

Effet des impuretés sur la supraconductivité et l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard

par

Alexandre Foley

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^{er} juillet 2015

Le 1er juillet 2015

le jury a accepté le mémoire de Monsieur Alexandre Foley dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur David Sénéchal
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Louis Taillefer
Membre interne
Département de physique

Professeur René Côté
Président rapporteur
Département de physique

On ne finit pas un projet, on l'abandonne.

-Louis J. Dubé

Sommaire

Nous présentons dans ce document une étude théorique de l'effet d'une impureté répétée sur le modèle de Hubbard à une bande appliqué au YBCO, un cuprate supraconducteur. Pour résoudre approximativement ce problème, on a fait appel à la théorie du champ moyen dynamique sur amas à température nulle. Il s'agit de la première application de cette méthode à l'étude des impuretés dans les cuprates.

Dans ce projet, on se concentre sur trois aspects du problème : le diagramme de phase, la densité d'états locale, et les variations spatiales autour de l'impureté des paramètres d'ordres supraconducteur et antiferromagnétique, de la densité d'électrons et de la moyenne de la densité d'énergie cinétique. Le tout est fait avec un dopage en trous. Les résultats montrent que les dopages critiques des phases sont déplacés par la présence des impuretés. Dans le cas de la supraconductivité, le dopage critique est éloigné du demi-remplissage par la présence de l'impureté, car le réseau demeure un isolant de Mott sur un plus grand domaine de potentiel chimique. Le dopage critique de la phase antiferromagnétique se rapproche du demi-remplissage en présence de l'impureté. Le domaine de dopage où le modèle prédit la coexistence de ces deux phases est donc réduit par la présence d'impuretés. On pourra aussi observer que le gap supraconducteur est plus résilient à la présence d'impuretés que ce que prédit une théorie de champ moyen. Les observables locales quant à elle révèlent la présence, dans le système, de nématicité, une brisure de la symétrie de rotation par 90° .

Remerciements

Merci à David Sénéchal, qui m'a donné la chance de compléter ce projet. Ses connaissances et sa sagesse m'ont éclairé à de multiples reprises. À André-Marie Tremblay, qui m'a initié au formalisme des fonctions de Green. Il est impossible d'avoir une vraie compréhension des méthodes sans bien comprendre celles-ci.

Merci à mes amis. À tous les étudiants que j'ai côtoyés durant mon baccalauréat, vous êtes trop nombreux pour tous vous nommer ici. Un merci particulier à Simon Verret. Sans toi, je n'aurais probablement jamais pensé à l'université de Sherbrooke pour mes études graduées. Merci à Alex Côté, pour tout le plaisir que j'ai eu à travailler sur devoirs et projets en ta compagnie. À Sophie Dufour-Beauséjour, pour être venue à Sherbrooke faire ta maîtrise. Le changement de décor fut plus facile grâce à toi.

Merci à ma famille. À mon père Claude, à ma mère Lise et à mon frère Gabriel pour votre appui inconditionnel tout au long de ma vie.

Finalement, merci à Anne-Marie Roy. Je t'aime.

Table des matières

Sommaire	ii
Introduction	1
1 La supraconductivité et les cuprates	4
1.1 La supraconductivité	4
1.2 Les cuprates	6
1.2.1 Structure cristalline	6
1.2.2 Diagramme de phase typique	7
1.2.3 Dopage et impuretés	8
1.3 Le modèle de Hubbard	9
2 Méthodologie	13
2.1 Les fonctions de Green	13
2.1.1 Application à équation de Schrödinger	14
2.1.2 L'interaction et la self-énergie	15
2.2 La théorie des perturbations sur amas	16
2.2.1 Découpage du réseau en amas	17
2.2.2 Champ Moyen et CPT	19
2.2.3 Fonction de Green sur amas et diagonalisation exacte	19
2.3 Principes variationnels et d'auto-cohérence	21
2.3.1 Expression fonctionnelle du grand potentiel	21
2.3.2 Approximation de l'amas variationnel	23
2.3.3 Champ moyen dynamique sur amas	24
2.4 Les systèmes étudiés	27
2.4.1 Supraconductivité	28
2.4.2 Antiferromagnétisme	31
3 Résultats et analyse	33

3.1	Observables étudiées	34
3.1.1	Diagrammes de phase	34
3.1.2	Densité d'état	34
3.1.3	Observables locales	35
3.2	Diagrammes de phases	36
3.2.1	Système à 9 amas	37
3.2.2	Système à 100 sites	40
3.3	Densité d'états locale	41
3.3.1	Champ moyen	42
3.3.2	Système à 36 sites	43
3.3.3	Système à 100 sites	52
3.3.4	Comparaison avec l'expérience	55
3.4	Observables locales	57
3.4.1	Maille de 36 sites	57
	Conclusion	59
	Bibliographie	64

Introduction

La supraconductivité fut observée pour la première fois en 1911 par Kamerlingh Onnes dans le mercure à une température de 4.16 Kelvin[1]. On découvrit une phase supraconductrice dans plusieurs autres métaux élémentaires par la suite, tous avec une température critique comparable, mais le phénomène demeura sans explication satisfaisante pendant 46 ans. C'est en 1957 que Bardeen, Cooper et Schrieffer partagèrent avec le monde leur théorie microscopique de la supraconductivité[2], qui donnait une explication satisfaisante, bien que pas toujours quantitative, pour tous les matériaux supraconducteurs connus à l'époque. Les raffinements subséquents d'Eliashberg offraient un accord quantitatif pour tous les supraconducteurs connus de l'époque[3, 4]. L'énigme de la supraconductivité semblait enfin résolue. Les supraconducteurs avec une température critique supérieure à 20 Kelvin furent déclarés improbables et ceux à température pièce impossibles.

À l'aide de ces supraconducteurs, plusieurs technologies furent développées, comme l'imagerie par résonance magnétique et des détecteurs de champ magnétique ultrasensibles, mais les applications demeurent limitées par les systèmes de refroidissement complexes, volumineux et dispendieux nécessaires pour maintenir un matériau dans l'état supraconducteur. La découverte d'un supraconducteur à température-pièce simplifierait grandement la mise en application de la supraconductivité et marquerait le début d'une vraie révolution technologique.

La découverte, en 1979, de matériaux organiques et de matériaux à fermions lourds ayant une phase supraconductrice remit notre compréhension de la supraconductivité en question. En 1986, Bednorz et Müller firent la découverte des cuprates, une famille de céramiques supraconductrices. La théorie de BCS est incapable de décrire la supraconductivité dans ces dernières et leur température critique dépassait toutes les attentes[5]. Le cuprate observé par Bednorz et Müller, Lanthane Baryum Cuivre Oxygène (LBCO), a une température critique d'environ 35 Kelvin, et cela prit peu de temps avant qu'un cuprate avec une température de transition supérieure à la température d'ébullition de l'azote liquide soit découvert :

Yttrium Barium Cuivre Oxygène (YBCO) avec une température critique de 93 Kelvin[6]. Depuis, d'autres familles de céramiques supraconductrices à haute température ont été découvertes, notamment les pnictures de fer, mais les cuprates conservent toujours le record de la température critique la plus élevée.

Depuis leur découverte, les cuprates ont été le sujet d'énormément de recherches. De ce fait, nombre de leurs propriétés sont désormais bien connues, mais les mécanismes faisant apparaître la phase supraconductrice dans ces matériaux demeurent sujet d'intenses débats : il n'y a pas encore de théorie qui explique véritablement toutes les propriétés observées.

Les difficultés théoriques dans le traitement de ces matériaux proviennent des très importantes corrélations dans la dynamique des électrons. Les outils traditionnels de la physique de l'état solide, la théorie des bandes et les théories de champs moyens sont inefficaces dans de telles conditions. Ces méthodes de solution échouent à décrire les propriétés les plus simples : elles nous disent que les cuprates devraient être des conducteurs dans leur état normal, alors qu'ils sont isolants. Ce caractère isolant est dû aux fortes corrélations entre les électrons : ce sont des isolants de Mott. Des méthodes de solutions plus adaptées aux particularités du problème ont été développées, notamment les méthodes dites d'«amas quantiques».

Les cuprates sont des matériaux qui exhibent de la supraconductivité lorsqu'ils sont dopés en électrons ou en trous. Les dopants sont aussi des impuretés, des défauts dans le réseau cristallin du matériau, ce qui implique aussi une certaine mesure de désordre. La présence d'impuretés ou de désordre dans un modèle ajoute d'autres difficultés dans le traitement théorique d'un système. Il n'y a pas en ce moment de méthodes bien établies capables de traiter à la fois les fortes corrélations et des impuretés. En effet, les méthodes habituelles pour traiter les impuretés, comme le formalisme de la matrice T ou encore le modèle d'impureté d'Anderson[7, 8], supposent que la bande dans laquelle l'impureté est plongée est non-corrélée. C'est pour cela qu'on utilise une extension pour les systèmes inhomogènes des méthodes d'amas quantiques.

Ce mémoire se veut une humble contribution aux efforts faits dans le but de comprendre la dynamique des électrons dans ces matériaux ayant une phase supraconductrice à haute température. L'objectif principal de ce projet est de calculer le diagramme de phase en fonction du dopage en trous du modèle de Hubbard en présence d'une impureté, en utilisant une structure de bande et une répulsion coulombienne raisonnable pour les cuprates. Pour obtenir les résultats, deux méthodes de calcul ont été utilisées : le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) et l'approximation de l'amas variationnel (VCA).

Le premier chapitre présente les propriétés des cuprates et justifie l'usage du modèle de Hubbard pour les modéliser. Le second présente les méthodes utilisées pour obtenir les solutions. Et finalement, le troisième chapitre présente les résultats obtenus et leur analyse.

Chapitre 1

La supraconductivité et les cuprates

1.1 La supraconductivité

La supraconductivité est une phase de la matière dans laquelle on peut observer une résistance électrique nulle au courant direct et une expulsion des champs magnétiques. Cette phase est observée, pour l'instant, seulement à des températures très basses. Le supraconducteur connu ayant la température critique à pression normale la plus haute au moment de rédiger ce texte est $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-\delta}$ avec une température critique maximale de 133 K, ou -140.15°C .

L'expulsion du champ magnétique, nommé l'effet Meissner, se fait par l'établissement d'un courant à la surface du supraconducteur. La résistivité nulle est en fait une conséquence de l'effet Meissner, car l'expulsion complète du champ magnétique nécessite l'existence de courants permanents à la surface du supraconducteur, alors que le contraire n'est pas vrai : une conductivité parfaite ne nécessite pas l'expulsion du champ magnétique, mais seulement qu'il soit constant dans le temps à l'intérieur du matériau. Ces courants de surface existent sur une profondeur caractéristique, la longueur de pénétration de London. Cette longueur est aussi la distance sur laquelle un champ magnétique peut pénétrer un solide supraconducteur.

La théorie microscopique de Bardeen, Cooper et Schrieffer nous explique que la supraconductivité est causée par la condensation de bosons composites chargés, les paires de Cooper, en un suprafluide. Ces paires de Cooper sont des paires d'électrons liés par une interaction effective portée par les phonons du cristal. Les paires de Cooper occupent un volume qui a un impact important sur les caractéristiques de la phase ; ce volume est

intimement relié à la longueur de cohérence supraconductrice. Le rapport de cette longueur de cohérence à la longueur de pénétration de London détermine si le supraconducteur est de type *I* ou de type *II*.

Les deux types diffèrent dans la façon dont ils expulsent les champs magnétiques. Les supraconducteurs de type *I* expulsent de façon complète le champ, ne permettant la pénétration qu'aux frontières du solide avec le milieu environnant. Les supraconducteurs de type *II* sont quant à eux capables d'accommoder un champ magnétique à l'intérieur du solide qui héberge le fluide d'électrons supraconducteur. Pour ces supraconducteurs, il est énergétiquement favorable de former des zones de phase normale dans lesquelles le champ magnétique peut passer. Ces zones sont communément nommées vortex en vertu des courants qui se forment autour. Chacune de ces zones normales est traversée par un flux magnétique quantifié, soit $\phi = \frac{h}{2e}$ ou h est la constante de Planck et e la charge de l'électron. De plus, les vortex forment un réseau cristallin, de structure triangulaire dans la plupart des cas.

Ces propriétés peuvent être expliquées et décrites pour les supraconducteurs dits *conventionnels*, pour la plupart des alliages métalliques et des métaux élémentaires, par la théorie microscopique de BCS ou la théorie phénoménologique de Ginzburg et Landau. La théorie de Ginzburg et Landau se prête mieux aux calculs nécessaires à une description quantitative de nombreuses propriétés, notamment le type du supraconducteur, mais ne nous renseigne aucunement sur les mécanismes menant à la formation de la phase supraconductrice. Cette théorie de champ effectif est parfaitement compatible avec la théorie de BCS [9]. Ces théories nous permettent d'affirmer que la supraconductivité est un phénomène quantique macroscopique ; une fonction d'onde unique nous permet de décrire tous les électrons supraconducteurs d'un échantillon de matériau donné.

Les prédictions de la théorie BCS au sujet de supraconducteur sont basées sur des calculs de champ moyen. En général, de telles théories échouent à décrire quantitativement les transitions de phase, car elles ignorent les effets des fluctuations sur l'ordre qui s'établit près de la transition. Le fait qu'il y ait autant de matériaux supraconducteurs qui sont adéquatement décrits par la théorie BCS est, à posteriori, plutôt surprenant. Trois groupes de matériaux qui ne sont pas adéquatement décrits par cette théorie sont les suivants : les supraconducteurs organiques, les fermions lourds et les cuprates.

1.2 Les cuprates

Dans le contexte de l'étude de la supraconductivité, le nom cuprate désigne une famille de céramiques d'oxydes de cuivre ayant des températures critiques très élevées, qui vont d'environ 30K à environ 150K. Dans tous les cuprates, la phase supraconductrice apparaît à proximité d'une phase isolante antiferromagnétique, contrairement aux supraconducteurs conventionnels qui sont à proximité d'une phase métallique. Presque tous les composés stœchiométriques exhibent uniquement la phase isolante, la phase supraconductrice n'est révélée que par l'ajout d'atomes dopant aux cristaux. La théorie des bandes échoue à décrire l'aspect isolant de la phase normale et à expliquer le mécanisme d'appariement des paires de Cooper. Cette théorie néglige complètement l'interaction entre les électrons, laquelle est très importante dans les cuprates.

1.2.1 Structure cristalline

Cette famille de matériaux est caractérisée par la présence de plans de CuO_2 à l'intérieur desquels la dynamique pertinente des électrons est confinée. Ces plans d'oxyde de cuivre sont séparés par des couches plus isolantes. Ces dernières sont généralement composées de métaux lourds, de terres rares ou d'éléments alcalino-terreux en plus de l'oxygène et du cuivre.

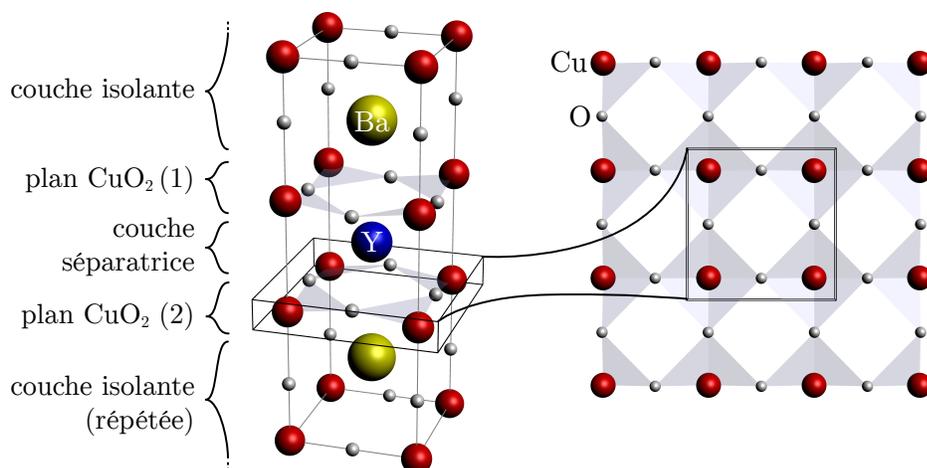


FIGURE 1.1 Maille élémentaire de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, de structure orthorhombique. Deux plans de CuO_2 sont séparés par une couche d'yttrium. Ces paires de plans sont séparées par du baryum, de l'oxygène et des chaînes de CuO . [10]

1.2.2 Diagramme de phase typique

Les diagrammes de phases des différents cuprates sont qualitativement très semblables, de telle sorte qu'on qualifie souvent le diagramme de phase des cuprates d'*universel*. Lorsque les plans de CuO_2 sont demi-remplis, c'est-à-dire qu'il y a en moyenne 1 électron par site de cuivre, les cuprates sont des isolants antiferromagnétiques. Sous l'effet d'un dopage en électrons ou en trous, la phase antiferromagnétique s'affaiblit jusqu'à disparaître et une phase supraconductrice de type 2 émerge.

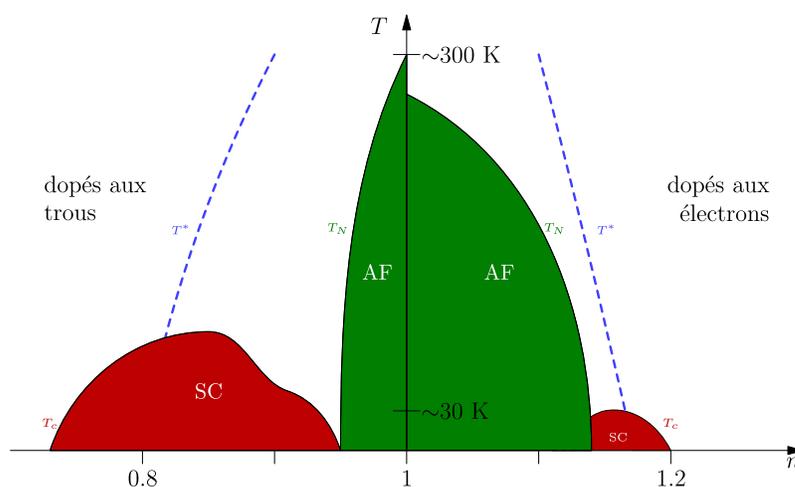


FIGURE 1.2 Diagramme de phase température-densité typique des cuprates pour les phases antiferromagnétique (AF) et supraconductrice (SC). T^* marque l'apparition du régime pseudogap dont les causes et les mécanismes sont encore controversés.[11]

Les dopages critiques varient peu d'un composé à l'autre. La phase antiferromagnétique disparaît aux environs de 5% de dopage en trous et la phase supraconductrice apparaît avec un peu plus de trous. Du côté dopé en trous les deux phases sont bien séparées. Du côté dopé aux électrons, la phase antiferromagnétique persiste un peu au-delà de 10% de dopage en électrons.

Au-dessus des températures critiques des phases antiferromagnétique et supraconductrice, une suppression partielle de la densité d'état électronique près de l'énergie de Fermi se produit : c'est ce que l'on nomme le régime pseudogap.

Des études expérimentales ont permis de déterminer que le paramètre d'ordre supraconducteur des cuprates répond à la symétrie des orbitales atomiques d [12]. La symétrie du paramètre d'ordre correspond directement à la symétrie de la fonction d'onde d'une paire de Cooper. Cette symétrie du paramètre d'ordre est une des façons par laquelle les cuprates diffèrent des supraconducteurs conventionnels. Dans ces derniers, le paramètre

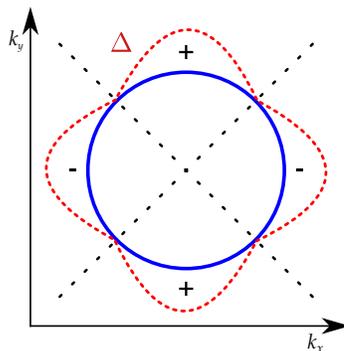


FIGURE 1.3 Caricature du gap supraconducteur *d-wave* dans la zone de Brillouin. Le cercle bleu représente la surface de Fermi, le trait pointillé rouge l'amplitude du paramètre d'ordre, dont la phase change de signe lorsqu'il traverse les frontières marquées par les pointillés noirs.

d'ordre supraconducteur a plutôt une symétrie sphérique.

1.2.3 Dopage et impuretés

Pour que les cuprates soient supraconducteurs, on doit introduire des impuretés dans les cristaux pour changer la densité d'électrons dans les plans d'oxyde de cuivre. Ce faisant, on introduit des potentiels locaux sur lesquels les électrons peuvent être diffusés. Dans une théorie de champ moyen, un paramètre d'ordre supraconducteur de symétrie *d* est très négativement affecté par la présence de potentiels de diffusion, contrairement aux supraconducteurs de symétrie *s*. Cette différence provient du fait que la diffusion d'électrons entre des états qui contribuent avec des phases différentes au paramètre d'ordre brise les paires de Cooper. Or, dans un supraconducteur de type *s*, le paramètre d'ordre a la même phase pour tous les vecteurs d'ondes, contrairement au supraconducteur *d*, dont la phase change de signe le long des axes $k_x \pm k_y = 0$.

Mais la supraconductivité dans les cuprates n'est pas décrite de façon satisfaisante par des théories de champ moyen. Pour bien comprendre l'impact des impuretés sur ces systèmes, on doit donc faire appel à des méthodes capables de tenir compte des fortes corrélations des électrons en plus de la présence d'impuretés.

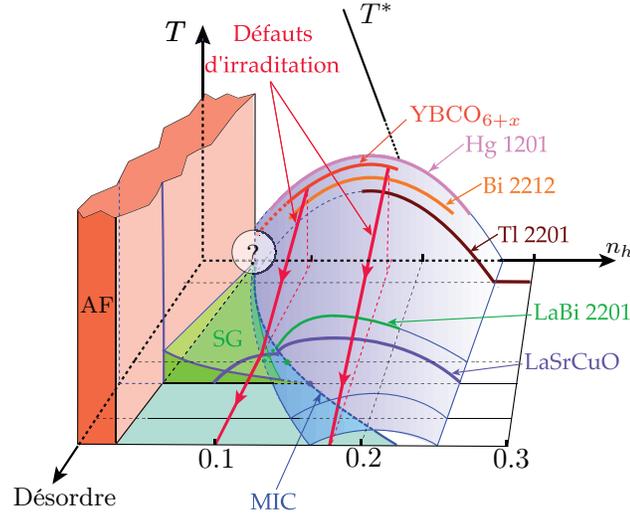


FIGURE 1.4 Diagramme de phase schématique des cuprates, température critique en fonction du dopage en trous n_h et du désordre[8]. Le volume orange représente la phase antiferromagnétique et le volume violet la phase supraconductrice. Le pseudogap est indiqué par la ligne noire et n'est pas affecté par le désordre[13]. La région verte représente une phase magnétique désordonnée semblable à un verre de spin. Les lignes rouges montrent les trajectoires suivies par les échantillons YBCO_{6.6} et YBCO₇ sous l'effet d'une irradiation par des électrons de 2.5 MeV. Les différents systèmes sont ordonnés selon leur T_c optimal. Les dopages en trous sont estimés empiriquement grâce à une correspondance avec le $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ pour lequel $n_h = x$ [14], excepté pour LA-Bi2201. Pour ce dernier, le dopage est déduit de mesures du pouvoir thermoélectrique[15]. La ligne identifiée «MIC» indique l'endroit où l'auteur place le passage (angl. : *crossover*) métal-isolant.

1.3 Le modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard est le modèle le plus simple pouvant inclure les interactions dans un réseau cristallin. Il s'agit d'un modèle à liaison forte incluant l'interaction uniquement pour les électrons occupant le même site. Habituellement exprimé dans la base des fonctions de Wannier, le hamiltonien de ce modèle se réduit à celui de la théorie des bandes si le terme d'interaction est nul. Le hamiltonien de ce modèle, exprimé dans le formalisme de la deuxième quantification, dans la base des orbitales de Wannier, est le suivant :

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

Le premier terme, qu'on nomme le terme de sauts, provient des contributions de l'énergie cinétique des électrons au hamiltonien. Le module de l'élément de matrice t_{ij} représente l'amplitude de probabilité qu'un électron saute du site i au site j ou vice-versa. Ce terme

favorise la délocalisation des électrons. Le second est le terme d'interaction, limité aux électrons de spins opposés occupant le même site. Le coefficient U est le coût en énergie (un gain si U est négatif) lorsque deux électrons occupent le même site. En vertu du principe d'exclusion de Pauli, deux électrons ne peuvent occuper le même état et donc les seules contributions possibles proviennent d'électrons de spins opposés. Si le coefficient U est nul, on retrouve alors un hamiltonien de la théorie des bandes dans une base d'états localisés, et la base des états propres est simplement la transformée de Fourier de celle utilisée dans l'expression (1.1). Dans ce formalisme, la géométrie du réseau est encodée dans la matrice de sauts t . Une géométrie différente se traduira par des valeurs relatives différentes des amplitudes de saut.

On justifie l'usage d'une interaction aussi restreinte presque de la même façon que l'on justifie son absence dans la théorie des bandes : les électrons considérés dans le modèle sont en fait des quasi-particules pour lesquelles l'interaction est fortement écrantée, à tel point qu'il y a interaction uniquement lorsqu'elles occupent le même site. La différence avec la théorie des bandes provient du volume qu'occupent les orbitales atomiques des atomes qui forment le réseau. Si ces orbitales occupent un grand volume, U sera petit, voire négligeable, en comparaison avec l'énergie cinétique des électrons du cristal. Dans ce cas, la théorie des bandes donne des résultats raisonnables. Par contre, si les orbitales occupent un petit volume, le coût de la double occupation sera grand et le modèle de Hubbard nécessaire. C'est le cas dans l'orbitale de valence des atomes de cuivre des cuprates. Il est donc important de tenir compte de l'interaction dans ceux-ci.

Le modèle de Hubbard est très difficile à résoudre, autant numériquement qu'analytiquement. La difficulté provient du fait que le terme d'interaction est diagonal dans la base des positions, tandis que le terme d'énergie cinétique est diagonal dans la base des quantités de mouvement. Il n'y a pas de méthode générale pour diagonaliser de tels systèmes. Si on souhaite approcher le problème numériquement, on est alors forcé de résoudre des systèmes finis de taille très limitée, puisque la taille de l'espace d'Hilbert du hamiltonien croît exponentiellement avec le nombre de sites.

Un des premiers arguments utilisés pour justifier l'usage du modèle de Hubbard pour modéliser les cuprates est qu'un traitement perturbatif à couplage fort au demi-remplissage montre que la solution est un isolant antiferromagnétique tout comme les cuprates, alors que les calculs de structure de bande prédisent un état métallique. Si l'on traite les sauts entre les sites comme des perturbations, on trouve alors que le fondamental non perturbé est la simple occupation de tout les sites, avec une orientation aléatoire des spins. Il s'agit d'un fondamental très fortement dégénéré : il y en a 2^N ou N est le nombre de sites. Pour que tous les sites puissent demeurer simplement occupés, il faut que deux électrons échangent leur

position, ou encore qu'un électron fasse un aller-retour sur un des sites voisins. La première correction à l'énergie est donc au deuxième ordre. On trouve que le hamiltonien effectif dans le sous-espace du fondamental est

$$H_{\text{eff}} = \sum_{ij} \frac{4t_{ij}^2}{U} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

Il s'agit du hamiltonien du modèle de Heisenberg. Il est généralement accepté que le fondamental de ce hamiltonien est antiferromagnétique lorsque le coefficient est positif et que le terme au premier voisin domine.

En une dimension, l'ansatz de Bethe peut être utilisé pour obtenir une solution analytique sous certaines conditions [16]. Cette solution nous montre qu'en une dimension le modèle est un isolant pour toute valeur d'interaction non nulle. En dimension infinie, la solution obtenue de la théorie du champ moyen dynamique a été démontrée exacte [17]. Dans cette limite, il y a une valeur critique de U à laquelle une transition d'un métal vers un isolant se produit. Il s'agit d'une transition du premier ordre.

Avec n'importe quel autre nombre de dimensions, il est impossible d'obtenir une solution exacte pour un réseau infini. Mais tout n'est pas perdu, puisque la solution d'un système fini peut servir de point de départ pour obtenir une solution approximative d'un système plus grand grâce à des méthodes comme l'approximation de l'amas variationnel ou encore le champ moyen dynamique sur amas.

Avec un nombre restreint de paramètres, on peut reproduire qualitativement le diagramme de phase des cuprates. On peut voir à la figure 1.5 qu'avec seulement les sauts aux premiers (t), deuxièmes (t') et troisièmes voisins (t''), en plus de l'interaction sur les sites, la phase antiferromagnétique ainsi que la supraconductivité de symétrie d sont présentes et ont une dépendance en dopage similaire à celles qui sont observées. La phase antiferromagnétique est isolante et, lorsque le matériau est demi-rempli, un grand gap dont la grandeur est de l'ordre de U est présent parce qu'il s'agit d'un isolant de Mott.

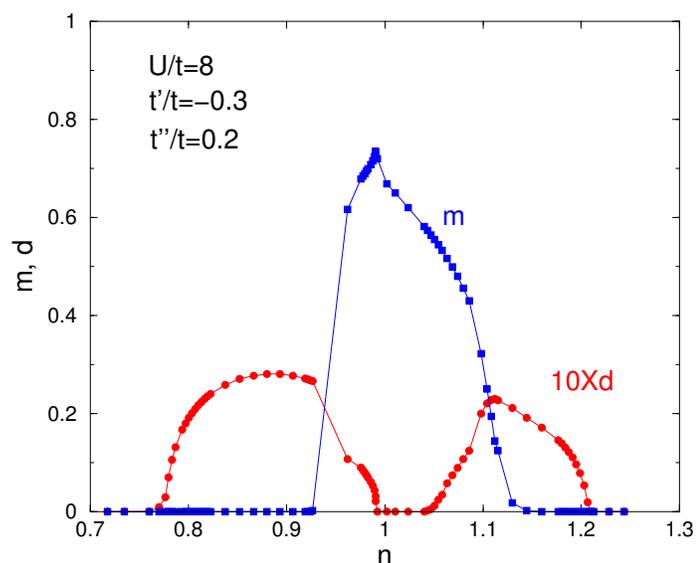


FIGURE 1.5 Diagramme de phases avec compétition entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité[18]. Sur l'axe horizontal est la densité d'électrons sur les sites de cuivres et sur l'axe vertical sont les paramètres d'ordres. En bleu, la phase antiferromagnétique, en rouge, la phase supraconductrice. Notez le facteur 10 pour le paramètre d'ordre supraconducteur. Les valeurs des paramètres utilisés correspondent à une approximation raisonnable du matériau YBCO dans le modèle de Hubbard. Ces données sont obtenues à l'aide du champ moyen dynamique sur amas. Voir la sous-section 3.1.1 pour une explication de la relation entre paramètre d'ordre et température critique.

Chapitre 2

Méthodologie

2.1 Les fonctions de Green

La fonction de Green, ou le propagateur, est un objet mathématique inventé par George Green en 1841 dans le but de résoudre des équations différentielles linéaires avec des termes sources. Pour un opérateur différentiel L_r agissant sur un ensemble de variables $\{r_i\}$, une fonction solution $f(r)$ et un terme de source $y(r)$, l'équation différentielle est alors :

$$L_r f(r) = \sum_{i,n} l_{i,n}(r) \frac{\partial^n}{\partial r_i^n} f(r) = y(r) \quad (2.1)$$

La fonction de Green $G(r)$ est alors définie par

$$L_r G(r' - r) \equiv \delta(r' - r) \quad (2.2)$$

et on peut trouver la solution à l'équation différentielle par la convolution suivante :

$$f(r) = \int dr' G(r' - r) y(r') \quad (2.3)$$

Ce formalisme est aussi applicable aux équations intégro-différentielles, et ce sans aucune modification. En fait, la propriété centrale de l'opérateur L_r est sa linéarité.

2.1.1 Application à équation de Schrödinger

L'utilité de cet objet mathématique n'est pas évidente dans le contexte de la mécanique quantique; l'équation de Schrödinger est toujours homogène et l'équation (2.3) conséquemment inutile. Son utilité devient plus claire lorsque l'on inspecte l'équation de Schrödinger sans interaction dans le formalisme de la deuxième quantification. Avec un système d'unités ou $\hbar = 1$, l'opérateur différentiel de l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\mathbf{S}_0 = i \frac{\partial}{\partial t} - \iint dr dr' H_0(r, r') \Psi^\dagger(r, 0) \Psi(r', 0) \quad (2.4)$$

Où $H_0(r, r')$ est l'élément de matrice d'un hamiltonien sans interaction et $\Psi(r, t)$ l'opérateur de champs fermionique détruisant une particule à la position r au temps t . Considérant $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$ l'anti-commutateur de deux opérateurs et $\theta(t)$ la marche unitaire, on trouve que l'expression

$$G(r, r'; t) = -i \langle \{\Psi(r, t), \Psi^\dagger(r', 0)\} \rangle \theta(t) \quad (2.5)$$

est la solution de l'équation intégral-différentiel suivante

$$\int d^3 r'' [i \delta(r'' - r) \frac{\partial}{\partial t} - H_0(r, r'')] G_0(r'', r'; t) = \delta(r' - r) \delta(t) \quad (2.6)$$

Si l'on interprète l'intégrale dans cette équation comme un produit matriciel, la quantité entre crochets est alors l'inverse multiplicatif de la fonction de Green $G_0^{-1}(r, r'; t)$. La valeur moyenne dans (2.5) est prise sur un ensemble thermodynamique à température finie, ou dans l'état fondamental à température nulle. Dans le cas des bosons, il faudrait simplement remplacer l'anti-commutateur par un commutateur.

Si l'on se concentre sur le cas à température nulle, on peut aisément démontrer que la transformée de Fourier sur le temps de la fonction de Green est

$$G(r', r; \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_n \langle \Omega | \Psi(r) | n \rangle \frac{1}{E_0 - E_n + \omega - i\eta} \langle n | \Psi^\dagger(r') | \Omega \rangle + \langle \Omega | \Psi^\dagger(r') | n \rangle \frac{1}{E_n - E_0 + \omega - i\eta} \langle n | \Psi(r) | \Omega \rangle \quad (2.7)$$

où $|\Omega\rangle$ est l'état fondamental du système et $|n\rangle$ est le n^e état propre du système, incluant le fondamental. C'est sous cette forme qu'une identité très utile peut être obtenue. En intégrant sur le plan complexe les fréquences le long d'un trajet fermé \mathcal{C} choisi de façon à inclure uniquement les pôles du deuxième terme, on peut obtenir une quantité fort utile au calcul

de la valeur moyenne de tout opérateur à un corps \mathcal{O} :

$$\mathcal{O} \equiv \iint dr dr' \mathcal{O}(r, r') \Psi^\dagger(r') \Psi(r) \quad (2.8)$$

$$\oint_C \frac{d\omega}{2\pi i} G(r', r; \omega) = \langle \Psi^\dagger(r') \Psi(r) \rangle \quad (2.9)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \iint dr dr' \mathcal{O}(r, r') \oint_C \frac{d\omega}{2\pi i} G(r', r; \omega) \quad (2.10)$$

Dans le cas d'une température finie, la formulation de Matsubara des fonctions de Green permet d'obtenir une identité équivalente à (2.10) qui fonctionne en toutes situations d'équilibre thermodynamique. Cette formulation n'est pas nécessaire dans ce travail, car tous les calculs sont faits à température nulle.

2.1.2 L'interaction et la self-énergie

Lorsqu'un terme d'interaction est ajouté au hamiltonien d'un système, comme c'est le cas dans le model de Hubbard, l'équation (2.5) ne répond plus à l'identité (2.2) lorsque l'équation différentielle est l'équation de Schrödinger. Malgré cela, (2.5) demeure la définition utilisée pour les fonctions de Green dans le cadre de la mécanique quantique et des théories de champs. En effet, comme les identités (2.7), (2.10) et (2.9) ne dépendent pas des détails du hamiltonien, cette définition demeure utile pour faire des prédictions au sujet d'observables à un corps, celles qui nous intéressent dans la plupart des cas.

Étant donné un hamiltonien avec un terme d'interaction à deux corps :

$$H = H_0 + \iint d^3r_1 d^3r_2 V(r_1, r_2) \Psi^\dagger(r_1) \Psi^\dagger(r_2) \Psi(r_2) \Psi(r_1) \quad (2.11)$$

La fonction de Green telle que définie par (2.5) n'est pas la fonction de Green de l'équation de Schrödinger, mais celle d'une équation integro-différentielle connexe à l'équation de Schrödinger :

$$\int d^3r'' [G_0^{-1}(r', r'', \omega) - \Sigma(r', r'', \omega)] G(r'', r, \omega) = \delta(r' - r) \quad (2.12)$$

Dans cette équation G_0^{-1} est défini par (2.6) et la self-énergie, Σ , par cette équation

$$\begin{aligned} \Sigma(r, r', \omega) \equiv & \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \iint d^3 r'' d^3 r_1 V(r'', r_1) \\ & \times \left[\sum_n \frac{\langle \Omega | \Psi^\dagger(r_1) \Psi(r_1) \Psi(r') | n \rangle \langle n | \Psi^\dagger(r'') | \Omega \rangle}{E_0 - E_n + \omega - i\eta} \right. \\ & \left. + \frac{\langle \Omega | \langle n | \Psi^\dagger(r'') | n \rangle \langle n | \Psi^\dagger(r_1) \Psi(r_1) \Psi(r') | \Omega \rangle}{E_n - E_0 + \omega - i\eta} \right] \\ & \times G^{-1}(r'', r, \omega). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Cet opérateur encode l'impact de l'interaction entre les particules sur leur propagation et l'impact de leur propagation sur l'énergie d'interaction. Comme on peut le constater en inspectant la définition de la self-énergie (2.13), on en peut extraire la valeur moyenne de l'interaction. On fait cela en utilisant le même parcours d'intégration sur les fréquences que pour l'équation (2.9), c'est-à-dire un parcours encerclant les pôles situés aux fréquences négatives, sur le produit matriciel de la self-énergie avec la fonction de Green et en prenant la trace de l'objet résultant :

$$\langle \mathbf{V} \rangle = \iint \oint_c \Sigma(r, r'; \omega) G(r', r; \omega) d\omega dr dr' \quad (2.14)$$

La self-énergie est un objet central à nombre d'approches approximatives, notamment les méthodes sur amas qui seront exposées dans la section suivante.

2.2 La théorie des perturbations sur amas

Pour faire usage de la fonction de Green, nous avons besoin d'être capables de calculer (2.5) ou encore d'être en mesure de résoudre la dynamique de la fonction, l'équation (2.12). Faire cela exactement est malheureusement aussi difficile que de résoudre complètement l'équation de Schrödinger ; il n'y a pas de solutions connues dans bien des cas.

Le modèle de Hubbard est un de ces modèles qui n'a pas de solutions exactes connues. Sauf en une dimension avec sauts aux plus proches voisins. On doit donc se contenter de solutions approximatives, si l'on veut des résultats en un temps fini. Les méthodes variationnelles utilisées dans le cadre de ce travail peuvent être articulées autour de la théorie des perturbations sur amas (CPT). Il s'agit d'utiliser la théorie des perturbations pour obtenir la solution approximative sur un réseau infini à l'aide de la solution trouvée de façon exacte sur un ou plusieurs amas de tailles finis.

2.2.1 Découpage du réseau en amas

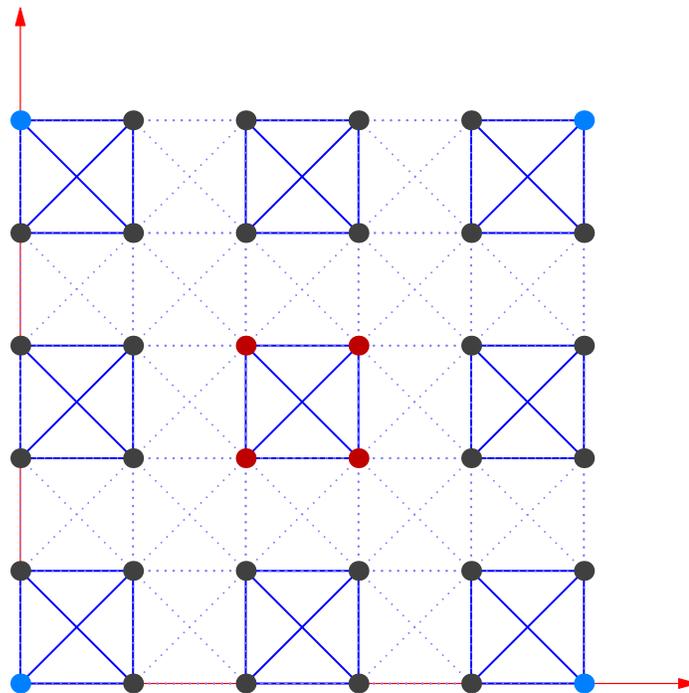


FIGURE 2.1 La maille élémentaire du réseau périodique et son découpage en amas. En trait pointillé bleu, les sauts qui sont négligés pour séparer le réseau en amas. Les flèches rouges représentent les vecteurs de base du réseau. Les sites en vert et en bleu sont différents des autres sites; ce faisant, la maille élémentaire est beaucoup plus grande que si tous les sites étaient identiques.

La première étape dans le but d'obtenir la solution CPT d'un réseau infini est de découper ce dernier en une infinité d'amas finis. Les amas doivent être suffisamment petits pour être résolus exactement, et il doit y avoir un nombre fini d'amas avec des hamiltoniens différents. Considérons le réseau dans la figure 2.1 que l'on divise en une série d'amas. Comme dans ce cas-là la maille élémentaire est trop grande pour être résolue numériquement, les amas devront être plus petits et il y aura un nombre fini d'amas distincts à l'intérieur de cette maille. Le hamiltonien du modèle de Hubbard pour ce réseau peut être écrit ainsi :

$$\mathbf{H} = \sum_R \mathbf{H}_{amas}(R) + \sum_{R \neq R'} \mathbf{H}_{inter}(R, R') \quad (2.15)$$

$\mathbf{H}_{amas}(R)$ représente les contributions au hamiltonien de l'amas à la position R et $\mathbf{H}_{inter}(R, R')$ les contributions dues au couplage entre les amas.

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{\text{amas}}(R) &= - \sum_{\sigma, r, r'} t_{r, r'} \mathbf{c}_{r, R, \sigma}^\dagger \mathbf{c}_{r', R, \sigma} + U \sum_r \mathbf{n}_{r, R, \uparrow} \mathbf{n}_{r, R, \downarrow} \\
&= - \sum_{\sigma, r, r'} t_{r, r'} \mathbf{c}_{r, R, \sigma}^\dagger \mathbf{c}_{r', R, \sigma} + U \sum_r \mathbf{c}_{r, R, \uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{r, R, \downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{r, R, \downarrow} \mathbf{c}_{r, R, \uparrow}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

$\mathbf{c}_{r, R, \sigma}^\dagger$ est l'opérateur de création de l'orbitale situé au site r dans l'amas à la position R avec un spin σ , et $\mathbf{n}_{r, R, \sigma} = \mathbf{c}_{r, R, \sigma}^\dagger \mathbf{c}_{r, R, \sigma}$ est l'opérateur d'occupation de la même orbitale. À la deuxième ligne, l'interaction du modèle de Hubbard est réécrite de la façon qui est utilisée pour décrire une interaction générale à l'équation (2.11). Dans le cas d'une interaction locale comme celle du modèle de Hubbard, les deux façons d'écrire l'interaction sont complètement équivalentes.

$$\mathbf{H}_{\text{inter}}(R, R') = - \sum_{r, r'} V_{r, R; r', R'} \mathbf{c}_{r, R, \sigma}^\dagger \mathbf{c}_{r', R, \sigma} \tag{2.17}$$

$V_{r, R; r', R'}$ contient les termes de saut inter amas. Il n'y a pas de termes d'interaction présent dans le hamiltonien de couplage inter amas puisque dans le modèle de Hubbard l'interaction U est complètement localisée sur les sites.

La position d'un site dans le réseau nous est donc donnée par une paire d'indices de position ; r spécifiant la position du site à l'intérieur d'un amas et R spécifiant l'amas dans lequel se trouve le site.

Avec ce découpage, où l'on est capable de résoudre les $\mathbf{H}_{\text{amas}}(R)$ avec une précision arbitrairement bonne et que l'on traite le couplage inter amas comme une perturbation, au premier ordre on trouve que la fonction de Green du réseau est donnée par l'expression [19]

$$\begin{aligned}
G^{-1}(r + R; r' + R'; \omega) &= \delta_{R, R'} G_{\text{amas}}^{-1}(R'; r; r'; \omega) - V(r + R; r' + R') \\
&= G_0^{-1}(r + R; r' + R'; \omega) - \delta_{R, R'} \Sigma_{\text{amas}}(R'; r; r'; \omega)
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Sur la deuxième ligne, on réécrit la formule de la CPT d'une façon qui est lourde de sens. Celle-ci nous dit que l'assemblage de self-énergies d'amas finis sert d'approximation à celle du réseau infini. De plus, la première façon de l'écrire nous apprend que l'approximation est exacte lorsque les termes de sauts sont nuls. Dans ce cas, la correction V est nulle, et les fonctions de Green des amas sont équivalentes à la fonction de Green atomique, la solution exacte au problème. La deuxième façon d'écrire la théorie des perturbations sur amas nous apprend que l'approximation est exacte dans la limite sans interaction. En effet, dans ce cas,

la self-énergie est nulle et on récupère la fonction de Green exacte G_0 . Dans ces cas limites, la façon de découper le réseau en amas n'a donc aucun impact sur le résultat des calculs.

2.2.2 Champ Moyen et CPT

Le fait que la CPT soit exacte dans la limite sans interaction rend possible d'observer l'effet d'une phase à symétrie brisée sur le système avec très peu de travail humain supplémentaire. On doit simplement imposer un champ de Weiss au modèle, enlever le terme d'interaction et résoudre le problème comme n'importe quel autre. Dans le cadre de ces travaux, le champ moyen imposé n'est jamais déterminé de façon autocohérente, mais seulement ajusté de façon à obtenir des observables comparables à celles du système avec interaction. Du point de vue de la complexité algorithmique, ce n'est pas la façon la plus optimale de procéder, mais si le découpage en amas est bien choisi, le système sera moins long à résoudre que le temps humain nécessaire pour donner les instructions à l'ordinateur.

2.2.3 Fonction de Green sur amas et diagonalisation exacte

Pour obtenir les solutions des amas, deux algorithmes sont utilisés, soit l'algorithme de Lanczos et l'algorithme de Lanczos de bandes[20]. D'abord l'algorithme de Lanczos pour obtenir l'état fondamental de l'amas $|\Omega\rangle$, et ensuite l'algorithme de Lanczos de bande pour obtenir les états excités pertinents au calcul de la représentation de Lehmann de la fonction de Green (2.7).

Le coût en ressource de calcul croît très vite avec le nombre de sites présents dans l'amas, l'espace de Fock d'un amas a une dimension 2^{2n} où n est le nombre de sites. Le facteur de 2 dans l'exposant provient des degrés de liberté de spin. Un vecteur quelconque dans cet espace nécessite donc 2^{2n} nombres réels pour être décrit complètement. Dans un espace Fock réel d'un amas avec 12 sites, un vecteur nécessiterait 1Gib d'espace de stockage si les nombres réels sont représentés par des nombres à virgule flottante de précision double. S'il s'agissait plutôt d'un espace de Fock complexe, il faudrait doubler l'espace de stockage pour accommoder la partie imaginaire du vecteur. Tous les éléments d'une matrice carrée de cette taille prendraient 16 Pib, une quantité colossale de mémoire. Le superordinateur *Mammouth-mp2* tout entier n'a présentement que 0.4 Pib de mémoire vive.

Heureusement, la plupart des éléments de matrice représentant un hamiltonien sont nuls et n'ont donc pas besoin d'être stockés. Le nombre d'éléments non-nuls par rangé est de l'ordre du nombre de sites dans l'amas. En ne stockant que les termes non nuls, le

hamiltonien n'est que quelques fois plus lourd en mémoire que les vecteurs de l'espace vectoriel. De plus, les différentes quantités conservées, tels le spin et le nombre de particules, ainsi que les symétries ponctuelles des amas permettent de construire le hamiltonien dans une forme diagonale par bloc. Les blocs peuvent être traités un à la fois, ce qui réduit le besoin en mémoire et accélère la convergence des algorithmes. La conservation du nombre de particules offre une réduction substantielle des besoins en ressource de calcul, mais cette conservation est perdue lorsque l'on souhaite étudier la supraconductivité. Il s'agit d'une conséquence de la relation d'incertitude entre la phase et l'occupation. Dans un supraconducteur, la phase de la solution est bien déterminée, elle n'a pas d'incertitude. Il s'en suit que le nombre de particules doit avoir une incertitude maximale, ce qui nécessite de mélanger les espaces Hilberts avec des nombres de particules différents[21].

Le but de l'algorithme de Lanczos est de construire la projection du hamiltonien sur un sous-espace de Krylov. En démarrant l'algorithme avec un état aléatoire $|\phi_0\rangle$, l'espace vectoriel est engendré par l'application répétée du hamiltonien sur cet état.

$$\mathcal{K} = \{|\phi_0\rangle, \mathbf{H}|\phi_0\rangle, \mathbf{H}^2|\phi_0\rangle, \dots, \mathbf{H}^M|\phi_0\rangle\} \quad (2.19)$$

Les vecteurs générés ainsi ne sont pas orthogonaux, mais une séquence de vecteurs orthogonaux formant une base de cet espace est générée par la relation de récurrence suivante :

$$|\phi_{n+1}\rangle = \mathbf{H}|\phi_n\rangle - a_n|\phi_n\rangle - b_n^2|\phi_{n-1}\rangle \quad (2.20)$$

où

$$a_n = \frac{\langle\phi_n|\mathbf{H}|\phi_n\rangle}{\langle\phi_n|\phi_n\rangle} \quad b_n^2 = \frac{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}{\langle\phi_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle} \quad (2.21)$$

avec les conditions initiales $b_0 = 0$ et $|\phi_{-1}\rangle = 0$. Le hamiltonien dans le sous-espace aura une forme tridiagonale et sera de taille très restreinte. Il aura tout au plus quelques centaines d'éléments de côté. Les matrices tridiagonales sont aisément diagonalisées complètement avec des algorithmes dédiés. Pour fonctionner, l'algorithme de Lanczos a besoin de garder 3 vecteurs et le hamiltonien en mémoire, ce qui signifie que quelques Gib de mémoire peuvent être nécessaires à son fonctionnement.

L'algorithme de Lanczos de bandes est une extension de l'algorithme de Lanczos qui travaille sur un ensemble de vecteurs orthogonaux plutôt qu'un seul. La relation de récurrence pour générer de nouveaux vecteurs est la même que pour l'algorithme appliqué à un seul vecteur à une chose près : il faut orthogonaliser entre eux les vecteurs créés par chaque application de la formule de récurrence à la bande de vecteurs. Il arrive parfois qu'après un nombre d'itérations deux vecteur de la bande soient presque parallèles, on doit

alors en retirer un pour éviter que de fausses dégénérescences apparaissent dans le spectre. Pour calculer la représentation de Lehmann de la fonction de Green grâce à l'algorithme de Lanczos de bandes, il faut utiliser les états à une excitation du système comme vecteurs de départ $\{c_{\mu,\sigma}|\Omega\rangle, c_{\mu,\sigma}^\dagger|\Omega\rangle\}$. Ces états peuvent être séparés en plusieurs bandes qui seront résolues en séquence grâce aux symétries du système. Cet algorithme consomme plus de mémoire que l'algorithme de Lanczos ordinaire, il doit garder en mémoire $2L + 1$ vecteurs en plus du hamiltonien. Pour les plus gros amas qui ont été résolus dans le cadre de ces travaux, environ 10Gb de mémoire étaient nécessaires pour cet algorithme.

2.3 Principes variationnels et d'auto-cohérence

À elle seule, la CPT ne permet pas d'étudier les phases à symétrie brisée, puisque la solution est obtenue à partir de solutions exactes d'amas finis. Ces derniers ne peuvent pas avoir de brisure spontanée de symétrie, car ce phénomène requiert d'être dans la limite thermodynamique. Pour ce faire, on doit briser la symétrie associée à la phase que l'on désire observer en ajoutant aux amas des paramètres qui ne sont pas présents dans le modèle que l'on étudie; ce sont des champs de Weiss. Pour assurer que ces ajouts mènent à des résultats ayant une valeur physique, il nous faut une méthode pour optimiser ces nouveaux degrés de liberté dans la description des amas. C'est là qu'entre en jeu la fonctionnelle de la self-énergie de Pothoff.

2.3.1 Expression fonctionnelle du grand potentiel

Tout d'abord, un rappel sur ce qu'est une fonctionnelle. Une fonctionnelle prend comme argument une fonction et lui fait correspondre un scalaire. La fonctionnelle dépend de tout le domaine de la fonction donnée en argument. Deux exemples simples de fonctionnelle sont l'intégrale définie d'une fonction et la trace d'une matrice.

Baym et Kadanoff [22] ont montré que le grand potentiel d'un système est donné par cette fonctionnelle de la fonction de Green :

$$\Omega[\mathbf{G}] = \Phi[\mathbf{G}] - \text{Tr}[(\mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{G}^{-1})\mathbf{G}] + \text{Tr}[\ln(-\mathbf{G})] \quad (2.22)$$

Dans cette formule, la trace signifie une somme sur tous les argument de la fonction de Green, les fréquences et les positions. Cette fonctionnelle a la propriété d'être stationnaire par rapport à la fonction de Green seulement pour les fonctions de Green qui sont solutions

du problème considéré. Dans cette expression $\Phi[\mathbf{G}]$ est la fonctionnelle de Luttinger-Ward. Cette dernière n'a pas de forme fermée connue et est formellement définie par ces propriétés :

1. Sa dérivée fonctionnelle est la self-énergie de \mathbf{G} si \mathbf{G} est solution au problème

$$\frac{\delta\Phi[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} = \Sigma[\mathbf{G}] \quad (2.23)$$

2. $\Phi[\mathbf{G}]$ est universelle en interaction. C'est-à-dire que deux systèmes ayant la même partie d'interaction, mais des termes à un corps différents auront la même fonctionnelle de Luttinger-Ward
3. En l'absence d'interaction la fonctionnelle est nulle sur tout le domaine.

La valeur de la dérivée par rapport à \mathbf{G} de la fonctionnel de Luttinger-Ward nous permet de définir la transformée de Legendre fonctionnelle de celle-ci.

$$F[\Sigma] \equiv \Phi[\mathbf{G}[\Sigma]] - \text{Tr}(\Sigma\mathbf{G}[\Sigma]) \quad (2.24)$$

Faire cette transformation suppose l'existence d'une fonctionnelle $\mathbf{G}[\Sigma]$ qui est l'inverse de $\Sigma[\mathbf{G}] = \frac{\delta\Phi[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}}$ et que cette nouvelle fonctionnelle est localement inversible. On peut supposer que cette condition est respectée lorsque l'on n'est pas au voisinage immédiat du point critique d'une transition de phase[23]. En substituant dans la fonctionnelle de Baym et Kadanoff (2.22), on peut éliminer la dépendance sur la fonction de Green et la remplacer par une dépendance sur la Self-énergie.

$$\Omega[\Sigma] = \text{Tr}(\ln(-(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma)^{-1})) + F[\Sigma] \quad (2.25)$$

Similairement à $\Omega[\mathbf{G}]$, $\Omega[\Sigma]$ est stationnaire si Σ est la self-énergie physique, et est égale au grand potentiel du système à cette self-énergie.

La transformée de Legendre de la fonctionnelle de Luttinger-Ward est universelle, tout comme la fonctionnelle de Luttinger-Ward elle-même. Cela signifie qu'elle a la même valeur pour deux systèmes ayant la même partie d'interaction lorsqu'elle est évaluée pour la même self-énergie. On est donc en mesure d'évaluer exactement la fonctionnelle de Pothoff si on a un système auxiliaire ayant la même partie d'interaction que le système d'intérêt et qu'on utilise la self-énergie de ce système auxiliaire comme solution au système d'intérêt. Ceci est précisément la situation lorsque l'on utilise la CPT au premier ordre pour obtenir la fonction de Green du réseau à partir de celui d'amas.

$$\Omega_{\text{réseau}}[\Sigma] = \Omega_{\text{amas}} - \text{Tr}(\ln((\mathbf{G}_{0,\text{réseau}}^{-1} - \Sigma)\mathbf{G}_{\text{amas}})) \quad (2.26)$$

Puisque les solutions exactes des amas sont calculables, nous sommes en mesure de calculer la valeur du grand potentiel ainsi que la fonction de Green des amas et ainsi d'isoler dans (2.25) la valeur de $F[\Sigma]$ pour le réseau et l'amas. Comme une méthode est disponible pour calculer cette fonctionnelle de façon exacte, il est possible de calculer de façon tout aussi exacte la fonctionnelle de Pothoff pour le réseau. Conséquemment, nous sommes en mesure de trouver un point stationnaire de la fonctionnelle dans l'espace des self-énergies représentables sur les amas utilisés, il s'agit d'une approximation que Pothoff qualifie de type III.

Tous les termes à un corps possibles dans les hamiltoniens des amas peuvent être variés dans la recherche d'une solution optimale. On peut même ajouter des degrés de liberté électroniques qui n'existent pas dans le réseau infini (les sites de bain en CDMFT) dans la mesure où ces nouveaux degrés de liberté ne font intervenir que des opérateurs à un corps. En pratique, on choisit un sous-ensemble aussi restreint que possible \mathbf{h} et on effectue une recherche de valeurs pour ces paramètres qui respecte la condition

$$0 = \frac{\partial \Omega[\Sigma]}{\partial \mathbf{h}}. \quad (2.27)$$

2.3.2 Approximation de l'amas variationnel

Avec l'approximation de l'amas variationnel (VCA), on augmente l'hamiltonien des amas avec des champs de Weiss choisis de sorte à permettre les phases étudiées dans les amas. Ces nouveaux opérateurs sont ensuite optimisés par la recherche de valeurs satisfaisant la condition (2.27). Par exemple, si on veut étudier l'antiferromagnétisme avec un vecteur d'onde \vec{Q} , le champ de Weiss est donné par l'expression :

$$\mathbf{M} = M \sum_r e^{i\vec{Q}\cdot r} (\mathbf{n}_{r\uparrow} - \mathbf{n}_{r\downarrow}) \quad (2.28)$$

Pour induire de la supraconductivité, cet opérateur sera ajouté

$$\mathbf{D} = D \sum_{rr'} \Delta_{rr'} (\mathbf{c}_{r\uparrow} \mathbf{c}_{r'\downarrow} + \mathbf{c}_{r'\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{r\uparrow}^\dagger) \quad (2.29)$$

Dans cet opérateur, le coefficient $\Delta_{rr'}$, est déterminé par la symétrie de la supraconductivité.

Pour le cas qui nous intéresse, la supraconductivité de symétrie d le coefficient est donné par cette expression :

$$\Delta_{rr'} \equiv \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{r} - \vec{r}' = \pm \hat{e}_x \\ -1 & \text{si } \vec{r} - \vec{r}' = \pm \hat{e}_y \end{cases} \quad (2.30)$$

Une façon heuristique de choisir les champs de Weiss à ajouter aux amas est d'utiliser les opérateurs correspondants aux paramètres d'ordre des phases étudiées.

Si la maille élémentaire du modèle contient plus d'un site, on obtiendra de meilleurs résultats en permettant aux champs de Weiss d'avoir des valeurs différentes sur chaque site à l'intérieur de la maille. Dans cette situation les deux champs de Weiss présentés plus tôt devront être réécrits ainsi :

$$\mathbf{M} = \sum_r M_r e^{i\vec{Q}\vec{r}} (\mathbf{n}_{r\uparrow} - \mathbf{n}_{r\downarrow}) \quad (2.31)$$

$$\Delta_{rr'} = \begin{cases} D_{rr'}^x & \text{si } \vec{r} - \vec{r}' = \pm \hat{e}_x \\ -D_{rr'}^y & \text{si } \vec{r} - \vec{r}' = \pm \hat{e}_y \end{cases} \quad (2.32)$$

Ce sont les coefficients M_r , $D_{rr'}^x$, $D_{rr'}^y$ qui sont optimisés par la recherche d'un point stationnaire de la fonctionnelle de la self-énergie de Pothoff.

En faisant ceci, on explore l'espace des self-énergies possibles sur l'amas choisi avec les paramètres choisis. Comme l'espace complet des self-énergies possibles sur les amas est plus grand que ce qui est accessible avec un ensemble fini de paramètres variationnel, il se peut très bien que le point stationnaire que l'on trouve n'en soit pas un dans l'espace complet. Par contre, on peut raisonnablement croire que le point trouvé n'est pas trop éloigné d'un vrai point stationnaire.

2.3.3 Champ moyen dynamique sur amas

Le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) est une extension sur amas de la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) [17]. L'idée de cette approche est de modéliser l'effet du réseau sur chaque amas de sites corrélés à l'aide d'un bain de site sans corrélations qui échange des électrons avec les amas. Les paramètres des bains sont optimisés de façon

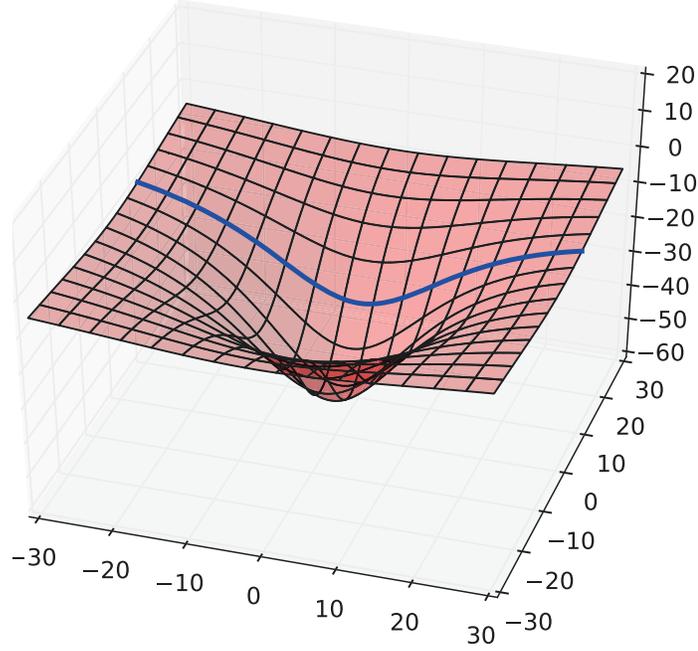


FIGURE 2.2 Exemple d'optimisation avec contraintes : si l'on effectue la recherche du minimum de la surface le long de la ligne bleue, on trouvera un minimum, mais pas celui de la surface.

à ce que la fonction de Green sur les sites de l'amas et la fonction de Green du réseau soient le plus possible identiques. Cette méthode est exacte dans la limite du nombre de dimensions et d'orbitales de bain infini. Les hamiltoniens des amas sont donc augmentés de sites supplémentaires :

$$H'(R) = H_{\text{amas}}(R) + \sum_{\mu\sigma;\alpha\sigma'} \theta_{\mu\sigma;\alpha\sigma'} (\mathbf{c}_{\mu,\sigma'}^\dagger \mathbf{a}_{\alpha,\sigma} + \mathbf{a}_{\alpha,\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{\mu,\sigma'}) + \sum_{\alpha,\sigma} \epsilon_{\alpha,\sigma} \mathbf{a}_{\alpha,\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{\alpha,\sigma} \quad (2.33)$$

Où $H^{\text{amas}}(R)$ est le hamiltonien de l'amas tel que défini par (2.16), $\mathbf{a}_{\alpha\sigma}$ est l'opérateur d'annihilation d'une particule de spin σ au site de bain α . Le bain est caractérisé par la matrice d'hybridation $\theta_{\mu\sigma;\alpha\sigma'}$ et les énergies de site $\epsilon_{\alpha\sigma}$. En présence des sites de bains, on peut séparer la fonction de Green de l'amas en trois parties plutôt que deux : la fonction de Green sans interaction \mathbf{G}_0 , la self-énergie Σ et la fonction d'hybridation Γ . Cette dernière encapsule l'effet du bain sur la partie à un corps de la fonction de Green de l'amas.

$$\Gamma_{\mu,\nu,\sigma,\sigma'}(\omega) = \sum_{\alpha,\sigma''} \frac{\theta_{\mu,\alpha,\sigma'',\sigma} \theta_{\nu,\alpha,\sigma'',\sigma'}^*}{\omega - \epsilon_{\alpha,\sigma''}} \quad (2.34)$$

Cette méthode peut être interprétée comme une optimisation approximative de la fonctionnelle de Pothoff en présence de sites de bain dans les amas. En dérivant l'équation d'autocohérence de la DMFT ainsi, son extension aux amas en dimension finie avec un nombre de sites arbitraire devient triviale. On peut développer (2.27) ainsi

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Omega[\Sigma]}{\partial\mathbf{t}'} &= \text{Tr}\left[\frac{\partial\Omega[\Sigma]}{\partial\Sigma}\frac{\partial\Sigma}{\partial\mathbf{t}'}\right] \\ &= \text{Tr}\left[(\mathbf{G}_{\text{amas}} - \mathbf{G}_{\text{réseau}})\frac{\partial\Sigma}{\partial\mathbf{t}'}\right]\end{aligned}\quad (2.35)$$

Si le premier facteur est identiquement nul, pour tous les sites de l'amas et toutes les fréquences, la dérivée par rapport aux paramètres variationnels est nulle aussi. Comme ce premier terme est composé uniquement d'objets dont on aura une expression explicite, on peut choisir de construire une fonction de distance positive dont le minimum est un point optimal. Dans les conditions idéales le minimum de cette fonction de distance serait zéro, mais des limitations techniques rendent cela impossible : il faudrait un nombre infini d'orbitales de bain et de paramètres pour respecter parfaitement cette condition. L'expression de la fonction de distance, en séparant la fonction de Green de l'amas en ses différentes composantes, est

$$d = \sum_{\omega} \text{Tr}[(\mathbf{G}_{0,\text{amas}}^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega) - \bar{\mathbf{G}}^{-1}(\omega) - \Gamma(\omega))^2]p(\omega) \quad (2.36)$$

$$\bar{\mathbf{G}}(\omega) = \sum_k \mathbf{G}_{\text{réseau}}(k, \omega) \quad (2.37)$$

Dans la fonction de distance, $p(\omega)$ est une fonction de poids qui n'a pas de définition rigoureuse et est ajustée de façon à optimiser du mieux possible la fonctionnelle de Pothoff dans les systèmes où une optimisation rigoureuse de celle-ci est possible [24]. Dans la plupart des cas, une fonction de poids constante qui devient soudainement nulle au-delà d'une certaine fréquence donne des résultats satisfaisants.

La procédure pour trouver une solution autocohérente est la suivante :

1. Commencer avec des valeurs de départ raisonnables pour les paramètres du bain.
2. Calculer la fonction de Green de l'amas.
3. Construire la fonction de Green du réseau.
4. Minimiser la fonction de distance (2.36) par rapport aux paramètres de bain en modifiant uniquement la fonction d'hybridation.

- Retourner à l'étape 2 avec les nouveaux paramètres de bain trouvés par la minimisation, jusqu'à ce qu'il n'y ait plus de changement significatif.

2.4 Les systèmes étudiés

Les méthodes exposées précédemment permettent seulement l'étude de systèmes périodiques ou finis. Les impuretés introduites ne peuvent donc pas créer de désordre dans le réseau, mais seulement changer sa périodicité. Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes concentrés sur une configuration particulière : un groupe de 4 sites par maille est affecté par une impureté hors plan qui change le potentiel chimique de ceux-ci. On peut imaginer qu'une substitution d'un des atomes de terre rare qui sont présents entre les plans de cuivre-oxygène des cuprates aurait un effet similaire sur les sites de cuivres environnants. Deux mailles de taille différente ont été étudiées, l'une avec 36 sites et l'autre avec 100 sites.

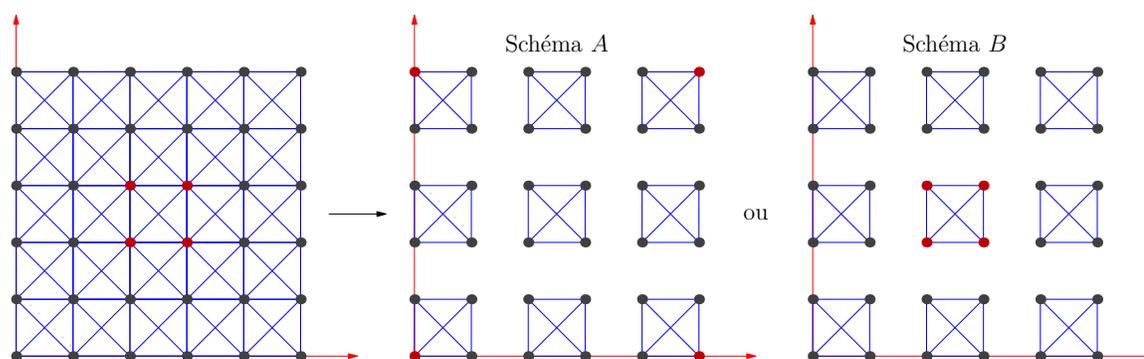


FIGURE 2.3 Maille élémentaire de 36 sites séparée en 9 amas. Les sites en vert sont des sites d'impureté. À gauche : la maille élémentaire. À droite : deux façons de séparer cette maille en amas carrés de 4 sites. Il y a plusieurs façons de séparer ce réseau en 9 amas 2×2 . Ici, il y en a 2 qui préservent toutes les symétries ponctuelles de la maille élémentaire.

Pour cette maille, deux séparations en amas distincts sont étudiées : l'une dans laquelle l'impureté est séparée sur quatre amas, le schéma A, et une autre où les quatre sites avec le potentiel d'impureté sont tous sur le même amas, le schéma B. Avec la deuxième configuration, l'effet de l'impureté sur le réseau est entièrement traité par le processus d'optimisation de la self-énergie, tandis qu'avec le schéma A une partie de l'effet de l'impureté sera présente dans les solutions des amas. Comparer les résultats des deux schémas nous permet de porter un jugement sur la qualité de l'approximation. Faire usage d'un découpage qui préserve les symétries ponctuelles de la maille est fort utile, cela permet de résoudre les fonctions de Green d'un sous-ensemble d'amas, et de construire les fonctions de Green des autres amas

grâce à ces symétries. Les symétries qui peuvent être exploitées sont différentes selon la phase que nous étudions. La supraconductivité brise les symétries de réflexion par rapport aux diagonales tandis que l'antiferromagnétisme brise les symétries de réflexion verticale et horizontale.

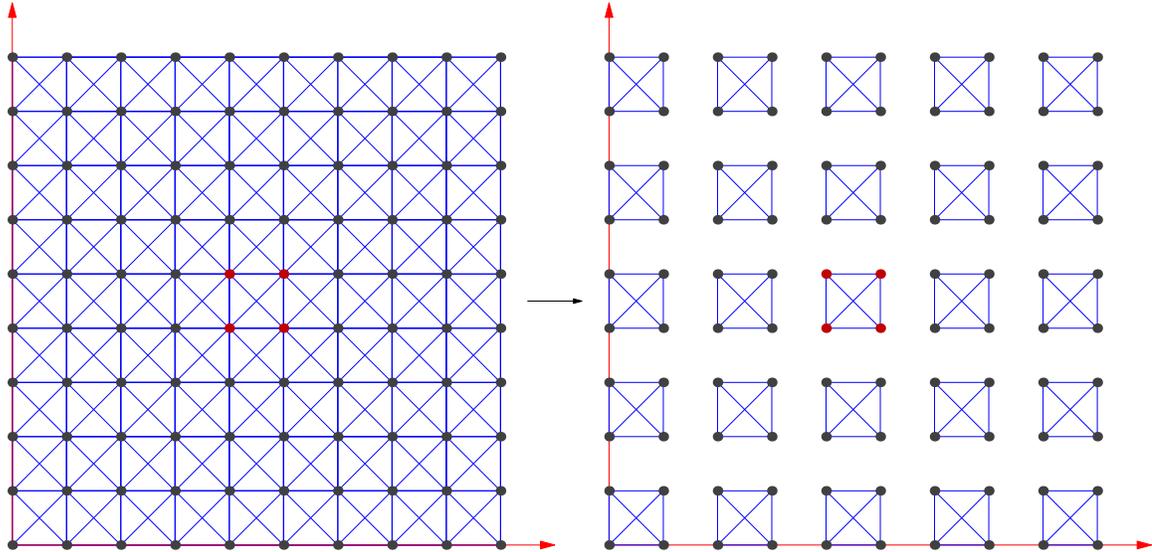


FIGURE 2.4 Maille élémentaire de 100 sites séparée en 25 amas de 4 sites. Une seule façon de séparer la maille tout en préservant toutes ses symétries ponctuelles est montrée ici.

2.4.1 Supraconductivité

La présence de plans de symétrie signifie qu'il n'est pas nécessaire de résoudre tous les 9 amas. En effet, toute l'information nécessaire est présente dans la solution des 4 amas situés dans la zone irréductible de la maille, le reste peut être reconstruit avec les symétries de celle-ci. Cette réduction du nombre d'amas à résoudre réduit aussi le nombre de paramètres variationnels présents dans le modèle, et facilite donc la convergence des algorithmes d'optimisation.

Le nombre de paramètres variationnels peut aussi être réduit à l'intérieur des amas qui sont traversés par les plans de réflexion de la maille : les champs de Weiss devront être symétriques sous l'action des transformations présentes. L'amas 1 a donc toutes les symétries de la maille et l'amas 3 aucune. L'amas 2 et l'amas 4 en ont chacun une seule (voir la figure 2.5 pour les numéros d'amas).

Avec la CDMFT, on a choisi d'avoir 8 orbitales de bain pour chaque amas, pour un total de 12 orbitales par amas. Tous les opérateurs présents sur les orbitales des bains sont

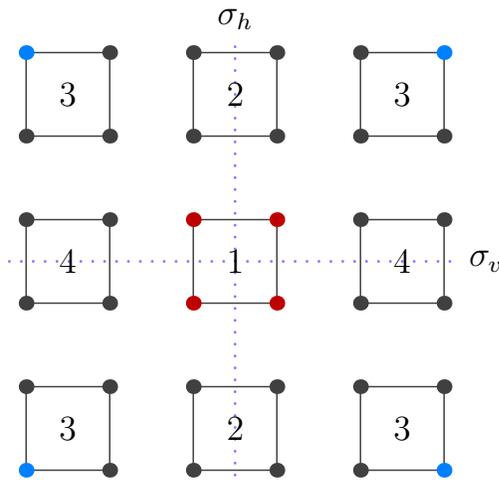


FIGURE 2.5 Équivalence entre les amas dans la maille de 36 sites suite aux réflexions horizontale et verticale. Les amas identifiés par le même numéro sont équivalents.

optimisés. Dans le modèle considéré il y a 60 opérateurs à optimiser lorsque l'on considère les énergies de bain, l'hybridation avec les sites et un couplage anormal entre les orbitales du bain pour permettre la supraconductivité. Chacun des sites est hybridé avec deux orbitales du bain. Heuristiquement, on peut dire que chacun des premiers voisins de l'amas a été substitué par une orbitale de bain.

Dans la figure 2.6, chaque trait pointillé représente l'ajout d'un opérateur d'appariement comme celui-ci

$$\mathbf{d}_{\mu,\nu} = d_{\mu,\nu}(\mathbf{c}_{\mu\uparrow}\mathbf{c}_{\nu\downarrow} + \mathbf{c}_{\nu\uparrow}\mathbf{c}_{\mu\downarrow} + \text{c.h.}) \quad (2.38)$$

dans le hamiltonien d'un amas. Dans cette expression μ et ν représentent les orbitales de bain reliées par un trait. Ces opérateurs à un corps décrivent la supraconductivité dans le bain, qui se transmet à l'amas par proximité via l'hybridation entre le bain et l'amas.

Dans le cas de la maille de 100 sites, une approximation supplémentaire est faite pour faciliter l'obtention d'une solution numérique : tous les 16 amas qui forment le bord de la maille sont identiques. La solution approximative de ce modèle est donc obtenue à partir des solutions de cinq amas. Les amas du bord ont la même configuration d'opérateurs que l'amas 1 de la figure 2.6. On ajoute donc 8 paramètres variationnels en CDMFT.

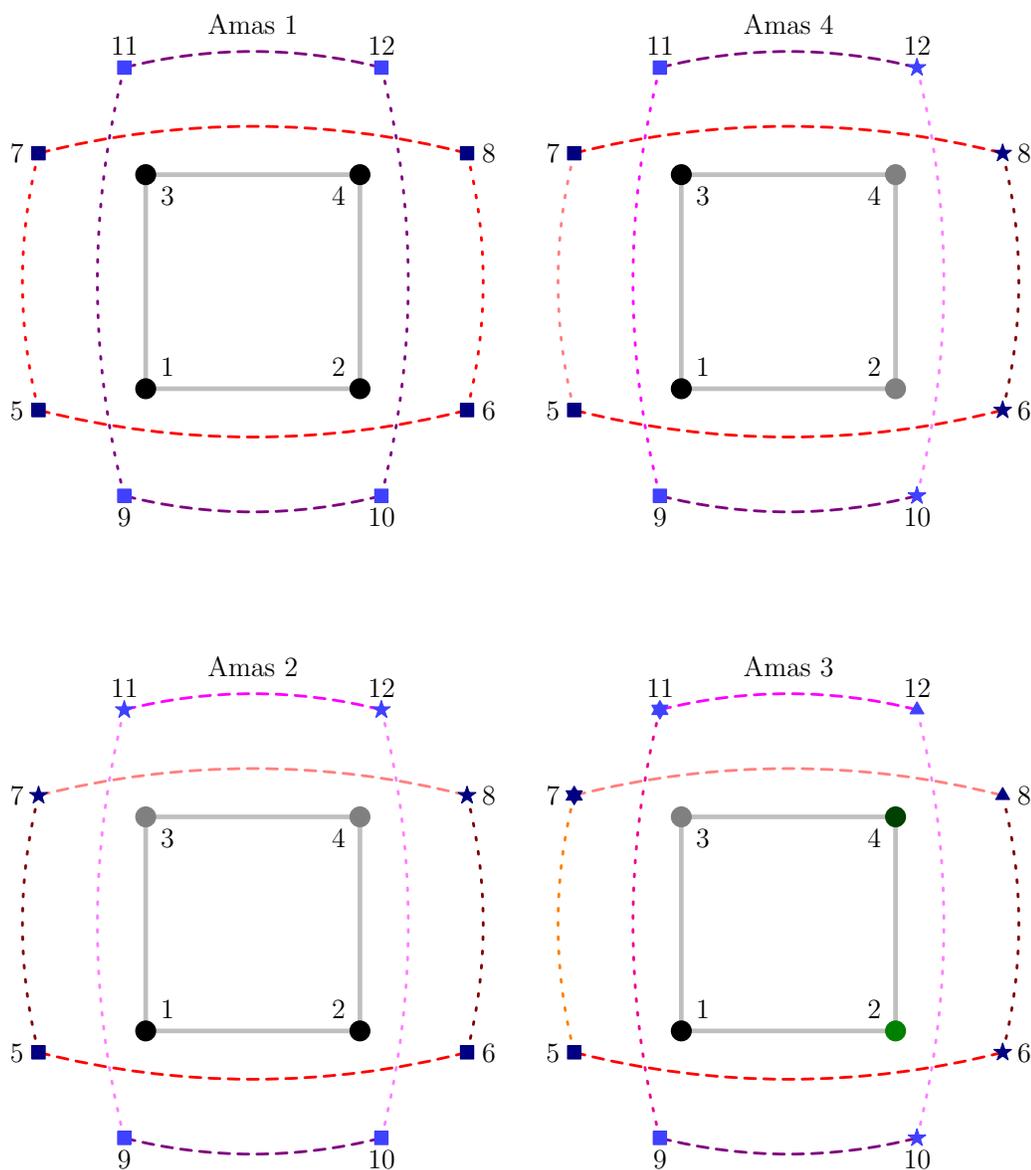


FIGURE 2.6 Bain supraconducteur. Les cercles pleins représentent les sites de l'amas, ceux de la même couleur à l'intérieur d'un amas sont équivalents par une réflexion de l'amas. Les autres symboles représentent les orbitales de bain. Ceux qui ont le même symbole et la même couleur sont équivalents par une réflexion de l'amas. Les traits pointillés représentent les opérateurs anormaux. Pour avoir de la supraconductivité de type d , les traits pointillés courts doivent avoir un signe opposé aux traits pointillés longs qui ont une orbitale de bain en commun. Les opérateurs représentés par des traits de couleurs différentes dans le même amas ont des coefficients indépendants.

2.4.2 Antiferromagnétisme

En présence d'antiferromagnétisme, la même séparation en amas du réseau peut être utilisée sans problème, mais la présence du vecteur d'onde antiferromagnétique nous force à utiliser des plans de réflexion différents pour simplifier le problème.

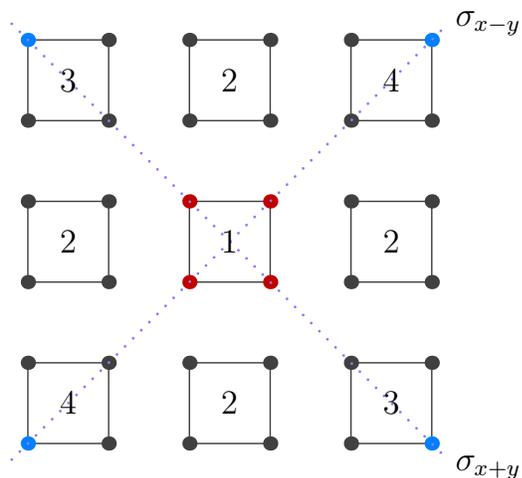


FIGURE 2.7 Équivalence entre les amas dans la maille de 36 sites suite aux réflexions diagonales. Les amas identifiés par le même numéro sont équivalents.

La même configuration d'orbitales de bain est utilisée pour étudier l'antiferromagnétisme dans ce système. Pour permettre l'établissement d'une onde de densité de spin, il faut simplement donner un coefficient indépendant aux opérateurs faisant intervenir des spins différents. Les électrons auront donc une hybridation avec le bain et une énergie d'occupation du bain différente selon que leur spin est *up* ou *down*. Dans ce cas-ci, il y a 72 paramètres variationnels.

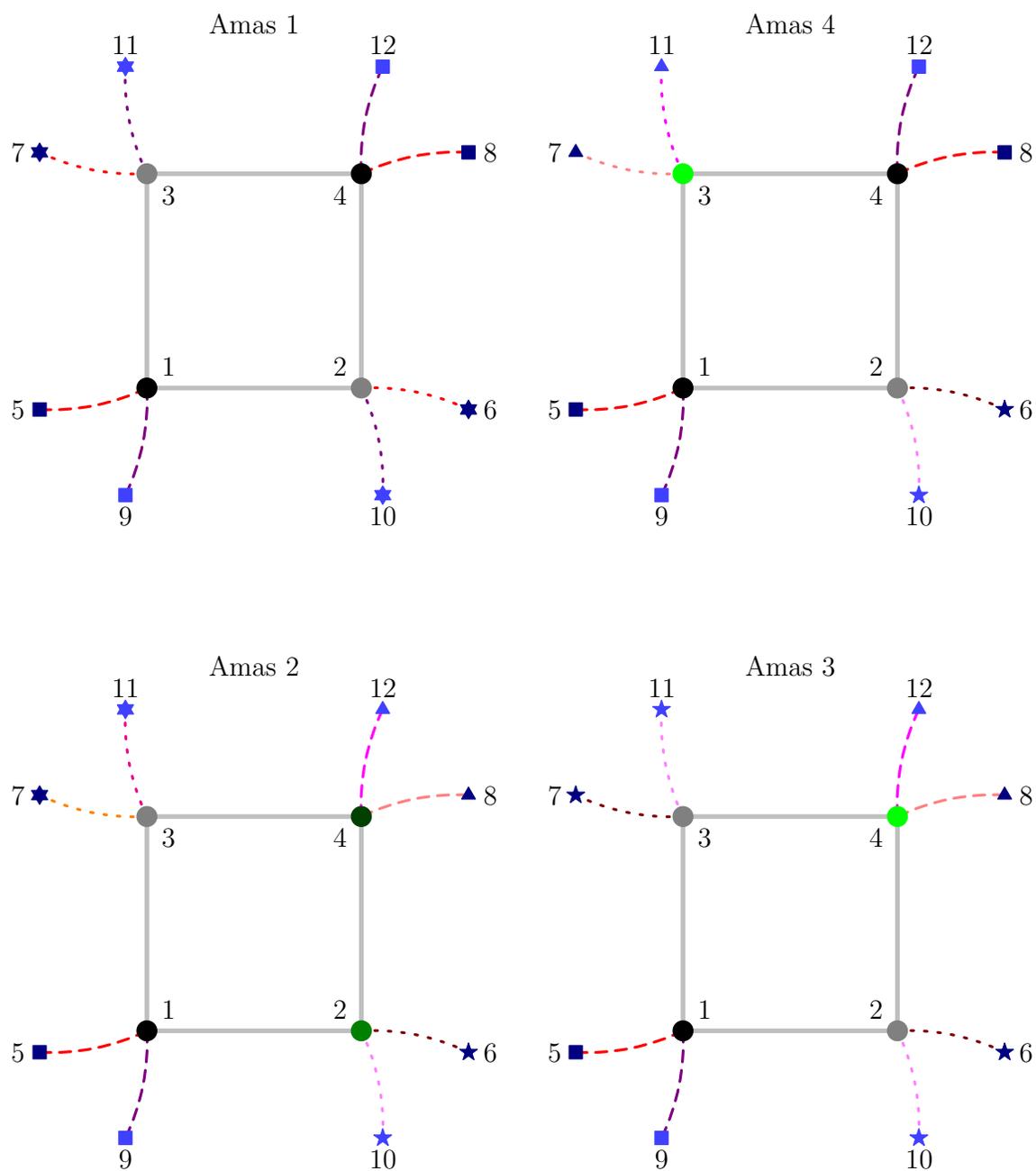


FIGURE 2.8 Bain antiferromagnétique. Les cercles pleins représentent les sites de l'amas, ceux de la même couleur à l'intérieur d'un amas sont équivalents par une réflexion de l'amas. Les autres symboles représentent les orbitales de bain, ceux qui ont le même symbole et la même couleur sont équivalents par une réflexion de l'amas. Les traits pointillés représentent les opérateurs d'hybridation. Les opérateurs représentés par des traits de couleurs différentes dans le même amas ont des coefficients indépendants.

Chapitre 3

Résultats et analyse

Dans le but de qualifier l'effet de l'impureté dans le modèle, on observe son effet sur les observables suivantes : les paramètres d'ordre supraconducteur et antiferromagnétique, la densité d'états locale dans les différentes phases , ainsi que le profil de la densité et de l'appariement en fonction de la position.

Deux dispositions légèrement différentes de l'impureté ont été testées (illustrées à la figure 2.3). On observera les différences principalement sur le diagramme de phases et les observables locales. Dans le schéma A, les sites d'impureté sont placés aux quatre coins de la maille élémentaire et donc sur des amas différents, tandis que dans le schéma B, les quatre sites d'impureté sont au centre de la maille et de ce fait sur le même amas. Intuitivement, on peut penser que le schéma A donnera des résultats plus proches de la réalité, puisque des effets dynamiques de l'impureté seront pris en compte par le solveur d'amas, contrairement au schéma B. Dans cette deuxième approximation, comme tous les sites d'impureté sont dans le même amas et affectent de façon égale les quatre sites de l'amas, l'état fondamental provenant du solveur d'amas sera simplement celui obtenu avec un potentiel chimique déplacé par la valeur du potentiel d'impureté. Tous les effets de l'impureté dans les résultats proviendront donc de l'optimisation des paramètres de bain par la CDMFT.

3.1 Observables étudiées

3.1.1 Diagrammes de phase

Normalement, un diagramme de phase illustre la dépendance de la température critique de différentes phases d'un matériau en fonction de différents paramètres de contrôle tels la pression, le champ magnétique ou le dopage. Puisque les simulations sont faites à température nulle, il n'est pas possible de dessiner un diagramme de phases dans le sens habituel de la chose. On trace plutôt l'amplitude du paramètre d'ordre en fonction de nos paramètres de contrôle. Dans ce cas-ci, le potentiel d'impureté et le dopage en trous. Pour des transitions du deuxième ordre, comme la supraconductivité et l'antiferromagnétisme des cuprates, ce paramètre est précisément zéro à la température critique. Intuitivement, on peut croire que si la température critique est plus faible, le paramètre d'ordre serait lui aussi plus faible à température nulle. Cette intuition semble être confirmée par la comparaison des diagrammes de phases avec des températures critiques avec ceux à température nulle montrant des paramètres d'ordres.

$$\mathbf{M} = \sum_r e^{i\vec{Q}\cdot r} (\mathbf{n}_{r\uparrow} - \mathbf{n}_{r\downarrow}) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{D} = \sum_{rr'} \Delta_{rr'} (\mathbf{c}_{r\uparrow}\mathbf{c}_{r'\downarrow} + \mathbf{c}_{r'\uparrow}\mathbf{c}_{r\downarrow} + \text{c.h.}) \quad (3.2)$$

$$\Delta_{rr'} \equiv \begin{cases} 1 & \text{si } r - r' = \pm\hat{e}_x \\ -1 & \text{si } r - r' = \pm\hat{e}_y \end{cases} \quad (3.3)$$

Pour la supraconductivité de type d , le paramètre d'ordre est la valeur moyenne de l'opérateur \mathbf{D} . Dans le cas de l'antiferromagnétisme, il s'agit de la moyenne de l'opérateur \mathbf{M} . Ces valeurs moyennes sont une mesure de la densité d'électrons participant à la phase.

3.1.2 Densité d'état

La densité d'états est la densité de probabilité de trouver un électron ou un trou avec une énergie donnée. Il s'agit d'une observable qui peut être mesurée par microscopie à effet tunnel : le courant mesuré est proportionnel à la densité d'états à l'énergie correspondant à la différence de potentiel appliquée.

Pour mesurer la densité d'états avec les résultats de simulations nous devons commencer

par obtenir la densité spectrale, qui est la probabilité de trouver un électron avec un vecteur d'onde et une énergie donnés. La densité spectrale A est simplement proportionnelle à la partie imaginaire de la fonction de Green. La densité d'états D , quant à elle, est l'intégrale dans la zone de Brillouin de la densité spectrale.

$$A_r(\vec{k}, \omega) = -2 \operatorname{Im}[G_{rr}(\vec{k}, \omega)]$$

$$D_r(\omega) = \int_{Z.B.} d^n \vec{k} A_r(\vec{k}, \omega)$$

Dans l'équation précédente, l'indice r identifie le site à l'intérieur de la maille élémentaire. En présence d'un potentiel d'impureté, ces observables auront une dépendance en fréquence différente selon leur distance à l'impureté.

Les phases à symétrie brisée laissent souvent des traces dans la densité d'état. Dans le cas de la supraconductivité, un gap se forme au niveau de Fermi. Dans la phase antiferromagnétique, elle dépend du spin des électrons.

Les impuretés, quant à elles, peuvent créer des états qui leur sont liés, ce qui se traduira par des pics dans la densité d'état. La hauteur des pics sera fortement dépendante de la distance entre le potentiel d'impureté et le site où la densité d'états est mesurée. Ces pics peuvent se former à l'intérieur du gap d'un supraconducteur de symétrie d . Lorsqu'une théorie de champ moyen est utilisée pour traiter un système supraconducteur ayant une impureté non magnétique, on trouve que l'état lié a un temps de vie fini. Dans la limite de faible diffusion, l'état lié sera mal défini. Il aura une énergie près de celle du gap et un temps de vie très court. Ce temps de vie très court signifie une très grande étendue en énergie. En d'autres mots, il n'y aura pratiquement rien à voir. Et à mesure que la diffusion devient plus forte l'état lié deviendra mieux défini et son énergie s'approchera du niveau de Fermi. [7]

3.1.3 Observables locales

Il sera intéressant de voir comment les valeurs moyennes de certaines observables sont modulées dans l'espace. Les observables qu'on considère sont les suivantes : les deux paramètres d'ordre présentés à la sous-section 3.1.1 : $D_{rr'}$ l'appariement supraconducteur entre les sites r et r' , et M_r la polarisation de spin au site r , la densité d'électrons sur les sites N_r , et la valeur moyenne de l'opérateur de sauts aux premiers voisins $T_{rr'}$. Ces opérateurs

sont définis ainsi :

$$\begin{aligned}
 D_{rr'} &= \Delta_{rr'}(\mathbf{c}_{r\uparrow}\mathbf{c}_{r'\downarrow} + \mathbf{c}_{r'\uparrow}\mathbf{c}_{r\downarrow} + \text{c.h.}) \\
 M_r &= e^{i\vec{Q}\cdot r}(\mathbf{n}_{r\uparrow} - \mathbf{n}_{r\downarrow}) \\
 N_r &= \mathbf{n}_{r\uparrow} + \mathbf{n}_{r\downarrow} \\
 T_{rr'} &= \sum_{\sigma}(\mathbf{c}_{r\sigma}^{\dagger}\mathbf{c}_{r'\sigma} + \text{c.h.})
 \end{aligned}$$

En l'absence d'interaction, la valeur moyenne peut être modulée par des oscillations de Friedel. On pourra voir dans quelle mesure l'interaction change celles-ci.

3.2 Diagrammes de phases

Deux modèles ont été simulés dans la phase supraconductrice avec la méthode CDMFT : un avec des sauts aux premiers voisins seulement et l'autre avec les sauts aux deuxièmes et troisièmes voisins, avec des amplitudes de sauts correspondant au matériau YBCO : $t' = -0.3t$ et $t'' = 0.2t$. Dans les deux cas, la valeur du coefficient d'interaction est $U = 8t$. Les sauts aux deuxièmes et troisièmes voisins créent une asymétrie particule-trou dans le modèle qui affecte de façon importante les ordres supraconducteur et antiferromagnétique.

On verra que la présence de l'impureté est défavorable à la coexistence des phases antiferromagnétique et supraconductrice avec les paramètres du YBCO. Le dopage critique pour l'antiferromagnétisme se rapproche du demi-remplissage avec l'augmentation de la force de l'impureté, tandis que le dopage critique de la supraconductivité s'en éloigne. Le dopage critique situé aux environs 23% de densité de trous ne semble pas déplacé par la présence d'impuretés. Si l'on attribue l'existence de la supraconductivité aux fluctuations d'une phase voisine, cela signifierait que la phase en question n'est que très peu affectée par la présence d'impuretés.

La façon dont le dôme supraconducteur se déplace en dopage en fonction de h nous donne une indication que la cause de la chute du dôme à l'approche du demi-remplissage demeure inchangée : c'est la compétition avec l'isolant de Mott qui détruit la phase supraconductrice dans le système. La transition vers l'isolant de Mott se produit à un dopage non nul en présence d'inhomogénéités.

Plusieurs différences peuvent être observées entre les deux schémas pour l'impureté, notamment dans le glissement du dôme qui est beaucoup plus marqué dans le Schéma A. Puisque les deux schémas représentent le même système physique, cela nous indique que des raffinements à l'approximation seraient nécessaires pour pousser l'analyse plus loin, surtout lorsque la force de l'impureté devient importante.

On remarquera que l'effet de l'impureté sur la supraconductivité dans le système à 100 sites est qualitativement très semblable à ce que l'on observe sur le système à 36 sites. L'effet de l'impureté semble simplement réduit, ce qui est attribuable à la densité de défauts plus faible dans ce système.

3.2.1 Système à 9 amas

Comme on peut l'observer sur la figure 3.1, sans les sauts aux deuxièmes et troisièmes voisins, l'effet de l'impureté est différent à toutes les amplitudes h testées. Lorsque les sites d'impureté sont distribués sur quatre amas (schéma A), comme c'est le cas à la figure 3.1a, un effet initial s'établit de façon discontinue : l'amplitude du paramètre d'ordre est globalement réduite aussitôt l'impureté ajoutée, mais l'augmentation de son amplitude n'a que très peu d'effet. Lorsque tous les sites d'impureté sont situés sur le même amas (schéma B), son effet est plus graduel, et l'on peut remarquer un autre phénomène qui ne se produit pas dans l'autre schéma : le dôme supraconducteur glisse vers les dopages plus élevés.

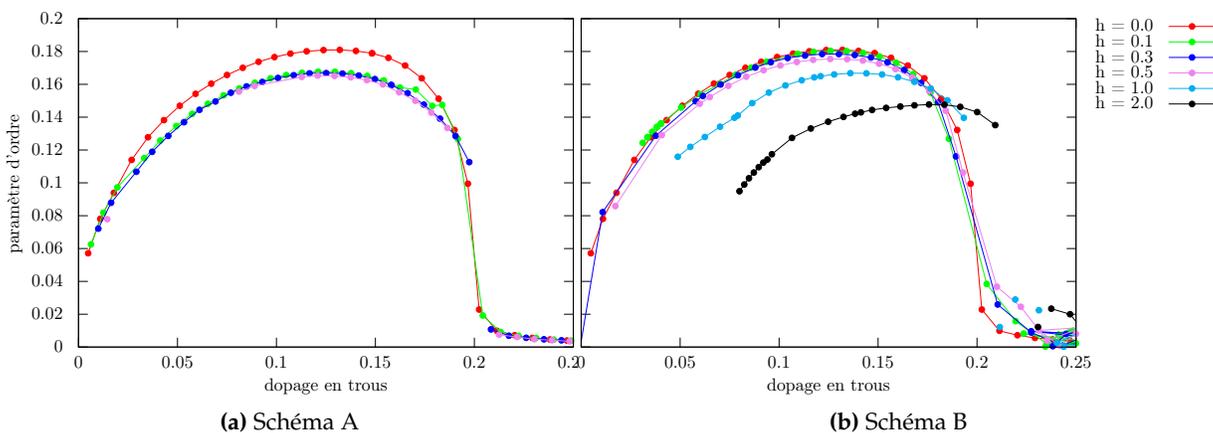


FIGURE 3.1 Paramètre d'ordre supraconducteur à différentes forces d'impureté h dans le système 2x2-9C avec sauts au premier voisin seulement.

Dans les diagrammes de phase correspondant au YBaCuO (Fig. 3.2), l'effet de l'impureté se fait ressentir de façon discontinue dans les deux schémas, et ce sans différence significative

pour de petites valeurs de h . On peut remarquer qu'avec une force d'impureté plus grande, tout comme dans le cas du terme de saut limité aux premiers voisins, il y a un glissement du dôme supraconducteur dans le schéma B.

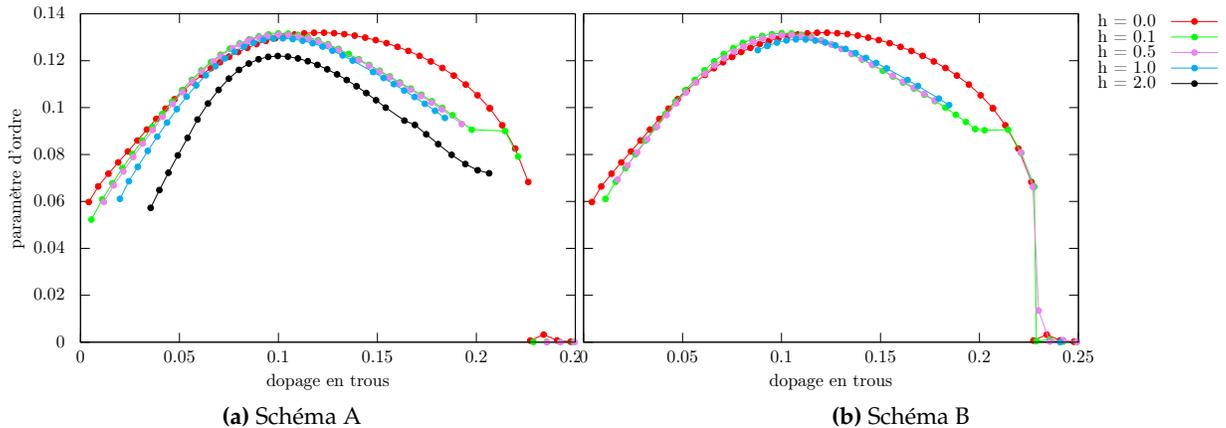


FIGURE 3.2 Paramètre d'ordre supraconducteur à différentes forces d'impureté h dans le système à 36 sites avec les paramètres du YBaCuO.

Ce glissement peut être attribué à un effet de dilution provenant de l'impureté, qui devrait être présent dans les deux schémas. Les sites d'impureté sont moins occupés que les autres sites du réseau. Cela signifie qu'à dopage constant, le dopage du reste du réseau est augmenté avec une augmentation de l'amplitude du potentiel d'impureté. Comme on peut l'observer dans la figure 3.3, le dôme supraconducteur n'est pas déplacé par rapport à la densité moyenne d'électrons lorsque l'on exclut les sites d'impureté de la mesure de la densité. Cela nous indique qu'un effet de l'impureté dont le champ moyen dynamique est incapable de tenir compte n'est pas présent dans la solution des amas. En effet, cet effet de dilution est présent dans les deux approximations, mais ne déplace pas le dôme supraconducteur dans le schéma A. En fait, c'est si l'on trace le dôme supraconducteur par rapport à la densité d'électrons du réseau excluant les sites d'impureté que l'on observe un glissement du dôme, mais vers le demi-remplissage dans ce cas-là. Il est possible qu'un glissement vers les dopages plus élevés soit présent dans la solution exacte au modèle, mais il serait certainement moindre que ce qui est observé dans le schéma B. Pour savoir si cet effet est complètement un artéfact de l'approximation, il faudrait refaire les calculs avec des amas plus grands.

Dans toutes les figures où on peut remarquer un effet discontinu en fonction de h sur le dôme supraconducteur, on peut aussi remarquer qu'il y a très peu de mouvement supplémentaire du dôme. Il semblerait que l'effet de l'impureté soit saturé tant que l'amplitude est inférieure au terme de sauts t .

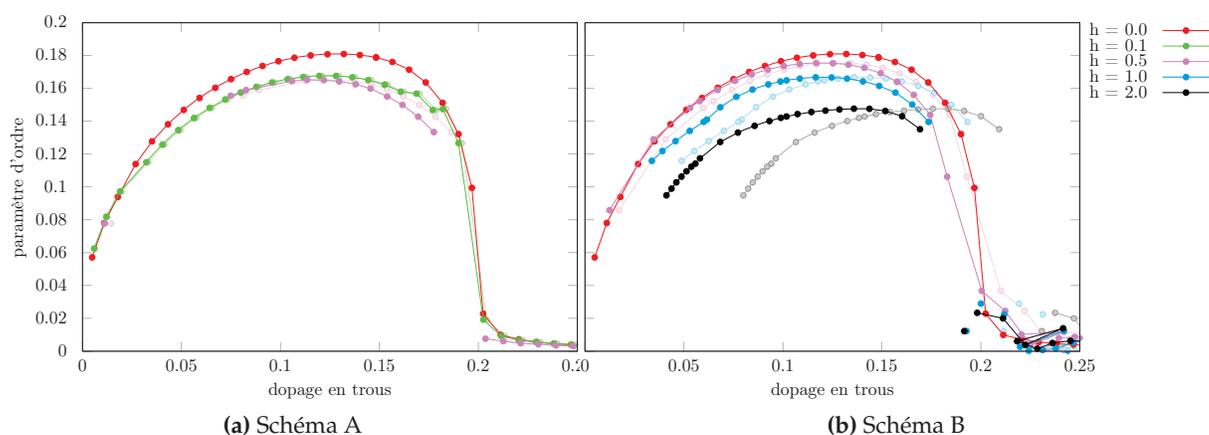


FIGURE 3.3 Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage du réseau, calculé en excluant les sites d'impureté, avec les sauts aux premiers voisins seulement. En pâle, les données avec le remplissage du réseau entier, comme à la figure 3.1.

Dans les figures 3.2a et 3.1b, on voit que le dopage critique de la phase supraconductrice est déplacé vers les dopages supérieurs avec une augmentation de h . On peut remarquer à la figure 3.4a qu'une fois les sites d'impuretés retirés du calcul de la densité, le dopage critique semble de nouveau être nul. Ceci est une indication que la cause de la suppression du paramètre d'ordre supraconducteur est la transition de Mott, tout comme dans le cas sans impureté.

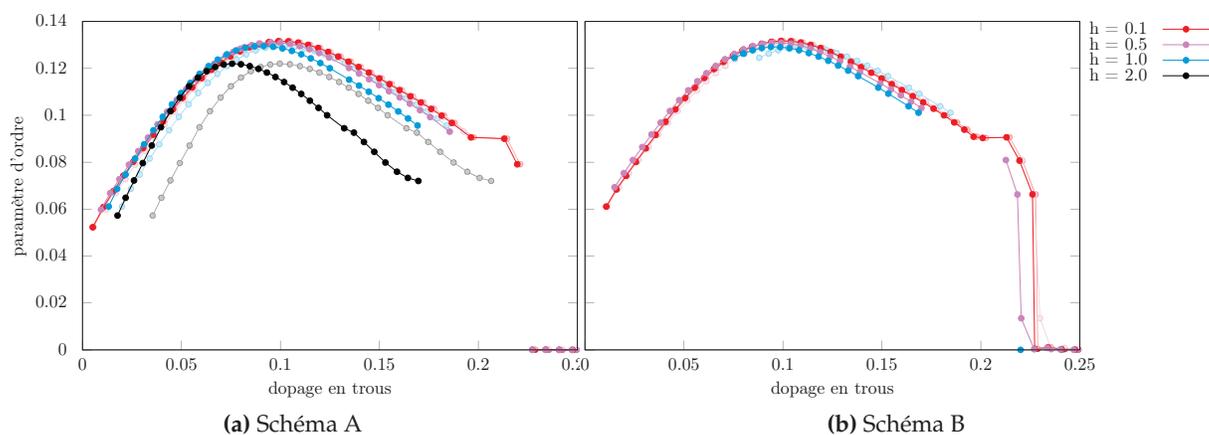


FIGURE 3.4 Paramètre d'ordre supraconducteur par rapport au remplissage du réseau, calculé en excluant les sites d'impureté avec les paramètres de bande du YBCO. En pâle, les données avec le remplissage du réseau entier, comme à la figure 3.2.

Contrairement à la supraconductivité, le dopage critique de la phase antiferromagnétique se rapproche du demi-remplissage avec l'augmentation de la force de l'impureté, ce

qu'on peut observer à la figure 3.5. Ce déplacement ne serait qu'accentué si l'on effectuait la mesure du dopage en excluant les sites d'impuretés. À cause de cette différence dans la façon dont les deux phases réagissent, il est donc clair que la présence de ce potentiel d'impureté est défavorable à la coexistence de l'antiferromagnétisme et de la supraconductivité. On peut aussi remarquer dans cette figure la présence d'une zone à faible dopage où plusieurs points sont présents au même dopage. En l'absence d'impureté, il s'agit d'une hystérèse due à une transition du premier ordre entre deux états antiferromagnétiques. On sait que dans les vrais matériaux, cette transition n'est pas présente. Il s'agit d'une zone de dopage où la méthode d'optimisation nous fait faux bond. Ce problème est au moins en partie dû aux aspects arbitraires de la fonction de poids de la CDMFT présentée à la section 2.3.3.

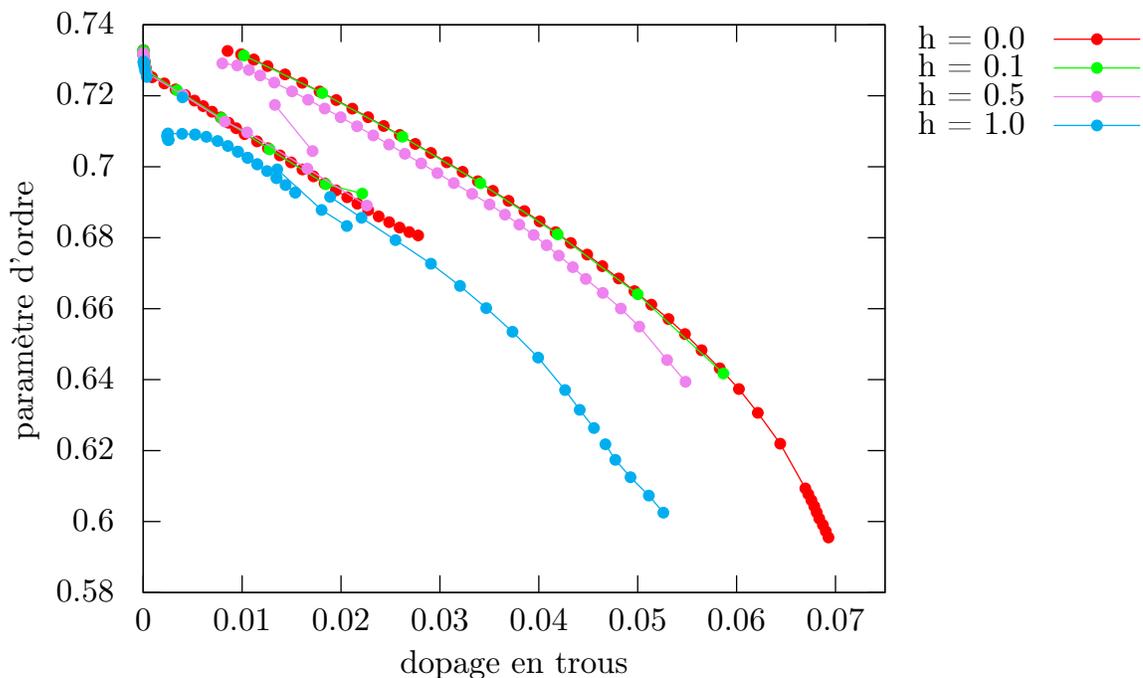


FIGURE 3.5 Paramètre d'ordre antiferromagnétique à différentes forces d'impureté h dans le système $2 \times 2-9C$ avec les paramètres du YBaCuO dans le schéma A.

3.2.2 Système à 100 sites

À la figure 3.6, on peut remarquer que la composante discontinue de l'effet de l'impureté est différente. En effet, la réduction du paramètre d'ordre est moins prononcée sur tout le domaine et la légère augmentation aux environs du dopage optimal beaucoup plus claire. Il semblerait donc que cet effet discontinu soit relié au changement de périodicité du système. C'est sans surprise qu'on remarque que le changement dû à l'augmentation de la force de

l'impureté est réduit par rapport au système à 36 sites, car les sites plus éloignés ressentent que très peu l'effet de l'impureté et sont très nombreux. Leur contribution au paramètre d'ordre domine.

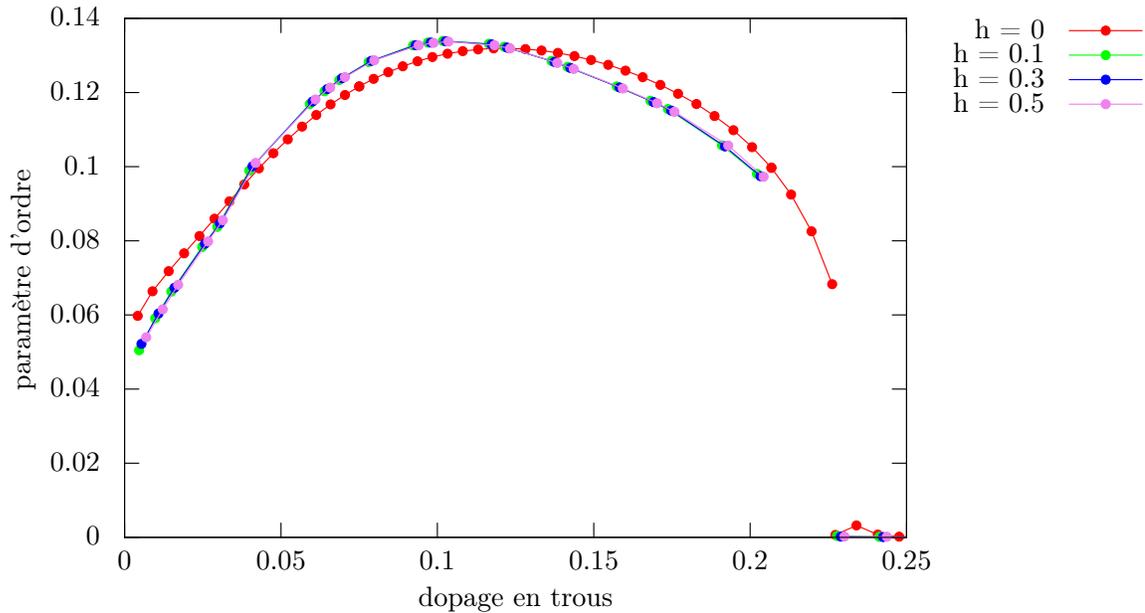


FIGURE 3.6 Paramètre d'ordre supraconducteur à différentes forces d'impureté h dans le système à 100 sites avec les paramètres du YBaCuO.

3.3 Densité d'états locale

La densité d'états a été calculée avec les paramètres du YBCO dans le système à 36 et à 100 sites, dans trois phases : supraconductrice, antiferromagnétique et normale. Ces calculs ont été faits avec des fonctions de Green obtenues par CDMFT et par champ moyen. Pour la phase supraconductrice, on se concentre sur les énergies de l'ordre du gap supraconducteur, celui-ci étant plutôt étroit par rapport à la largeur de bande.

Les calculs de champ moyen ne sont pas autocohérents ou optimisés avec un critère physique. Les valeurs des champs de Weiss ont été choisies de façon à ce que le gap supraconducteur soit d'une grandeur comparable à celle obtenue par CDMFT. Ce calcul de champ moyen est fait dans le but de distinguer les différences dans les prédictions des deux méthodes. Cette comparaison entre le champ moyen et le champ moyen dynamique nous permettra d'affirmer que le gap supraconducteur est plus résilient à la présence d'impuretés dans un système fortement corrélé. Les pics d'états liés à l'impureté qui sont à l'intérieur du gap sont beaucoup moins grands et se propagent moins loin autour de celle-ci.

Une comparaison sera faite avec des résultats expérimentaux de microscopie à effet tunnel. Cette comparaison montrera un accord qualitatif dans les variations de hauteurs des pics et la façon dont ils sont corrélés avec la largeur du gap. De plus, on remarquera un accord presque quantitatif dans la largeur des gaps supraconducteurs, lorsqu'on utilise une valeur raisonnable pour t . Avec les données provenant de la CDMFT, cela nous montre que la supraconductivité est plus résiliente à la présence d'impuretés que ce que les théories de champ moyen prédisent.

On observera aussi que les variations spatiales du gap supraconducteur deviennent plus importantes à l'approche du demi-remplissage. Cette observation est cohérente avec le déplacement du dopage critique de la phase avec l'augmentation de l'amplitude du potentiel d'impureté h .

3.3.1 Champ moyen

Ces données sont obtenues par diagonalisation exacte d'un système sans interaction, avec 36 sites par maille élémentaire et les termes des sauts du YBCO. Un champ moyen supraconducteur est imposé de telle sorte que la largeur du gap supraconducteur soit comparable à celle obtenue de façon auto cohérente grâce à la CDMFT.

À la figure 3.7, on peut observer la formation de pics de part et d'autre du niveau de Fermi. Il s'agit d'un état résonant lié à l'impureté avec un temps de vie fini [7]. Comme la densité est maintenue constante pour toutes les valeurs d'impureté présentée, la densité moyenne est de façon effective augmentée sur tous les sites sauf sur ceux directement affectés par l'impureté, ou elle est réduite. Cela se traduit en un déplacement des bandes sur les différents sites : vers les énergies positives sur les sites d'impureté et vers les énergies négatives sur les autres. Avec les paramètres considérés, la bande à un maximum près de $\omega = -1$ en l'absence d'impureté. Le déplacement des bandes explique bien les variations de hauteur des pics sur les différents sites.

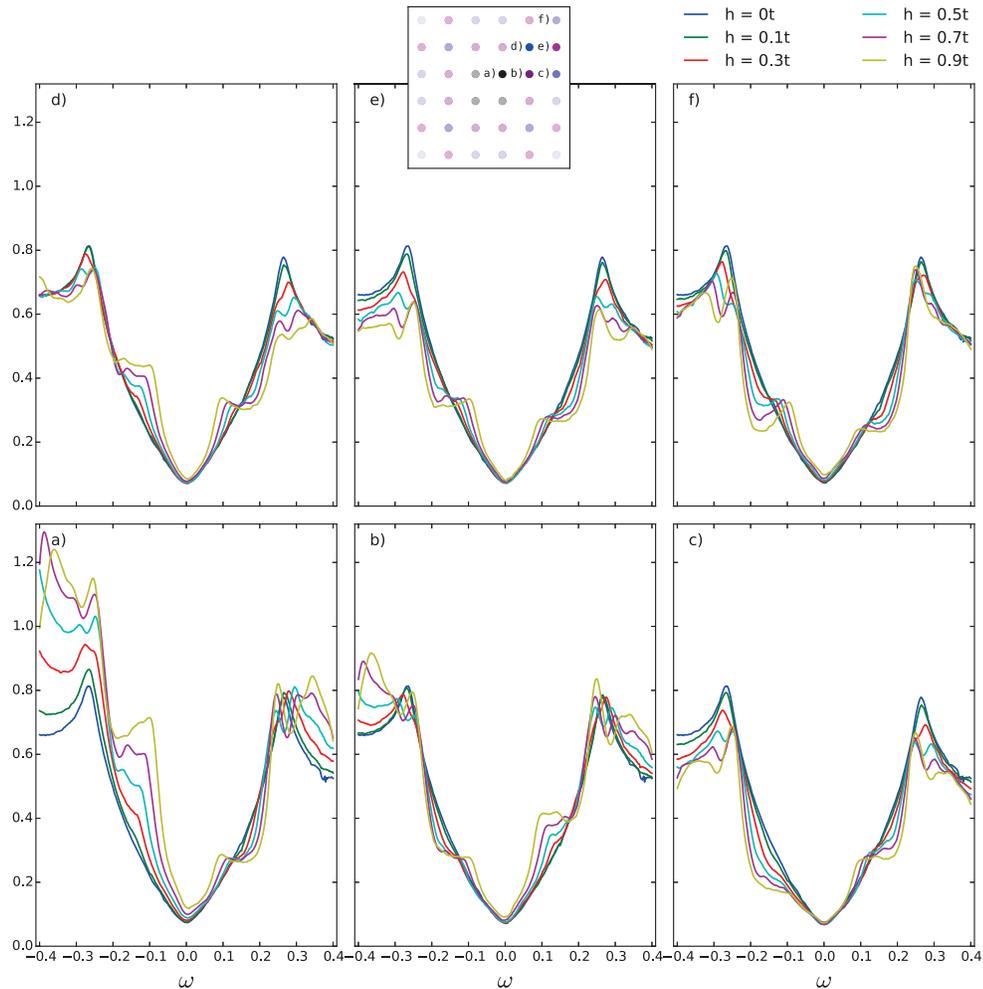


FIGURE 3.7 Densité d'états locale à un dopage en trous de 6% avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 36 sites, en champ moyen. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

3.3.2 Système à 36 sites

À la figure 3.8, on peut voir que les modulations spatiales de la densité d'états deviennent graduellement plus importantes en s'approchant du demi-remplissage. Ceci s'explique bien par le fait que le gap de Mott s'approche graduellement du niveau de Fermi. Un effet de l'impureté, au-delà de créer des états à l'intérieur du gap supraconducteur, est de déplacer la densité d'états des fréquences négatives vers les fréquences positives sur les sites d'impureté et le contraire sur les autres sites. Il s'agit de l'effet de dilution discuté à la section précédente.

Comme les valeurs de h sont toujours plus petites que U , la répulsion coulombienne, la double occupation des sites demeure très peu favorable. Ceci signifie que pratiquement aucun poids spectral ne peut être transféré entre la bande de Hubbard supérieure et la bande inférieure dans laquelle se trouve le niveau de Fermi. De ce fait, plus le remplissage diminue, plus le transfert de poids spectral doit être fait près, ou encore à l'intérieur, du gap supraconducteur, tel qu'observé.

En comparant les figures 3.9, 3.10, 3.11 avec la figure 3.7, on peut tout de suite observer que l'impact de l'impureté est moins important dans le système corrélé que dans les solutions obtenues à l'aide du champ moyen. Les effets de l'impureté sur la densité d'états locale sont plus confinés : les sites c), e) et f) sont très peu affectés par l'augmentation de la force de l'impureté pour un dopage de 10% et 8%. La densité d'états à l'intérieur du gap n'est que faiblement modulée. Une autre différence entre les données de champ moyen et celle de CDMFT est dans la façon dont la hauteur des pics au bord du gap varie en fonction de h . Dans le cas du champ moyen, on observe que la hauteur des pics monte sur les sites d'impureté et diminue sur les autres. Dans le cas des électrons corrélés, le comportement est plus varié. Ces différences sont suffisantes pour que le déplacement des bandes ne soit pas suffisant pour expliquer les variations dans la hauteur des pics. Dans les cas dopés à 8% et à 10% on peut voir que :

1. sur les sites d'impureté, le pic à fréquence négative devient plus haut et se déplace légèrement vers l'intérieur du gap. Celui à fréquence positive est à peu près immobile ;
2. sur les premiers voisins, c'est le pic à fréquence négative qui est à peu près immobile, celui à fréquence positive baisse et se déplace légèrement vers l'intérieur du gap ;
3. sur les deuxième et quatrième voisins, on voit une diminution de la hauteur du pic à fréquence négative ;
4. quant au site le plus éloigné, il est presque inchangé, peu importe la force d'impureté.

Des pics suffisamment clairs se forment à l'intérieur du gap supraconducteur dans les panneaux b) des figures 3.9 et 3.10. Ces pics sont certainement dus à un état lié à l'impureté. Aux environs de la même énergie, $\omega = \pm 0.1$, des pics sont parfois visibles sur les autres sites de la maille, mais leur hauteur est la plupart du temps trop faible pour être certain qu'il ne s'agisse pas d'un accident.

À la figure 3.13, on peut voir que la densité d'états locale dans la phase normale est peu affectée par la présence de l'impureté. L'effet se limite à une augmentation de la densité d'états près du niveau de Fermi et dans les fréquences positives sur le site de l'impureté. Les autres sites ne sont pas affectés de façon notable.

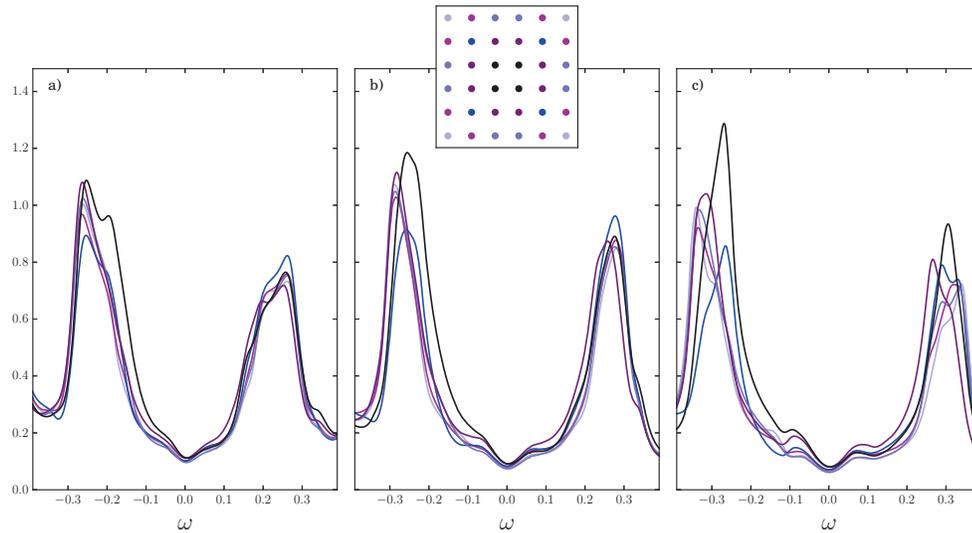


FIGURE 3.8 Densité d'états locale avec une force d'impureté $h = 0.5t$ avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 36 sites, dans le schéma A. Chaque panneau montre les courbes pour un dopage en trous différents : 10% en a) , 8% en b) et 6% en c). Les courbes associées à un site plus près de l'impureté sont plus foncées. Calculé avec la CDMFT.

On peut observer une différence marquée dans le comportement du gap en fonction de la force de l'impureté entre les deux schémas pour simuler le réseau. L'asymétrie de la densité d'états est accentuée par la présence de l'impureté dans le schéma A (figure 3.11) sur les sites d'impureté, les premiers et deuxièmes voisins. En effet, sur ces trois sites, un des deux pics reste pratiquement immobile en fonction de h . Alors qu'à la figure 3.12, on peut voir que la densité d'états est affectée de façon semblable de part et d'autre du niveau de Fermi. Cette asymétrie dans la densité d'états dans le schéma A pourrait être une conséquence de résonances à l'intérieur des amas avec un site d'impureté. Ce genre de résonances est forcément moins présent dans le schéma B puisqu'il doit provenir des paramètres des orbitales de bain dans ce cas. Encore une fois, les calculs devraient être refaits sur des amas plus grands pour savoir dans quelle mesure la présence d'une impureté affecte le gap supraconducteur de façon asymétrique.

Dans le cas de la phase antiferromagnétique, on voit à la figure 3.14 que la présence de l'impureté supprime la densité d'états au niveau de Fermi sur tous les sites affectés indirectement et l'augmente sur les sites directement affectés. Il est aussi apparent que la présence d'un ordre est un facteur important dans la portée spatiale de l'impureté. En effet, dans la phase normale (sans ordre, à la figure 3.13) l'effet de l'impureté est essentiellement inexistant sur les sites indirectement affectés, contrairement au cas de la supraconductivité et de l'antiferromagnétisme.

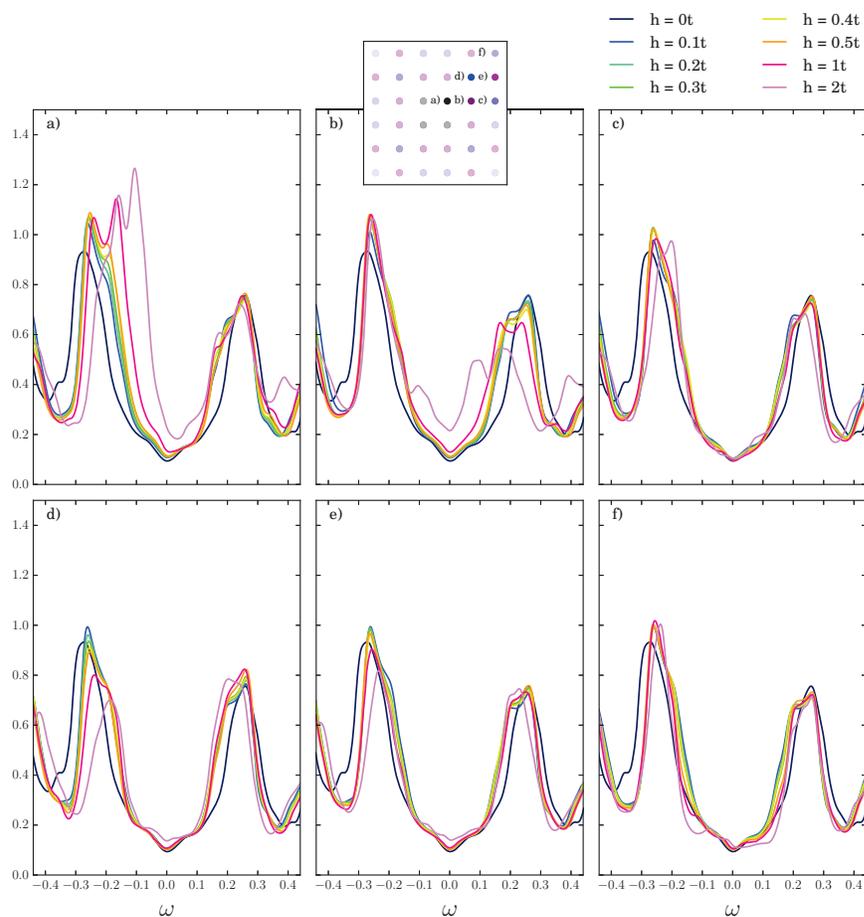


FIGURE 3.9 Densité d'états locale à un dopage en trous de 10% avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 36 sites, dans le schéma A. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

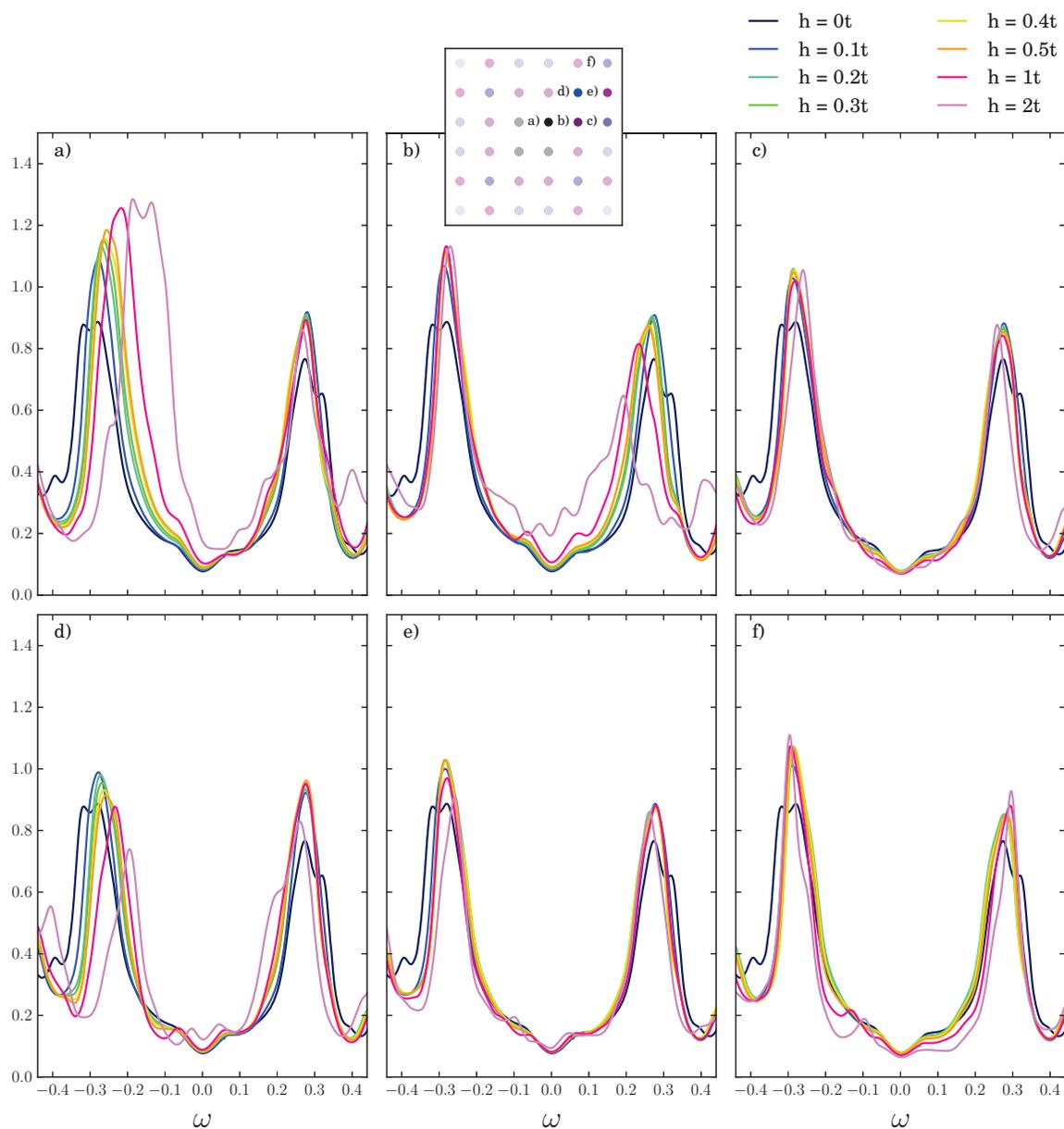


FIGURE 3.10 Densité d'états locale à un dopage en trous de 8% avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 36 sites, dans le schéma A. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

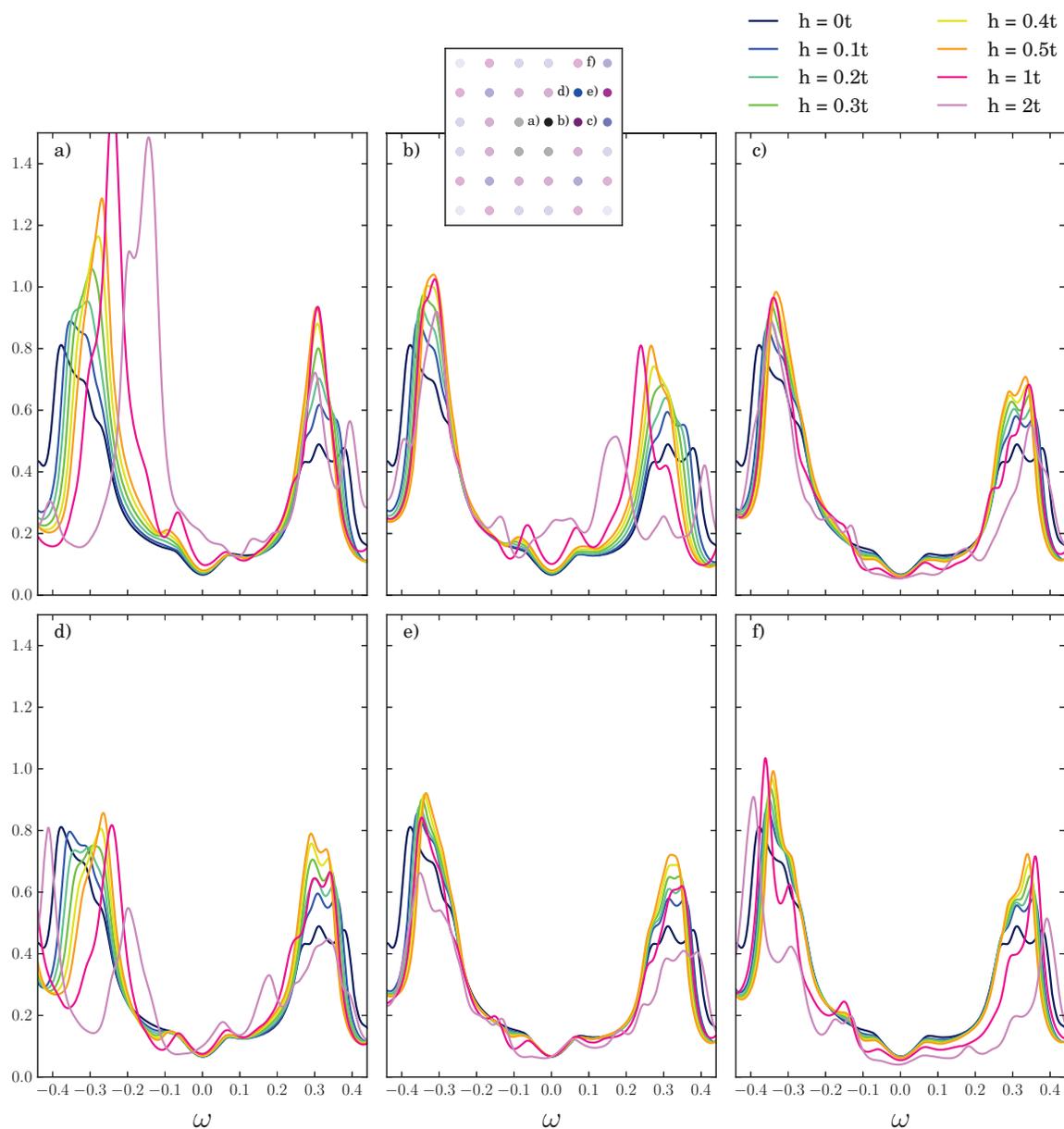


FIGURE 3.11 Densité d'états locale à un dopage en trous de 6% avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 36 sites, dans le schéma A. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

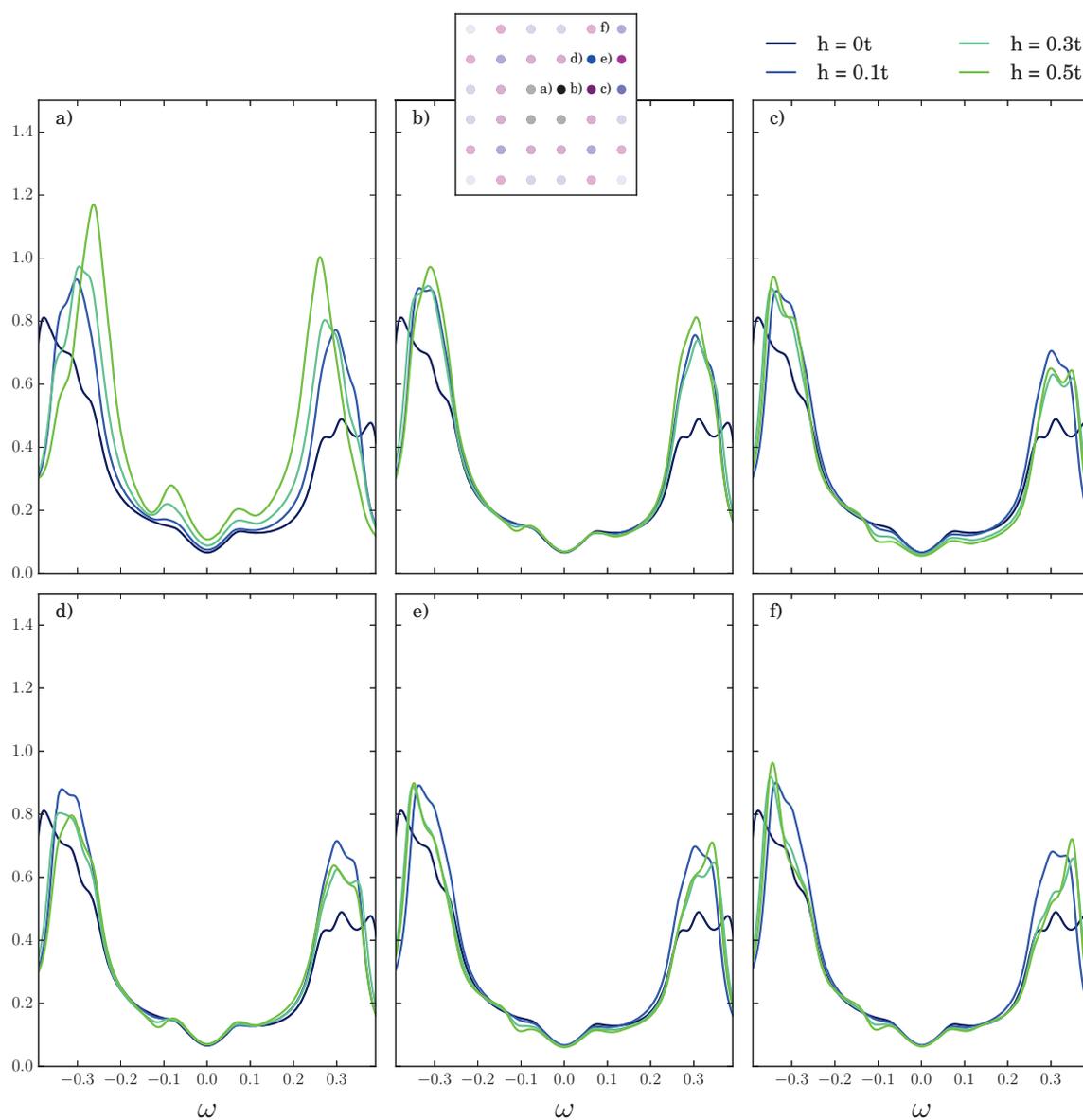


FIGURE 3.12 Densité d'états locale à un dopage en trous de 6% avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 36 sites, dans le schéma B. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

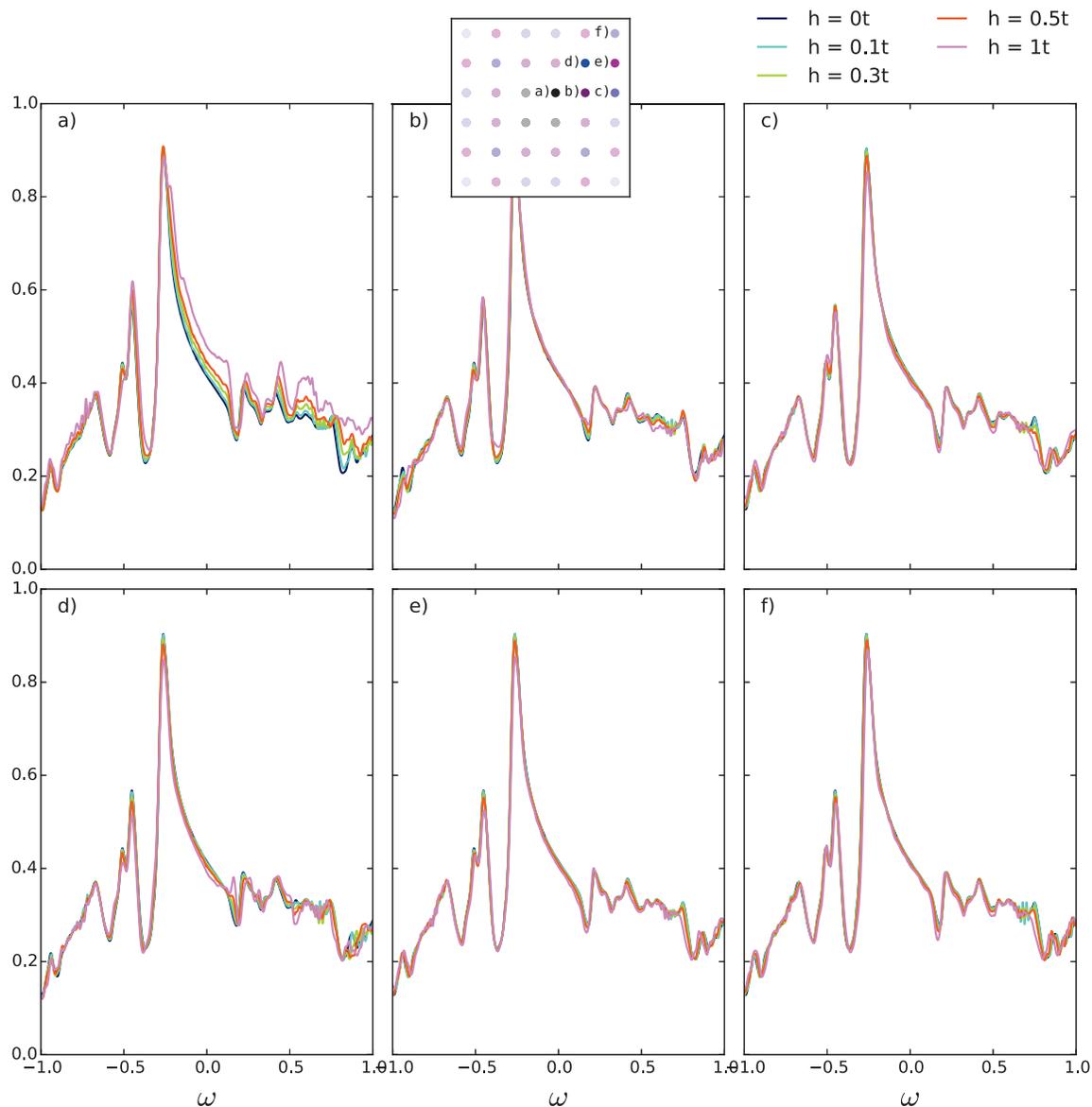


FIGURE 3.13 Densité d'états locale dans la phase normale à un dopage en trous de 7% avec les paramètres du YBaCuO sur le système à 36 sites, dans le schéma A. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

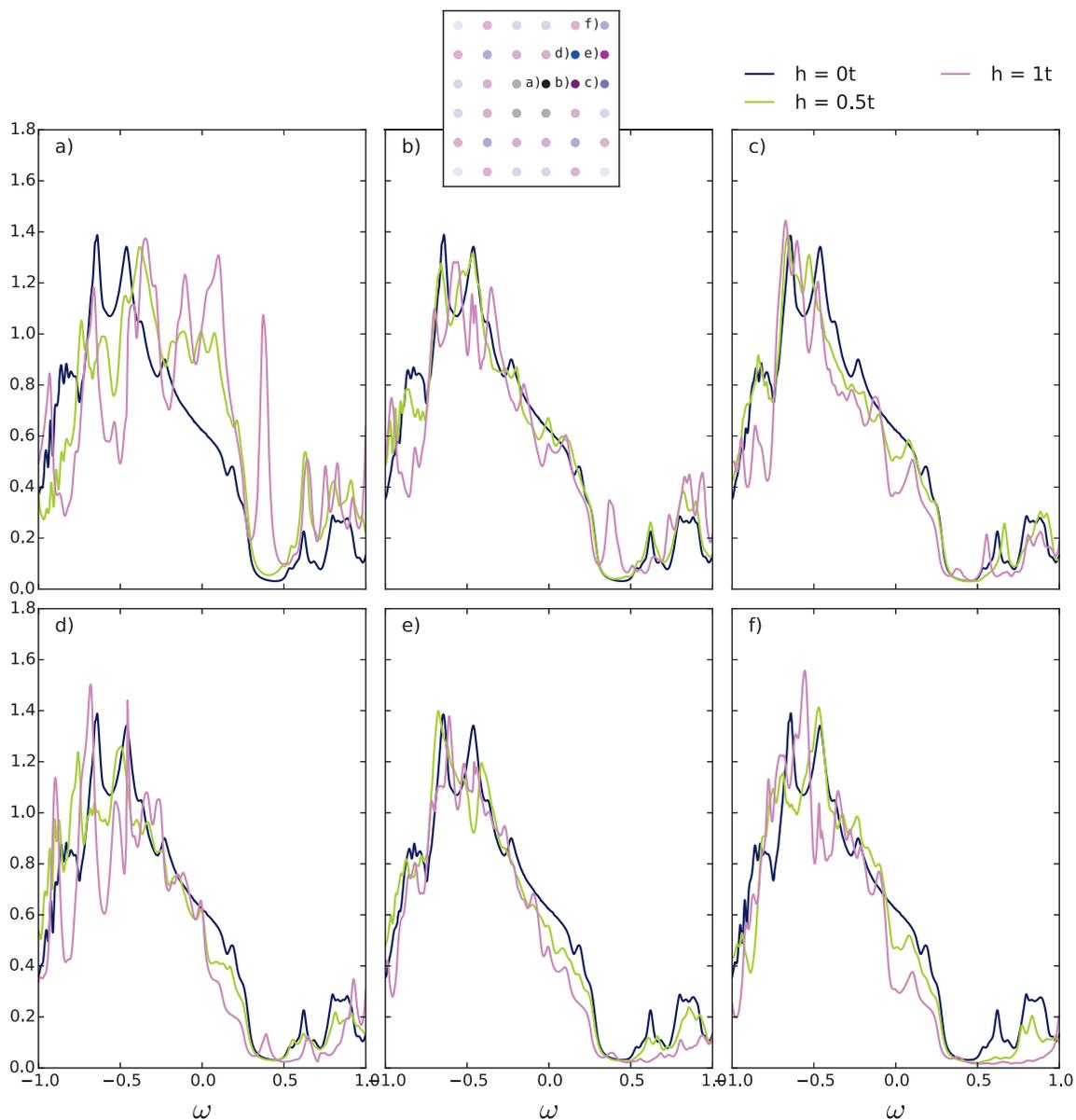


FIGURE 3.14 Densité d'états locale dans la phase antiferromagnétique à un dopage en trou de 5% avec les paramètres du YBaCuO sur le système à 36 sites, dans le schéma A. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

3.3.3 Système à 100 sites

Dans ce système, les impuretés sont plus distantes les unes des autres. De ce fait, la comparaison avec le système à 36 sites devrait nous apprendre dans une certaine mesure quels effets proviennent de la répétition de l'impureté et lesquels viennent simplement de la proximité du site avec le potentiel d'impureté.

Dans la figure 3.15, on peut voir un changement marqué avec les données du système à 36 sites. Sur les sites directement affectés par l'impureté, la densité d'états est augmentée partout à l'intérieur du gap. Les pics sont plus hauts pour les sites plus près de l'impureté, ce qui n'est pas le cas dans le système à 36 sites. Seuls les troisièmes voisins dérogent à cette tendance, leur pic à fréquence négative est un peu moins haut que celui des sixièmes voisins. Comme dans le système précédent, l'effet de l'impureté devient plus marqué en approchant du demi-remplissage.

Sur le panneau *a*) des figures 3.16, 3.12 et 3.11, on peut voir que le déplacement du pic à fréquence négative en fonction de h est très similaire dans les différents schémas et systèmes. Il s'agit donc d'un effet robuste et indépendant de l'impureté sur le schéma et du système. Une différence marquée avec le système à 36 se trouve dans le comportement de la densité d'états à l'intérieur du gap supraconducteur. Sur aucun des sites, l'épaule dans le gap qui est présent en l'absence d'impureté ne devient plus défini comme c'est le cas dans le système à 36 sites pour $h \leq 1$. Ce système nous apprend donc que le déplacement du pic à fréquence négative sur les sites d'impureté n'est pas dû à une résonance, contrairement à l'amplification des pics déjà présents à l'intérieur du gap. Il supporte aussi l'idée que l'approche de la phase isolante augmente l'effet de l'impureté sur la supraconductivité.

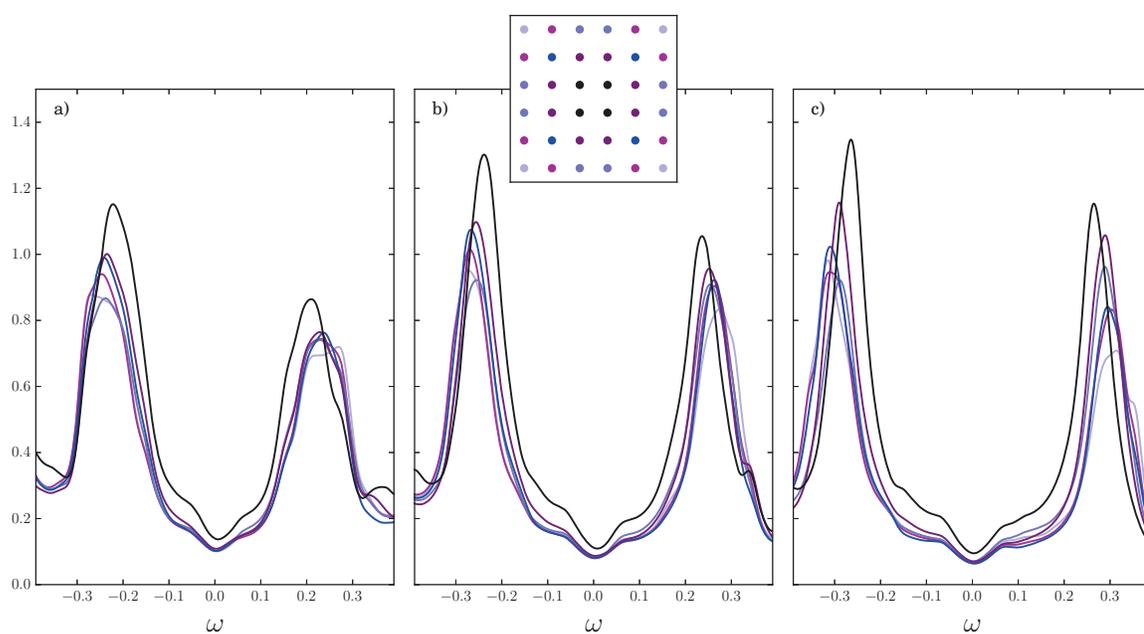


FIGURE 3.15 Densité d'états locale avec une force d'impureté $h = 0.5t$ avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 100 sites, dans le schéma B. Chaque panneau montre les courbes pour un dopage en trous différent : 10% en *a*) , 8% en *b*) et 6% en *c*). Les courbes associées à un site plus près de l'impureté sont plus foncées. Calculé avec la CDMFT.

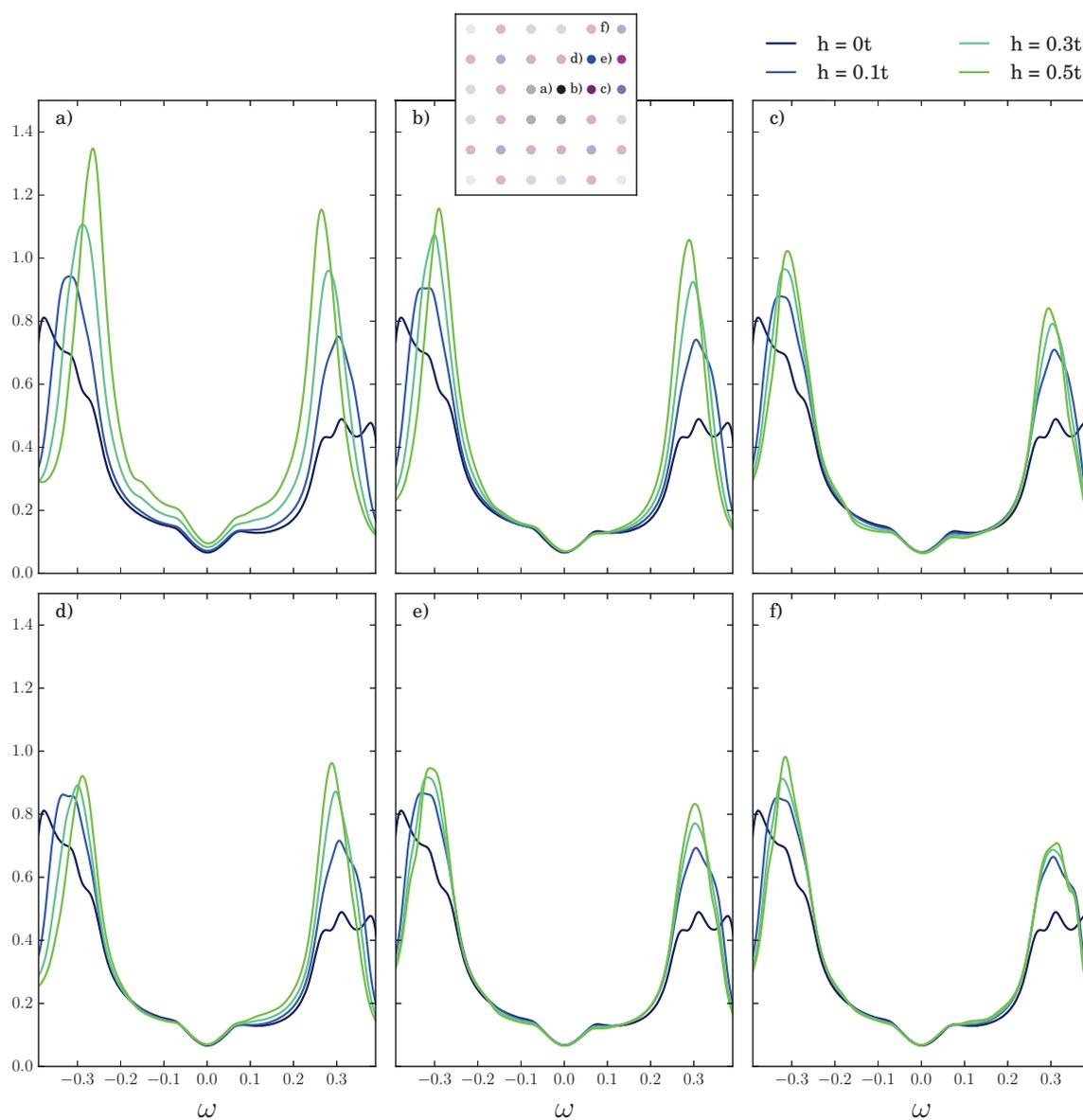


FIGURE 3.16 Densité d'états locale à un dopage en trous de 6% avec les paramètres du YBaCuO, sur le système à 100 sites, dans le schéma B. Chaque panneau contient les courbes de densité d'états d'un site pour différentes forces d'impureté. Le site auquel correspond chaque panneau est indiqué dans l'illustration de l'amas au-dessus du panneau *b*). Dans cette illustration, les sites d'impureté sont les quatre sites noirs au centre.

3.3.4 Comparaison avec l'expérience

Dans les données de STM, à la figure 3.18, les auteurs de l'article notent la présence d'un petit épaulement dans le gap supraconducteur qu'ils mesurent, en plus de petits pics au bord du gap supraconducteur. La largeur de leur gap supraconducteur a une dépendance spatiale importante et désordonnée comme on peut le voir au panneau B de la figure 3.18. La présence de désordre rend la comparaison avec les données de CDMFT un peu ambiguë. Les modulations présentes dans l'expérience peuvent être interprétées comme la conséquence de deux phénomènes : une variation de la distance avec les sites d'impuretés ou encore une variation locale de la force du potentiel d'impureté.

Dans les deux cas, les résultats de CDMFT sont qualitativement semblables : lorsque le gap est plus étroit, les pics au bord du gap deviennent mieux définis, tout comme dans les données de l'expérience. Comme on peut l'observer à la figure 3.17, les gaps supraconducteurs ont des largeurs comparables et un épaulement est visible dans les fréquences proches de zéro. On sait maintenant que la brisure de symétrie de translation causée par la séparation du réseau en amas est à l'origine de cet épaulement dans les simulations. Cette brisure agit comme une modulation des termes de saut inter amas. Cet accident nous renseigne tout de même sur une cause potentielle d'un tel épaulement dans l'expérience : il pourrait s'agir d'un effet de la coexistence de la supraconductivité avec une phase qui brise la symétrie de translation du réseau[25].

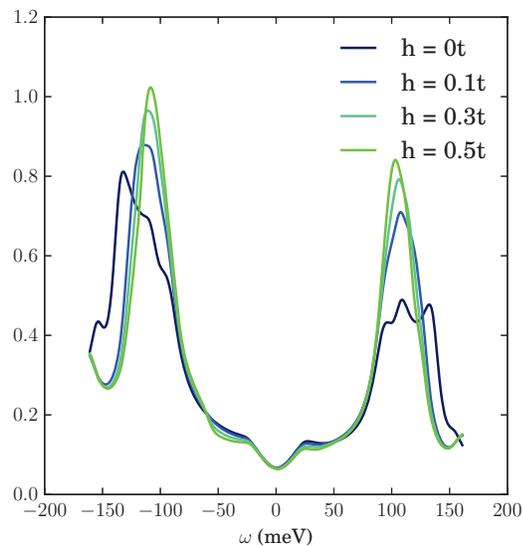


FIGURE 3.17 Densité d'état locaux à différentes force d'impureté, avec une échelle de fréquences en électron-volt. Une valeur de $t = 350\text{eV}$ a été utilisée[26].

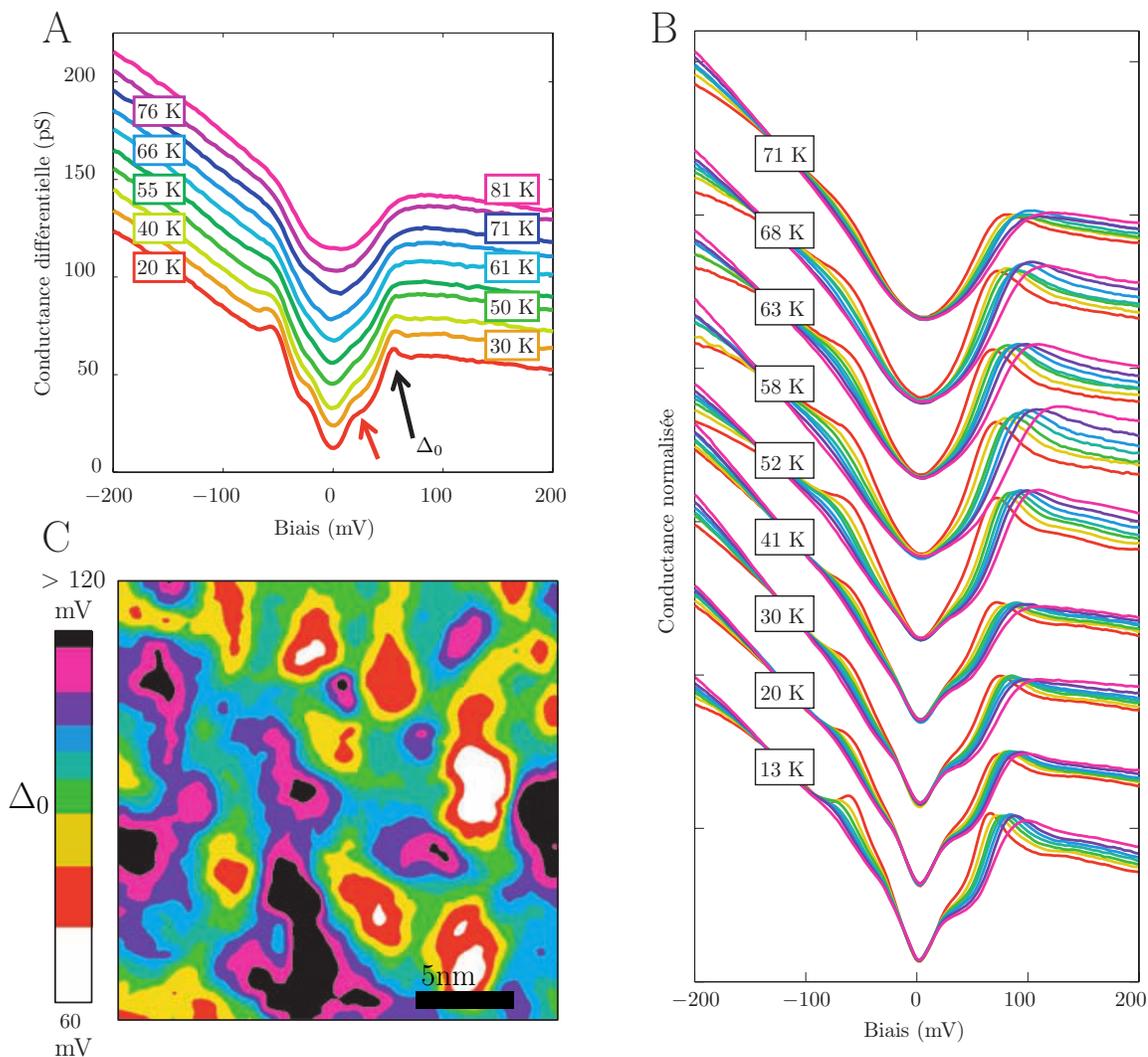


FIGURE 3.18 Données expérimentales de STM sur $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ [27]. (A) spectre pris sur un site atomique sur un échantillon sous-dopé avec une température critique de 61 Kelvin à plusieurs températures. Ces spectres montrent deux pics ou épaulements. Le plus petit, marqué par la flèche rouge, disparaît à plus haute température. Le plus gros, Δ_0 , est identifié au gap supraconducteur à l'anti-nœud. (B) Spectres ordonnés selon la température et la largeur de Δ_0 et moyennés dans les différentes régions identifiées en (C). Données prises sur un échantillon du même matériau, mais avec une température critique de 58 Kelvin. Les données sont normalisées par la moyenne sur la plage de biais montrée et décalées pour des températures différentes. (C) Une carte des variations de Δ_0 à 13 Kelvin.

3.4 Observables locales

On verra qu'avec la CDMFT la densité d'électrons se distribue de façon différente que dans la solution en champ moyen. En champ moyen, la densité d'électrons est maximale sur les sites adjacents à l'impureté et diminue en oscillant à partir de ce point. Au contraire, dans la solution CDMFT, la densité d'électrons augmente en s'éloignant des sites d'impureté et devient maximale aux sites les plus éloignés.

Dans les deux cas, on verra que la supraconductivité demeure spatialement uniforme.

On verra aussi que les solutions CDMFT pour la phase supraconductrice et antiferromagnétique exhibent un peu de nématicité. Celle-ci s'établit de façon spontanée dans les deux cas, ce qui est plutôt surprenant. On sait que la présence d'interactions amplifie considérablement l'anisotropie des propriétés électroniques causée par une petite brisure de la symétrie C_4 dans les paramètres du hamiltonien [28]. C'est ce qu'on appelle la «nématicité dynamique».

3.4.1 Maille de 36 sites

À la figure 3.19, on peut observer qu'avec la solution de champ moyen, la densité électronique est presque uniforme. Une inspection plus minutieuse révèle que la densité est un peu plus élevée sur les sites voisins de l'impureté et qu'elle diminue en s'éloignant de l'impureté. Ce comportement est à l'opposé de celui observé dans la solution CDMFT, comme on peut le voir aux figures 3.20 et 3.21. Dans ce cas-ci on voit plutôt que la densité est maximale sur les sites les plus éloignés de l'impureté et diminue graduellement à mesure que l'on s'en approche. Cette différence s'explique assez naturellement par l'interaction d'échange ressentie sur l'amas en CDMFT. En effet, celle-ci sera minimale entre les sites d'impureté et ses voisins à cause de la plus faible densité d'électrons sur l'impureté. Il s'ensuit qu'il est un peu moins favorable pour les électrons d'occuper les sites voisins de l'impureté. On peut invoquer le même argument pour les sites suivants, l'effet se propage donc au-delà du premier voisin.

À la figure 3.19, on peut constater que l'appariement supraconducteur est constant partout dans la maille. Au premier coup d'œil, ce n'est pas le cas dans les données de CDMFT qu'on voit à la figure 3.20. Ces modulations sont en fait un artéfact de la séparation de la maille élémentaire en amas : l'appariement est systématiquement plus faible sur les liens qui ont été coupés. On ne peut pas tenir compte de ces liens pour tirer des conclusions. Si on se concentre sur les amplitudes d'appariement à l'intérieur des amas, on peut observer

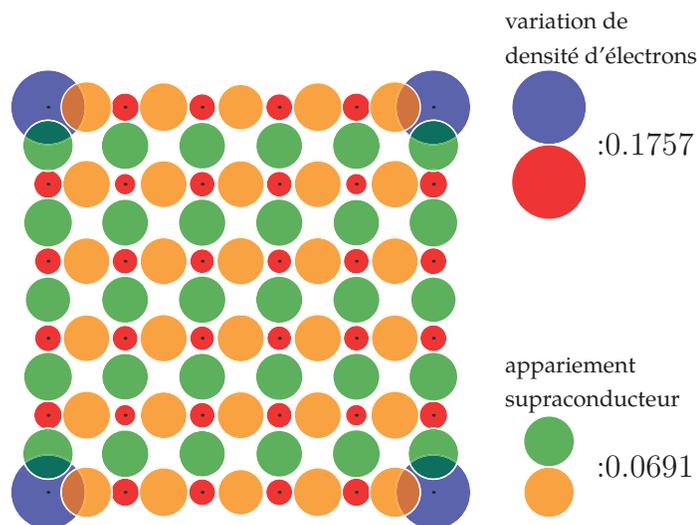


FIGURE 3.19 Profil de la densité électronique et de l'appariement supraconducteur, obtenus par diagonalisation exacte d'un système sans interaction avec un champ moyen supraconducteur. Les cercles bleus indiquent une densité d'électron inférieure à la valeur moyenne du réseau et les cercles rouges une densité supérieure à la moyenne. Les cercles orange et vert indiquent la valeur moyenne de l'appariement supraconducteur entre les sites adjacents, les deux couleurs ont des phases opposées. En ce qui concerne l'appariement, la surface des cercles est proportionnelle à la valeur de l'observable, tandis que pour la densité la surface est proportionnelle à la déviation à la moyenne. Les valeurs maximales sont indiquées à droite de la maille. La force de l'impureté est $h = 0.5t$, le dopage 8%.

qu'elles sont toutes très semblables, tout comme dans les données de champ moyen. Cette modulation, qui est aussi présente dans l'amplitude de sauts, est ce à quoi l'on attribue l'origine de l'épaulement dans les densités d'états locales.

Dans la phase antiferromagnétique, la densité d'électrons se distribue d'une façon particulière : le maximum de densité et du paramètre d'ordre se trouve sur un carré dont les coins sont formés par les deuxièmes voisins de l'impureté, comme on peut le voir aux figures 3.22a et 3.22b. Les observables sont un peu plus faibles sur les quatre sites situés au centre de la maille. Sur les sites situés horizontalement ou verticalement entre les impuretés, on peut remarquer que la densité d'électrons est plus près de la valeur moyenne et que le paramètre d'ordre y est légèrement plus faible qu'ailleurs. Le paramètre d'ordre est minimal sur les sites d'impureté, tout comme la densité d'électrons. Lorsqu'on observe un calcul de champ moyen donnant des observables similaires, aux figures 3.22c et 3.22d, on peut voir qu'à l'exception des premiers voisins, la densité et le paramètre d'ordre ont le même comportement. La différence observée sur le premier voisin peut être expliquée par l'effet de l'interaction d'échange avec l'impureté, comme dans le cas de la supraconductivité. Vu la similarité avec les données de champ moyen, on peut conclure que le reste des modulations

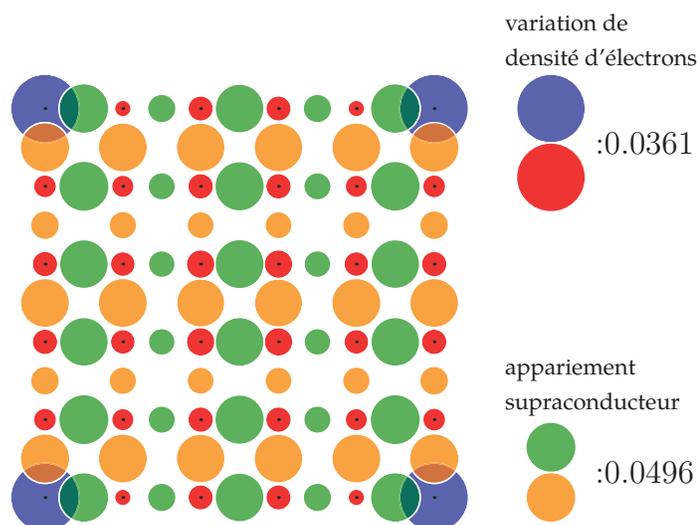


FIGURE 3.20 Profil de la densité électronique et de l'appariement supraconducteur, obtenus par CDFMT. Les cercles bleus indiquent une densité d'électron inférieure à la valeur moyenne du réseau et les cercles rouges une densité supérieure à la moyenne. Les cercles orange et vert indiquent la valeur moyenne de l'appariement supraconducteur entre les sites adjacents, les deux couleurs ont des phases opposées. En ce qui concerne l'appariement, la surface des cercles est proportionnelle à la valeur de l'observable, tandis que pour la densité la surface est proportionnelle à la déviation à la moyenne. Les valeurs maximales sont indiquées à droite de la maille. La force de l'impureté est $h = 0.5t$, le dopage 8%.

sont simplement dues aux oscillations de Friedel provenant des différentes impuretés qui interfèrent.

Un phénomène surprenant peut être observé dans la phase antiferromagnétique et supraconductrice. Il y a la nématicité, une brisure de l'équivalence entre les axes vertical et horizontal. Dans le cas supraconducteur, la densité d'électrons est un peu plus faible sur l'axe horizontal que sur l'axe vertical. La différence est la plus importante pour les premiers voisins de l'impureté à la figure 3.21. Dans le cas de l'antiferromagnétisme (fig. 3.22), l'asymétrie apparaît dans les amplitudes de sauts entre les deuxièmes et troisièmes voisins de l'impureté. Cette nématicité est apparue de façon tout à fait spontanée dans les solutions. Les valeurs de départ utilisés pour les paramètres ne brisaient pas cette symétrie et le hamiltonien ne les brise pas non plus. Il est important de noter que les paramètres utilisés ne sont pas contraints à préserver la symétrie de rotation, mais démarrer l'algorithme d'optimisation avec des valeurs qui respectent une symétrie est normalement suffisant pour la protéger. Comme ce phénomène était tout à fait inattendu, le modèle contraint très probablement la nématicité et elle serait très certainement changée, peut-être même plus importante, si ces contraintes étaient levées. Du fait de ces remarques, il ne serait pas sage de tenter d'en dire plus à ce sujet.

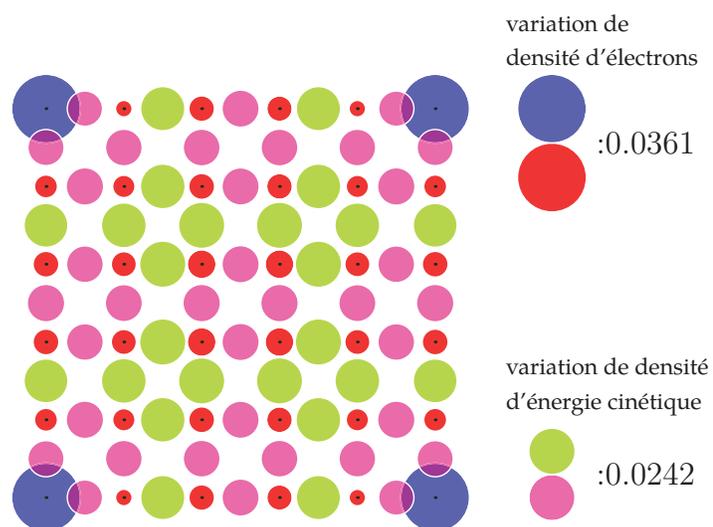


FIGURE 3.21 Profil de la densité électronique et de l'amplitude de saut, obtenu par CDFMT en présence de supraconductivité. Les cercles bleus indiquent une densité d'électron inférieure à la valeur moyenne du réseau et les cercles rouges une densité supérieure à la moyenne. Les cercles magenta et verts indiquent la déviation par rapport à la valeur moyenne de l'opérateur de saut entre les sites adjacents. Les cercles verts indiquent une amplitude inférieure à la moyenne et les cercles magenta supérieurs. La surface des cercles est proportionnelle à la déviation à la moyenne. Les valeurs maximales sont indiquées à droite de la maille. La force de l'impureté est $h = 0.5t$, le dopage 8%.

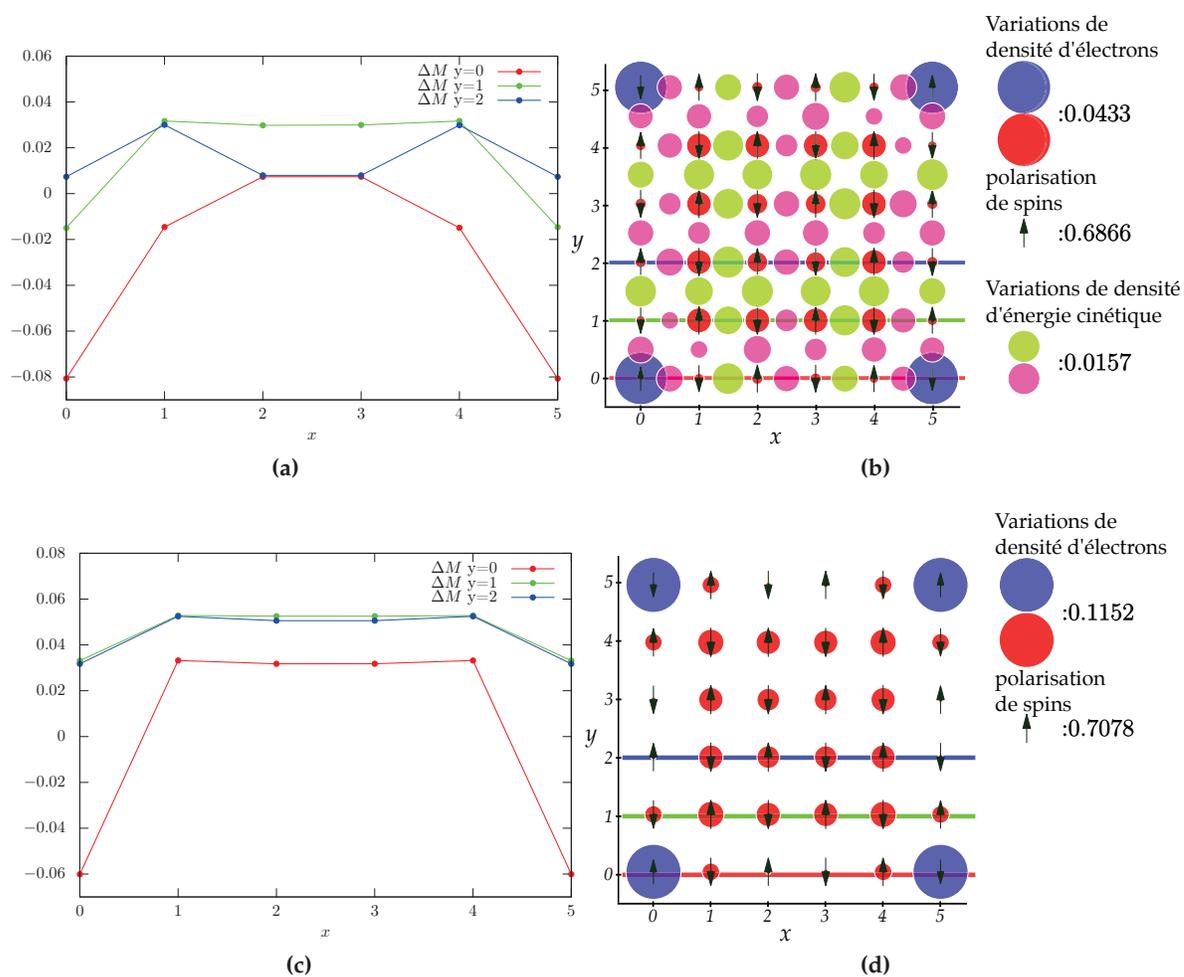


FIGURE 3.22 Profils de la densité électronique et de l'amplitude de saut, obtenus en présence d'antiferromagnétisme. Les figures *a* et *b* sont obtenues par CDMFT, et les figures *c* et *d* par champ moyen. Aux figures *a* et *c* sont illustrées les déviations du paramètre d'ordre antiferromagnétique par rapport à la moyenne. Le chemin dans la maille correspondant à chaque couleur sur les figures *b* et *d*. Figures *b* et *d* : les cercles bleus indiquent une densité d'électrons inférieure à la valeur moyenne du réseau et les cercles rouges une densité supérieure à la moyenne. Les cercles magenta et verts indiquent la déviation par rapport à la valeur moyenne de l'opérateur de saut entre les deux sites adjacents. Les cercles verts indiquent une amplitude inférieure à la moyenne et les cercles orange une amplitude supérieure à la moyenne. La surface des cercles est proportionnelle à la déviation à la moyenne. Les flèches indiquent la polarisation de spin, leur longueur est proportionnelle à celle-ci. Les valeurs maximales sont indiquées à droite de la maille. La force de l'impureté est $h = 0.5t$, le dopage 5% pour les données de CDMFT et de 9% pour les données de champ moyen.

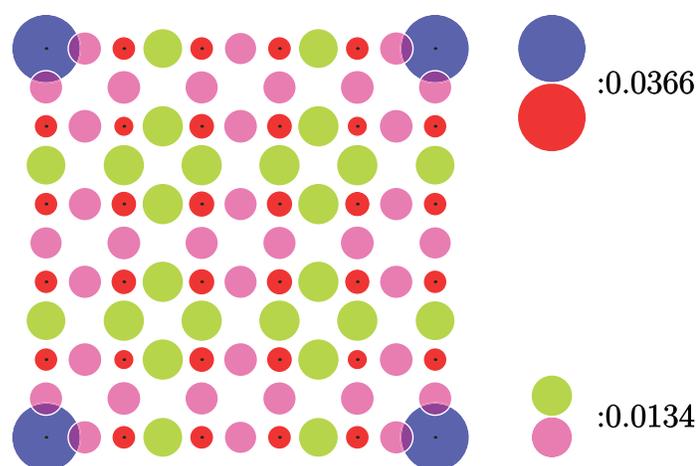


FIGURE 3.23 Profil de la densité électronique et de l'amplitude de saut, obtenue par CDFMT en l'absence d'ordre. Les cercles bleus indiquent une densité d'électron inférieure à la valeur moyenne du réseau et les cercles rouges une densité supérieure à la moyenne. Les cercles orange et verts indiquent la déviation par rapport à la valeur moyenne de l'opérateur de saut entre les sites adjacents. Les cercles verts une amplitude inférieure à la moyenne et les cercles magenta une amplitude supérieure à la moyenne. La surface des cercles est proportionnelle à la déviation à la moyenne. Les valeurs maximales sont indiquées à droite de la maille. La force de l'impureté est $h = 0.5t$, le dopage 7%.

Conclusion

Dans ce travail, on a effectué une étude théorique de l'effet d'une impureté répétée sur le modèle de Hubbard à une bande appliqué au YBCO, un cuprate supraconducteur. Pour résoudre approximativement ce problème, on a fait appel à la théorie du champ moyen dynamique sur amas à température nulle. Il s'agit de la première application de cette méthode à l'étude des impuretés dans les cuprates.

On a pu observer que la présence d'impuretés favorise la séparation des phases antiferromagnétique et supraconductrice, améliorant de ce fait l'accord du modèle avec l'expérience. Le déplacement du dôme supraconducteur vers les dopage plus élevés peut être attribué à un déplacement de l'isolant de Mott : la présence d'une modulation spatiale de la densité d'électrons permet à cette phase d'exister avec un dopage non nul. Ces données nous donnent aussi des indications que la modélisation nécessiterait quelques raffinements, puisqu'il y a quelques différences entre deux schémas possibles représentant la répartition spatiale des impuretés.

La densité d'états locale montre un accord qualitatif intéressant avec des données expérimentales obtenues par microscopie à effet tunnel. Les pics au bord du gap ont le même comportement en fonction de la largeur de celui-ci dans l'expérience et dans la simulation. De plus, avec une valeur du saut au premier voisin tiré de calculs *ab initio*, on peut voir que la largeur du gap est très proche de ce qui est observé dans l'expérience. On a observé que le gap supraconducteur est plus résilient à l'effet des impuretés que ne le laisse présager une théorie de champ moyen. Enfin, on a vu que le gap supraconducteur devient plus sensible aux effets de l'impureté à l'approche du demi-remplissage, ce qui supporte l'idée que la chute du dôme est due à la compétition avec l'isolant de Mott.

On a pu voir qu'une théorie de champ moyen prédit une modulation spatiale des observables notablement différente dans le cas de la phase normale et de la phase supraconductrice. Dans la phase antiferromagnétique, les différences sont beaucoup plus subtiles. Qualitativement, cette différence dans la modulation se limite aux premiers voisins de l'impureté.

On attribue ces différences à l'effet de l'interaction d'échange sur la densité d'électrons. On observe aussi l'apparition spontanée de nématicité dans certaines observables thermodynamiques, mais comme le modèle n'était pas construit avec un tel phénomène en tête, le phénomène, quoique probablement réel, est frustré par des contraintes de symétrie qui ont été imposées. Il n'est donc pas possible de dire grand-chose au sujet de cette nématicité au-delà du fait qu'elle est présente.

Pour confirmer la valeur de ces calculs, il faudrait les refaire sur des amas plus grands. De plus, il serait nécessaire de les refaire sans contrainte de symétrie entre les amas. Cela permettrait à la nématicité de prendre sa forme la plus naturelle et l'on serait donc en mesure de l'étudier plus en détail.

Il pourrait aussi être intéressant de simuler le système avec un paramètre supraconducteur complexe pour étudier un autre phénomène : les vortex. Le formalisme présenté est en mesure de traiter la présence de ceux-ci dans un réseau.

Bibliographie

- [1] R. de Bruyn Ouboter, [Scientific American-American edition](#) **276**, 98 (1997).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, [Physical Review](#) **108**, 1175 (1957).
- [3] G. Éliashberg, [Soviet Physics JETP](#) **11**, 696 (1960).
- [4] G. A. Ummarino, *Eliashberg Theory*, , Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Modeling and Simulation No. 3 (Forschungszentrum Jülich, Jülich, 2013), chap. 13.
- [5] J. G. Bednorz and K. A. Müller, [Zeitschrift für Physik B Condensed Matter](#) **64**, 189 (1986).
- [6] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, and R. L. Meng, [Physical Review Letters](#) **58**, 908 (1987).
- [7] A. Balatsky, I. Vekhter, and J.-X. Zhu, [Reviews of Modern Physics](#) **78**, 373 (2006).
- [8] H. Alloul, J. Bobroff, M. Gabay, and P. Hirschfeld, [Reviews of Modern Physics](#) **81**, 45 (2009).
- [9] L. P. Gor'kov, [Soviet Physics JETP](#) **36**, 1364 (1959).
- [10] H. Shaked, *Crystal structures of the high-Tc superconducting copper-oxides*, [Physica : Superconductivity](#) (Elsevier Science Publishers B.V., 1994).
- [11] S. Verret, Couplage interplan et compétition de phases dans le modèle de Hubbard des cuprates, Mémoire.
- [12] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, [Reviews of Modern Physics](#) **72**, 969 (2000).
- [13] H. Alloul, P. Mendels, H. Casalta, J. F. Marucco, and J. Arabski, [Physical Review Letters](#) **67**, 3140 (1991).
- [14] M. R. Presland, J. L. Tallon, R. G. Buckley, R. S. Liu, and N. E. Flower, [Physica C : Superconductivity](#) **176**, 95 (1991).
- [15] Y. Ando *et al.*, [Physical Review B](#) **61**, R14956 (2000).
- [16] E. H. Lieb and F. Y. Wu, [Physica A : Statistical Mechanics and its Applications](#) **321**, 1 (2003).
- [17] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, [Reviews of Modern Physics](#) **68**, 13 (1996).
- [18] S. S. Kancharla *et al.*, [Physical Review B](#) **77**, 184516 (2008).
- [19] D. Sénéchal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, [Physical Review Letters](#) **84**, 522 (2000).

- [20] D. Sénéchal, [arXiv :0806.2690 \[cond-mat\] \(2008\)](#), arXiv : 0806.2690.
- [21] A. M. Zagoskin, *Quantum theory of many-body systems*, (Springer, 1998).
- [22] G. Baym and L. P. Kadanoff, *Physical Review* **124**, 287 (1961).
- [23] M. Potthoff, *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* **32**, 429 (2003).
- [24] D. Sénéchal, *Physical Review B* **81** (2010).
- [25] S. Verret, Bond Density Wave causing Nodal Anti-Nodal separation of the Superconducting gap in Cuprates, 2015.
- [26] O. K. Andersen, A. I. Liechtenstein, O. Jepsen, and F. Paulsen, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **56**, 1573 (1995), Proceedings of the Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors.
- [27] A. Pushp *et al.*, *Science* **324**, 1689 (2009).
- [28] S. Okamoto, D. Sénéchal, M. Civelli, and A.-M. S. Tremblay, *Physical Review B* **82** (2010).