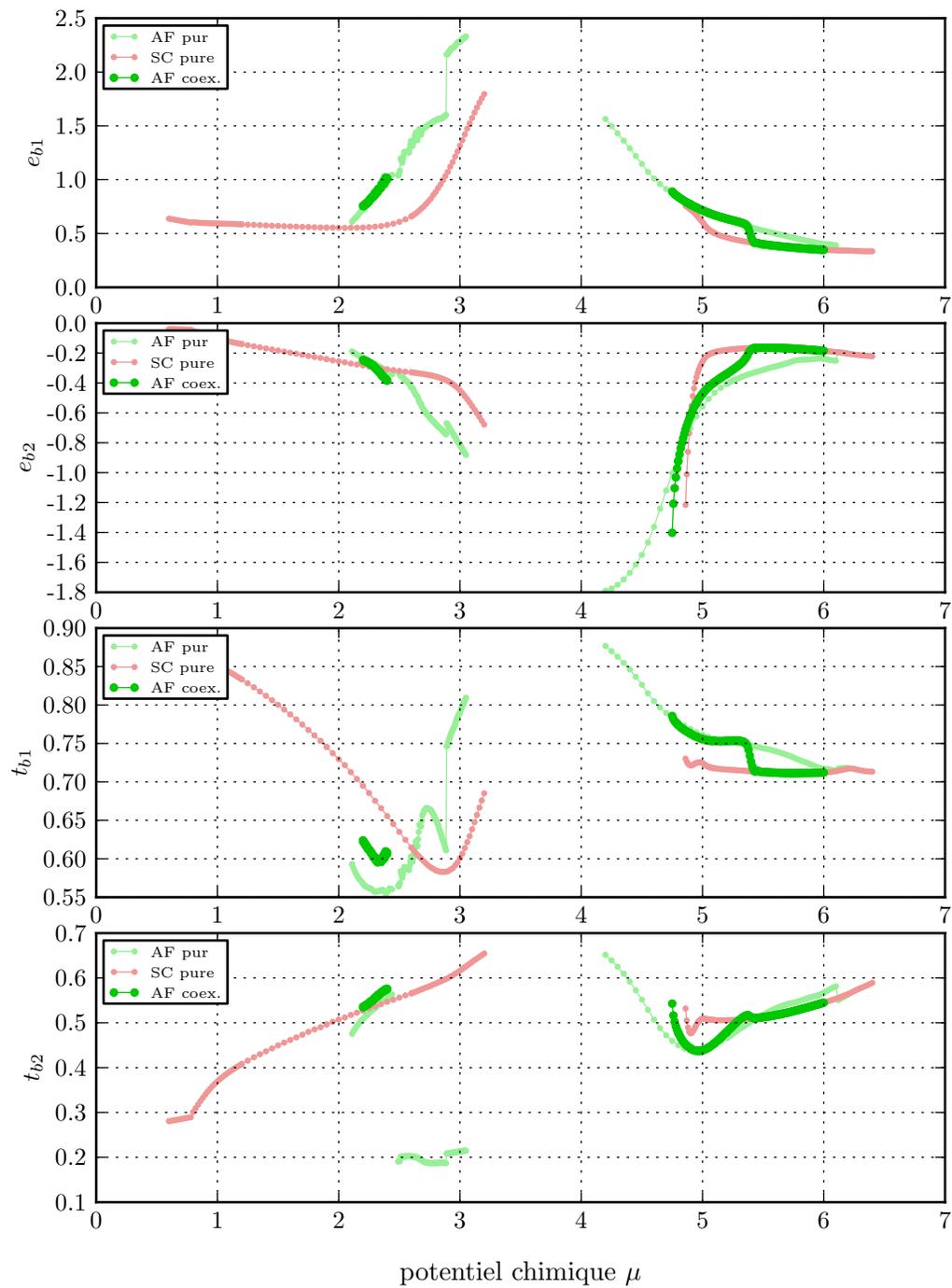
**Figure A.29** VCA 2x2, YBCO, variation de  $U$ , relation  $\langle \hat{n} \rangle - \mu$  et paramètres  $\mu_1$ ,  $M_1$  et  $D_1$



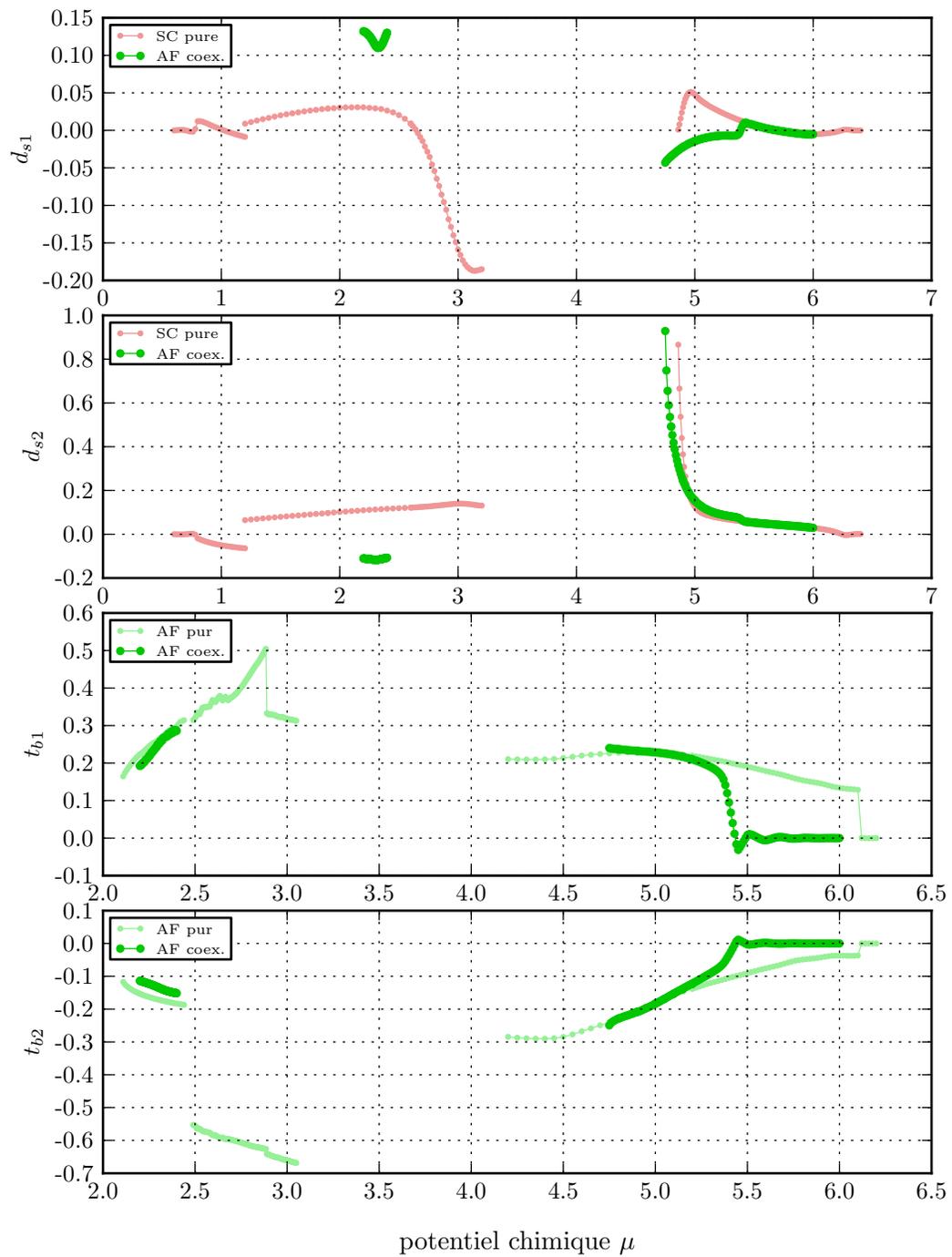
**Figure A.30** VCA 4x3, YBCO, variation de  $U$ , relation  $\langle \hat{n} \rangle - \mu$  et paramètres  $\mu_1$ ,  $M_1$  et  $D_1$



**Figure A.31** CDMFT 2x2, YBCO, sans les  $e_{b_{AF}}$ , relation  $\langle \hat{n} \rangle - \mu$



**Figure A.32** CDMFT 2x2, YBCO, sans les  $e_{b_{AF}}$ , paramètres de bains normaux



**Figure A.33** CDMFT 2x2, YBCO, sans les  $e_{b_{AF}}$ , paramètres  $t_{b_{AF}}$  et  $d_s$

## Bibliographie

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper, et J. R. Schrieffer. *Physical Review* **108**(5), 1175–1204 (1957).
- [2] Stephen Blundell. *Superconductivity : a very short introduction*. Oxford University Press, Oxford ; New York, (2009).
- [3] J. G. Bednorz et K. A. Müller. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**(2), 189–193 (1986).
- [4] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, et C. W. Chu. *Physical Review Letters* **58**(9), 908–910 (1987).
- [5] C. W. Chu, L. Gao, F. Chen, Z. J. Huang, R. L. Meng, et Y. Y. Xue. *Nature* **365**(6444), 323–325 (1993).
- [6] M. R. Norman. *Science* **332**(6026), 196–200 (2011).
- [7] H. Shaked, P.M. Keane, J.C. Rodriguez, F.F. Owen, R.L. Hitterman, et J.D. Jorgensen. *Crystal Structure of the High-Tc Superconducting Copper-Oxides*. Physica C. Elsevier, (1994).
- [8] Akira Iyo, Yasumoto Tanaka, Hijiri Kito, Yasuharu Kodama, Parasharam M. Shirage, Dilip D. Shivagan, Hirofumi Matsuhata, Kazuyasu Tokiwa, et Tsuneo Watanabe. *Journal of the Physical Society of Japan* **76**(9), 094711 (2007).
- [9] Elbio Dagotto. *Reviews of Modern Physics* **66**(3), 763–840 (1994).
- [10] N. D. Mermin et H. Wagner. *Physical Review Letters* **17**(22), 1133–1136 (1966).
- [11] Z.Z. Li, V. Jovanovic, H. Raffy, et S. Megtert. *Physica C : Superconductivity* **469**(2–3), 73–81 (2009).
- [12] J. E. Hirsch. *Physical Review B* **35**(4), 1851–1859 (1987).
- [13] P. R. C. Kent, M. Jarrell, T. A. Maier, et T. Pruschke. *Physical Review B* **72**(6), 060411 (2005).
- [14] P. Monthoux et G. Lonzarich. *Physical Review B* **63**(5) (2001).
- [15] P. Monthoux et G. Lonzarich. *Physical Review B* **66**(22) (2002).
- [16] Nicolas Doiron-Leyraud, Cyril Proust, David LeBoeuf, Julien Levallois, Jean-Baptiste Bonnemaison, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, et Louis Taillefer. *Nature* **447**(7144), 565–568 (2007).

- [17] N. P. Armitage, P. Fournier, et R. L. Greene. *Reviews of Modern Physics* **82**(3), 2421–2487 (2010).
- [18] Subir Sachdev. *physica status solidi (b)* **247**(3), 537–543 (2010).
- [19] P. W. Anderson. *Science* **235**(4793), 1196–1198 (1987). ArticleType : research-article / Full publication date : Mar. 6, 1987 / Copyright © 1987 American Association for the Advancement of Science.
- [20] J. Hubbard. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**(1365), 238–257 (1963).
- [21] F. C. Zhang et T. M. Rice. *Physical Review B* **37**(7), 3759–3761 (1988).
- [22] R. Raimondi, J. H. Jefferson, et L. F. Feiner. *Physical Review B* **53**(13), 8774–8788 (1996).
- [23] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, et O. K. Andersen. *Physical Review Letters* **87**(4), 047003 (2001).
- [24] M. B. J. Meinders, H. Eskes, et G. A. Sawatzky. *Physical Review B* **48**(6), 3916–3926 (1993).
- [25] C. T. Chen, F. Sette, Y. Ma, M. S. Hybertsen, E. B. Stechel, W. M. C. Foulkes, M. Schuller, S-W. Cheong, A. S. Cooper, L. W. Rupp, B. Batlogg, Y. L. Soo, Z. H. Ming, A. Krol, et Y. H. Kao. *Physical Review Letters* **66**(1), 104–107 (1991).
- [26] O.K. Andersen, A.I. Liechtenstein, O. Jepsen, et F. Paulsen. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **56**(12), 1573–1591 (1995).
- [27] D. Sénéchal, A. G. R. Day, V. Bouliane, et A.-M. S. Tremblay. *Physical Review B* **87**(7), 075123 (2013).
- [28] S. Kancharla, B. Kyung, D. Sénéchal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, et A.-M. Tremblay. *Physical Review B* **77**(18) (2008).
- [29] C. Weber, C. Yee, K. Haule, et G. Kotliar. *EPL (Europhysics Letters)* **100**(3), 37001 (2012).
- [30] P. Blaha, K. Schwartz, G. Madsen, D. Kvasnicka, et J. Luitz. *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*. Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, (2001).
- [31] Ivo Souza, Nicola Marzari, et David Vanderbilt. *Physical Review B* **65**(3), 035109 (2001).
- [32] J. R Schrieffer. *Theory of superconductivity*. Advanced Book Program, Perseus Books, Reading, Mass., (1999).
- [33] Michael Tinkham. *Introduction to superconductivity*. Dover Publications, Mineola, N.Y., (2004).
- [34] M. Capone et G. Kotliar. *Physical Review B* **74**(5), 054513 (2006).
- [35] Bumsoo Kyung. *Physical Review B* **62**(13), 9083–9088 (2000).
- [36] Eugene Demler, Werner Hanke, et Shou-Cheng Zhang. *Reviews of Modern Physics* **76**(3), 909–974 (2004).

- [37] George B. Arfken, Hans J. Weber, et Frank E. Harris. *Mathematical Methods For Physicists, 6th Edition*. Academic Press (2005).
- [38] A.-M. S. Tremblay. *Problème à N-Corps (notes de cours)*. Université de Sherbrooke, Sherbrooke, (2011).
- [39] Richard D. Mattuck. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*. Courier Dover Publications, (1976).
- [40] Alexander L. Fetter et John Dirk Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Courier Dover Publications, (2003).
- [41] D. Sénéchal. *arXiv preprint arXiv :0806.2690* (2008).
- [42] David Sénéchal, Danny Perez, et Dany Plouffe. *Physical Review B* **66**(7), 075129 (2002).
- [43] D. Sénéchal. *Strongly Correlated Systems* , 341–371 (2012).
- [44] Gerald D. Mahan. *Many Particle Physics*. Springer (2000).
- [45] Piers Coleman. *Introduction to Many Body Physics (Notes)*. Rutgers University, New Jersey, (2012).
- [46] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, et I. E. Dzyaloshinski. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover Publications, new edition edition (1975).
- [47] M. Potthoff. *Strongly Correlated Systems* , 303–339 (2012).
- [48] J. M. Luttinger et J. C. Ward. *Physical Review* **118**(5), 1417–1427 (1960).
- [49] Ansgar Liebsch et Ning-Hua Tong. *Physical Review B* **80**(16), 165126 (2009).