

Ordre de rayure des cuprates supraconducteurs dans le modèle de Hubbard

par

Pierre Mercure-Boissonnault

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, 19 janvier 2015

Le 19 janvier 2015

le jury a accepté le mémoire de Monsieur Pierre Mercure-Boissonnault dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur David Sénéchal
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Denis Morris
Membre interne
Département de physique

Professeur David Poulin
Président rapporteur
Département de physique

Remerciements

J'aimerais dédier ce mémoire à mon père, Jean-Marie Boissonnault, qui serait sûrement fier de voir où j'en suis rendu.

J'aimerais aussi en profiter pour faire quelques remerciements :
Toute la gang de la promotion Mezenplus qui sont restés à l'Université de Sherbrooke après le baccalauréat (Ken St-Arnaud, Dominique Matte, Sophie Rochette, Karl Thibault, Kevin Parenteau, Vincent Bouliane, Gabriel Gasse, Laurent Olivier, Gabriel Poulin-Lamarre), Lauren Gingras, Simon Verret, Maxime Charlebois, Maxime Dion, Jonathan Gaudet, Anne-Marie Gagnon, Pavithran Iver Sridharan, Jean-Paul Latyr-Faye, Caroline Beaudry, Anne-Sophie Bouliane, Allison Mackay, Marc-André Poirier, Noémie Bonenfant et mes colocs (Véronique Delisle, Stéphanie Roy, Pamella Jacques, Samuel Alix, Émile Arseneault, Marie-Ève Tapin, Sébastien Dupasquier, Gwendoline Féral, Isaias Gonzalez, Jennifer Sarrazin, Alexandre Connolly, Gabrielle Arsenault, Suzie Chatel, Evanne Souchette).

Chacun à votre façon vous m'avez aidé, soutenu, diverti, rendu joyeux et vous m'avez fait grandir. Tout ça, tout ce que vous m'avez donné comme expérience de vie est en fait beaucoup plus important que ce que j'ai acquis comme scolarité et expérience professionnelle au cours de ma maîtrise.

Aussi, je veux évidemment remercier David Sénéchal, mon superviseur de maîtrise qui a cru en moi et m'a pris au sein de son équipe de recherche. J'ai beaucoup apprécié d'avoir une grande liberté pour effectuer ma recherche et ton aide lorsque j'avais des problèmes ou des interrogations.

Finalement, merci à l'équipe qui gère les superordinateurs Mammouth série et parallèle sur lequel j'ai effectué la majorité de mes calculs. Je ne vous ne connais pas, je ne vous ai même jamais envoyé d'emails, mais je suis convaincu que vous faites un excellent travail, car Mammouth fonctionne merveilleusement bien.

Table des matières

Introduction	1
1 Théorie	5
1.1 Modèle de Hubbard	5
1.1.1 Plans cuivre-oxygène	5
1.1.2 Modèle de Hubbard à une bande	6
1.2 Théorie des perturbations inter-amas	7
1.2.1 Self-énergie	9
1.2.2 Situation à plusieurs amas	10
1.3 Méthode de Lanczos	11
1.3.1 Encodage du hamiltonien	11
1.3.2 Recherche de l'état fondamental	12
1.3.3 Calcul de la fonction de Green	14
1.3.4 Espaces de la fonction de Green et formalisme de Nambu	15
1.4 Algorithmes de recherche de solutions	16
1.4.1 VCA	16
1.4.2 CDMFT	19
1.4.3 CDIA et méthodes mixtes	22
1.4.4 Calcul de moyennes et paramètres d'ordre	23
2 Techniques employées	25
2.1 Balayage en fonction du potentiel chimique	25
2.2 Balayage à densité constante	26
2.3 Détermination des solutions retenues en VCA	26
2.4 Comparaison des solutions en fonction du grand potentiel	27
2.5 Comparaison des solutions en fonction de l'énergie interne	29
2.6 Cartographie des solutions	30
2.7 Variation de tous les paramètres de spin et de charge	34
3 Résultats	35
3.1 Résultats de VCA avec amas rectangulaires	35
3.1.1 Modèle à deux amas	36
3.1.2 Champs de Weiss utilisés	36
3.1.3 Solutions obtenues	37
3.1.4 Résultats des balayages	39
3.1.5 Conclusion	41

3.2	Résultats de CDMFT	45
3.3	Balayages en VCA en fonction des paramètres U, t, t' et t''	50
3.3.1	Méthodologie	50
3.3.2	Résultats	51
3.3.3	Conclusion	59
3.4	Tests avec des amas différents	62
3.4.1	Recherche de l'ordre de rayure avec une périodicité de 6 sites	62
3.4.2	Recherche de l'ordre de rayure centré sur les sites	64
3.4.3	Recherche de différentes formes d'ordre de rayure en VCA avec des amas en étoile	70
Conclusion		77
Annexe		79
A	Variation simple de l'ordre de rayure en VCA	79
A.1	Champs de Weiss utilisés	81
A.2	Résultats des cartes	82
A.3	Graphiques des paramètres d'ordre	86
A.4	Conclusion	89
B	Résultats de VCA avec champs de Weiss de charge	89
B.1	Modèles et champs de Weiss utilisés	90
B.2	Résultats des cartes	91
B.3	Graphiques du paramètres d'ordre	93
B.4	Comparaison des solutions obtenues	96
B.5	Conclusion	98
C	Résultats de VCA avec une coexistence des champs de Weiss	100
C.1	Modèle à deux amas	100
C.2	Solutions obtenues	101
C.3	Comparaison des solutions	103
C.4	Conclusion	105
D	Essais en CDMFT avec amas de 4 sites	105
D.1	Modèles à amas de 4 sites	105
D.2	Paramètres variationnels utilisés	106
D.3	Résultats obtenus avec amas carrés	107
D.4	Résultats obtenus avec amas horizontaux	108
D.5	Conclusion	108
Bibliographie		109

Introduction

Je reste toujours surpris lorsqu'en parlant de mes études, les gens me disent qu'ils n'aiment pas la physique. Pourtant, celle-ci permet d'expliquer tellement de phénomènes et apporte des solutions extraordinaires qui semblent ni plus ni moins relever de la magie. On n'a qu'à penser aux matériaux supraconducteurs qui permettent de faire disparaître la résistance électrique en plus de permettre à des objets de léviter magnétiquement par l'effet Meissner. Avec ces caractéristiques incroyables, il est évident que lorsque les supraconducteurs seront facilement utilisables, ils entraîneront fort probablement une véritable révolution technologique comme l'ont fait les semi-conducteurs avec l'informatique.

L'obstacle majeur à l'utilisation de la supraconductivité est qu'elle nécessite des températures très basses : par exemple, les supraconducteurs élémentaires (qui sont constitués d'un seul élément chimique) ne peuvent être supraconducteurs au-delà de 10K. On a heureusement découvert des alliages et des composés chimiques qui peuvent avoir une température critique plus élevée. On pense surtout ici aux cuprates supraconducteurs, dont le composé le plus connu, l' $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ ou plus simplement l'YBCO, possède une température critique de 92K, ce qui permet son utilisation avec un refroidissement à l'azote liquide. Ces cuprates supraconducteurs sont constitués de plans formés par des atomes de cuivre et d'oxygène entre lesquels se trouvent des atomes de terres rares comme illustré à la figure 1 pour l'YBCO. D'ailleurs, ces plans cuivre-oxygène sont l'endroit dans le matériau où l'on croit que la supraconductivité se produit. Beaucoup de recherches ont été effectuées sur ces matériaux, mais il en reste beaucoup à faire pour bien comprendre leur fonctionnement et pour améliorer leur température critique dans l'objectif ultime de pouvoir utiliser la supraconductivité à la température de la pièce.

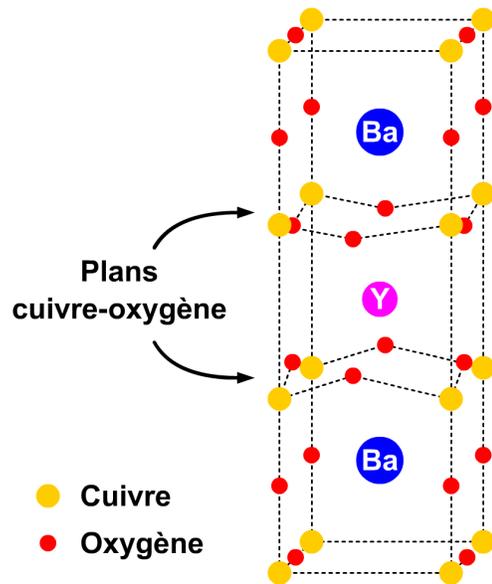


FIGURE 1 Maille élémentaire du composé chimique $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$.

Une des avenues qui s'avère être intéressante pour mieux comprendre la supraconductivité est d'étudier ce qui interagit avec elle. Il y a des interactions qu'on peut contrôler, tel que d'appliquer un champ magnétique, ce qui induit un alignement des spins électroniques dans l'échantillon et nuit à la supraconductivité, jusqu'à la faire disparaître. Mais aussi, il y a des interactions qu'on peut difficilement contrôler, à l'intérieur du matériau dont l'antiferromagnétisme qui est naturellement présent dans les plans cuivre-oxygène des matériaux supraconducteurs à demi-remplissage électronique et qui entre en compétition avec la supraconductivité. Plus récemment, on a trouvé expérimentalement d'autres ordres de spin et de charge voisins à la supraconductivité tel que le montre le diagramme de phase de la figure 2 pour l'YBCO pour un dopage en trous. En particulier, il y a un ordre de charge qui compétitionnerait avec la supraconductivité, causant le léger creux dans sa température critique autour d'un dopage en trous de $1/8$ [8]. Aussi, on détecte la présence d'un ordre de spin particulier entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité.

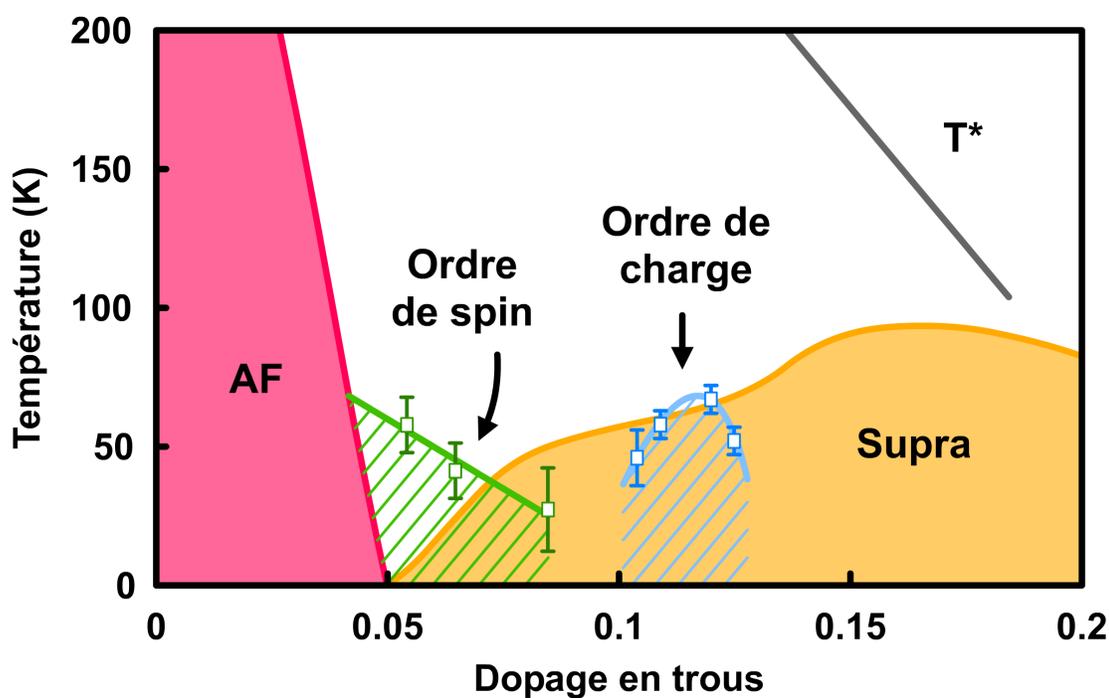


FIGURE 2 Diagramme de phase usuel du supraconducteur YBCO [2] auquel les ordres de spin et de charge mesurés expérimentalement ont été ajoutés [10] [26]

Nous croyons que ces deux ordres découleraient d'un ordre mixte de spin et de charge sous la forme de l'ordre de rayure tel qu'illustré à la figure 3 qui aurait lieu sur les plans cuivre-oxygène. Cet ordre de rayure possède un comportement antiferromagnétique, où les spins sont inversés à chaque site voisin, mais auquel est ajoutée une

modulation de la densité de spin dans une direction sur une période de plusieurs sites. Cette modulation provoque une inversion périodique de l'antiferromagnétisme et aura comme effet que les colonnes de sites entre les zones antiferromagnétiques auront une densité de spin nulle ou très faible pour éviter d'avoir des sites voisins ayant le même spin. Ces colonnes seraient moins peuplées d'électrons (ou plus dopées en trous) ce qui produirait l'ordre de charge.

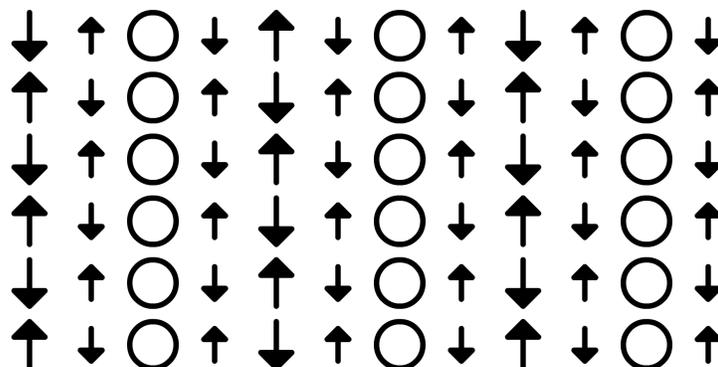


FIGURE 3 Schéma de l'ordre de rayure dans le réseau carré correspondant au modèle de Hubbard à une bande (voir section 1.1.2). Les flèches représentent les densités de spin et les cercles identifient les sites où il y a une plus grande concentration de trous.

Malgré que l'on connaisse l'ordre de rayure depuis plusieurs années [7], la communauté scientifique a eu un regain d'intérêt sur le sujet suite aux expériences montrant la présence d'un ordre de charge présent simultanément avec la phase supraconductrice. Il en résulte que les connaissances qu'on a sur ces ordres demeurent assez fragmentaires. Par exemple, on ne sait pas encore comment l'ordre de rayure s'installe et comment il interagit avec la supraconductivité. Ce faisant, en élargissant nos connaissances sur l'ordre de rayure, on risque, du même coup, de comprendre un peu mieux la supraconductivité dans les cuprates supraconducteurs et c'est pourquoi ma recherche porte sur le sujet.

Ce mémoire présente un travail plutôt exploratoire sur l'ordre de rayure où des calculs numériques ont été utilisés pour vérifier si cet ordre est présent dans les plans cuivre-oxygène à l'aide du modèle de Hubbard à une bande. Si tel est le cas, on vérifiera si c'est l'ordre le plus favorable par rapport aux autres ordres possibles dans le matériau tel que l'antiferromagnétisme. Ensuite, on observera l'effet de la supraconductivité sur l'ordre de rayure et si une coexistence est possible entre les deux. Finalement, on vérifiera aussi si l'ordre de rayure peut être obtenu en utilisant d'autres méthodes de calcul, en utilisant des configurations différentes et sur des matériaux différents de la même famille.

Il faut mentionner que d'autres équipes de recherche ont déjà effectué des simulations numériques sur le sujet. Entre autres, il y a eu plusieurs simulations en DMRG (pour Density Matrix Renormalization Group) avec des modèles $t - J$ où on observe l'ordre de rayure. De plus, ces simulations ont montré que l'ordre de rayure pouvait apparaître sous deux formes différentes : l'ordre de rayure centré sur les sites [4] (tel que présenté plus haut à la figure 3) et l'ordre de rayure centré sur les liens (centré sur deux colonnes de sites) [23] dont le résultat est illustré à la figure 4. Nous allons d'ailleurs tenter de reproduire ces résultats et obtenir ces deux formes d'ordre de rayure. De plus, nous allons aussi tenter d'obtenir un ordre de rayure diagonal dont fait parfois part la littérature [17].

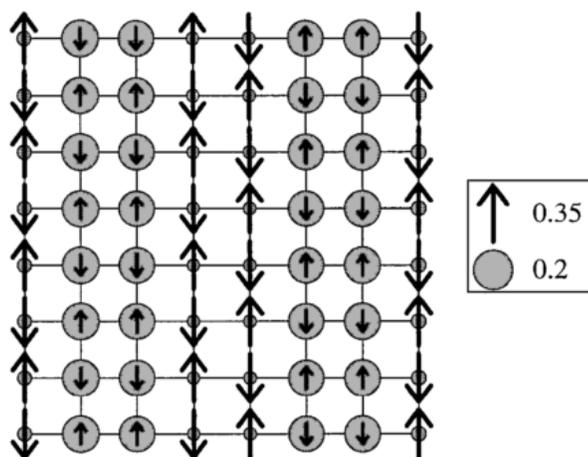


FIGURE 4 Ordre de rayure centré sur les liens provenant de simulations numériques en DMRG pour un dopage en trous de $1/8$ sur un système de 16 sites par 8 sites (partie centrale affichée) [23].

Pour ma part, j'ai plutôt utilisé les méthodes numériques connues sous le nom de VCA (Variational Cluster Approximation) et de CDMFT (Cluster Dynamical Mean Field Theory) qui sont les méthodes habituellement utilisées dans le groupe de recherche de David Sénéchal et d'André-Marie Tremblay à l'Université de Sherbrooke. Ces méthodes, ainsi que les concepts qui s'y rattachent, sont présentés au chapitre suivant. Puis, s'en suivra d'un chapitre qui présentera les résultats obtenus à l'aide de ces méthodes.

Chapitre 1

Théorie

1.1 Modèle de Hubbard

1.1.1 Plans cuivre-oxygène

Tel que mentionné dans l'introduction, il y a un consensus sur le fait que la supraconductivité et les phénomènes apparentés dans les cuprates supraconducteurs tel que l'YBCO se produiraient dans les plans cuivre-oxygène. Ces plans forment un réseau carré avec comme maille élémentaire 1 atome de cuivre et 2 d'oxygène tel que présenté ci-dessous :

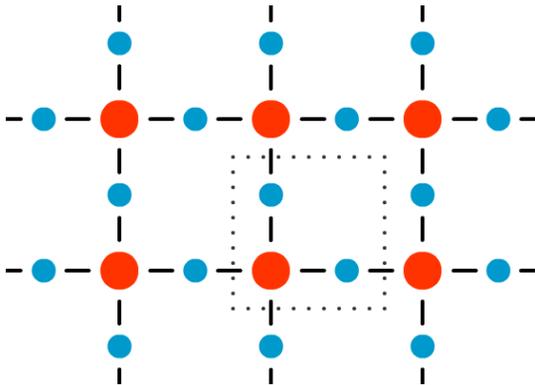


FIGURE 1.1 Réseau d'un plan cuivre-oxygène d'un cuprate supraconducteur. La maille élémentaire est entourée d'un pointillé et les atomes de cuivre et oxygène sont respectivement en rouge et en bleu.

Pour décrire les interactions électroniques de ce plan, on peut utiliser le modèle de Hubbard à 3 bandes (conçu par V. Emery [6]) dont l'hamiltonien est le suivant :

$$\begin{aligned}
 H = & (\epsilon_d - \mu) \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}^{(d)} + (\epsilon_p - \mu) \sum_{j,\sigma} n_{j\sigma}^{(p)} + t_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{j\sigma}^{(p)\dagger} c_{i\sigma}^{(d)} + c_{i\sigma}^{(d)\dagger} c_{j\sigma}^{(p)}) \\
 & + t_{pp} \sum_{\langle j,j' \rangle, \sigma} (c_{j\sigma}^{(p)\dagger} c_{j'\sigma}^{(p)} + h.c.) + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^{(d)} n_{i\downarrow}^{(d)} + U_p \sum_j n_{j\uparrow}^{(p)} n_{j\downarrow}^{(p)} + U_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^{(d)} n_j^{(p)}
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

Les indices d et p se réfèrent respectivement aux orbitales électroniques d des atomes de cuivre et p des atomes d'oxygène. Les opérateurs $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$ et $n_{i\sigma}$ sont les traditionnels opérateurs de création, d'annihilation et de nombre des électrons avec ici l'indice i permettant d'identifier sur quel site l'électron se situe et σ permettant d'identifier le spin de l'électron. Quant à la notation $\langle i, j \rangle$ présente dans les indices de certaines sommes, elle signifie que l'on restreint la somme aux éléments qui correspondent aux proches voisins entre les sites i et j (dans le cas de la somme du terme t_{pp} , ça signifie ici que l'on prend les sites d'oxygène voisins en diagonale). Les termes $(\epsilon_d - \mu)$ et $(\epsilon_p - \mu)$ correspondent aux potentiels chimiques des sites des atomes de cuivre et d'oxygène. Les termes t_{pd} et t_{pp} représentent respectivement les sauts électroniques entre les sites de cuivre et d'oxygène voisins et les sauts entre les sites d'oxygène voisins transverses. Les termes en U_d et U_p sont les termes de répulsion entre les électrons de spin opposé sur le même site. Finalement, le terme en U_{pd} est la répulsion entre les électrons des sites de cuivre et d'oxygène voisins (où $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$).

Idéalement, on pourrait utiliser ce modèle à trois bandes, mais se faisant, on doit tenir compte d'un grand nombre de sites et avec les méthodes numériques qu'on utilisera, ce sera extrêmement lourd à traiter. On va donc se pencher sur un modèle plus simple, le modèle à une bande dont le nombre de sites se verra grandement diminué.

1.1.2 Modèle de Hubbard à une bande

Il a été montré qu'il est possible de simplifier le modèle à 3 bandes en remplaçant la maille élémentaire du réseau (CuO_2) par un seul site ([16]). Malgré que la simplification soit drastique, les comportements caractéristiques que l'on veut observer vont être tout de même conservés, car en quelque sorte, on enlève les sites d'oxygène qui grosso-modo ne font que transférer des électrons aux sites de cuivre. De cette manière, on ne se concentrera que sur les sites de cuivre (en tenant compte de l'apport des sites d'oxygènes dans les termes de l'hamiltonien) où se produisent l'essentiel des phénomènes de densité de spin et de charge. L'hamiltonien de ce modèle de Hubbard à une bande deviendra :

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i n_i \quad (1.2)$$

Dans cet hamiltonien, on a les termes de sauts entre les sites décrits par la matrice t_{ij} , la répulsion électron-électron pour chaque site avec U et finalement le potentiel chimique μ . Modifier le potentiel chimique permettra de modifier la densité électronique par site du réseau, ce qui nous permettra de produire des diagrammes de phase en fonction de la densité électronique ou du dopage en trous.

Les paramètres que nous utiliserons avec le modèle de Hubbard pour simuler l'YBCO sont présentés à la figure 1.2 ([16]).

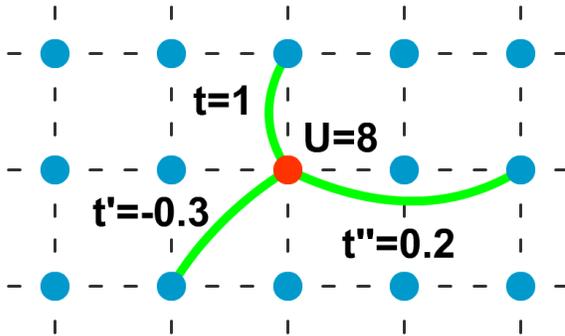


FIGURE 1.2 Les différents paramètres utilisés et leurs valeurs respectives pour simuler l'YBCO dans un réseau carré.

1.2 Théorie des perturbations inter-amas

Maintenant que l'on s'est défini un réseau et un hamiltonien avec lequel travailler, on va vouloir obtenir des résultats à partir de ceux-ci. Il existe plusieurs méthodes de calcul pour soutirer de l'information d'un hamiltonien et dans notre cas, nos méthodes utiliseront la théorie des perturbations inter-amas [9] [20] que je vais abrégier par la CPT (pour Cluster Perturbation Theory).

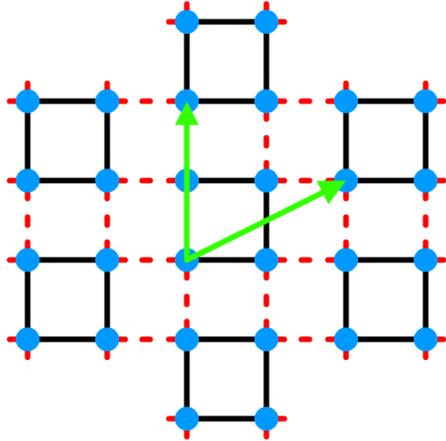


FIGURE 1.3 Exemple d'amas de 4 sites se répétant périodiquement selon les vecteurs en verts. Les sauts entre les sites de l'amas sont en noir et les sauts inter-amas sont en rouge.

L'objectif principal de la CPT est d'obtenir une expression rapprochée de la fonction de Green de l'hamiltonien sur un réseau. Sans rentrer dans le formalisme et dans le cas qui nous concerne, une fonction de Green est un objet mathématique servant à contenir exclusivement l'information sur les déplacements électroniques d'une particule allant d'un site à un autre dans le réseau. La fonction de Green nous permettra d'éviter d'avoir à utiliser directement l'hamiltonien pour réaliser nos calculs. La définition qu'on utilise pour la fonction de Green est la suivante :

$$G_{\mu\nu}(\omega) = \langle \Omega | c_{\mu} \frac{1}{\omega - H + E_0} c_{\nu}^{\dagger} | \Omega \rangle + \langle \Omega | c_{\nu}^{\dagger} \frac{1}{\omega + H - E_0} c_{\mu} | \Omega \rangle \quad (1.3)$$

En quelque sorte, la fonction de Green mesure la fonction spectrale du déplacement d'un électron possédant les caractéristiques μ aux caractéristiques ν par rapport à l'état fondamental $|\Omega\rangle$. μ et ν dans notre cas contiendra l'information sur le site où l'électron se situe (ou sa fréquence spatiale en transformée de Fourier) et son spin. Comme on le verra plus tard, cet objet à lui seul nous permettra de calculer une série d'observable sans avoir recours directement à l'hamiltonien.

Cependant, le calcul de la fonction de Green se bute rapidement à un premier problème : nous avons affaire généralement à un réseau comportant un nombre infini de sites. Le calcul numérique ne peut donc pas se faire dans cette situation. La tactique proposée par la CPT pour contourner ce problème est de séparer le réseau en amas de quelques sites qui se répètent périodiquement pour reproduire le réseau infini (la figure 1.3 est donnée en exemple). Ce faisant, on peut se définir un hamiltonien propre aux amas (H') qui comprendra les termes propres aux amas et qui sera plus facile à traiter. Autrement dit, cet hamiltonien ne comprendra pas les termes de sauts reliant les amas différents entre eux. On appellera ces sauts les sauts inter-amas et seront contenus dans l'objet V via l'équation suivante :

$$H = H' + V \quad (1.4)$$

En utilisant la théorie des perturbations avec V comme étant la perturbation, il est possible de montrer [22] qu'au premier ordre de la perturbation on obtient :

$$\mathbf{G}^{-1}(\omega) = \mathbf{G}'^{-1}(\omega) - \mathbf{V} \quad (1.5)$$

où $\mathbf{G}^{-1}(\omega)$ et $\mathbf{G}'^{-1}(\omega)$ sont respectivement les fonctions de Green du réseau et des amas. Cette équation est sous forme matricielle et contiendra tous les éléments de la fonction de Green définis à l'équation (1.3). Chaque colonne et rangée correspondra donc à un site (qui est identifiable par sa position dans le réseau) et un spin. Les matrices sont de taille infinie, car nous sommes toujours sur le réseau infini. Par contre, on pourra réduire la taille de ces matrices en effectuant une transformée de Fourier par rapport à la position relative des amas dans le réseau qu'on va noter $\tilde{\mathbf{r}}$ (la position des sites étant $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}$ où \mathbf{R} est la position des sites à l'intérieur de l'amas). On obtiendra donc :

$$\mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \mathbf{G}'^{-1}(\omega) - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (1.6)$$

Notons au passage, qu'après la transformée de Fourier, \mathbf{G}' ne dépend pas de $\tilde{\mathbf{k}}$. C'est dû au fait que \mathbf{G}' est associé aux amas individuels, de sorte que $G'_{\tilde{\mathbf{r}}_1, \tilde{\mathbf{r}}_2} \propto \delta_{\tilde{\mathbf{r}}_1, \tilde{\mathbf{r}}_2}$.

Avec l'équation (1.6), les matrices ont maintenant une taille finie où le nombre de colonnes et de rangées égal à deux fois le nombre de sites de l'amas (pour chaque site et chaque spin). D'autre part, elle permet essentiellement de trouver un résultat approché de la fonction de Green du réseau, car on va pouvoir calculer $\mathbf{G}'^{-1}(\omega)$ à l'aide de la méthode de Lanczos qu'on va voir plus loin et on peut calculer $\mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})$ à l'aide de transformation analytique des sauts inter-amas dans l'espace des $\tilde{\mathbf{k}}$.

1.2.1 Self-énergie

Il va être utile d'introduire aussi la self-énergie qui, pour une particule, représente les contributions à son énergie dues aux interactions avec les autres particules. L'équation de Dyson permet de faire un lien mathématique entre la self-énergie (Σ) et les fonctions de Green :

$$\Sigma = \mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{G}^{-1} \quad (1.7)$$

Le 0 dans \mathbf{G}_0 signifie que l'on doit prendre la fonction de Green sans interactions (à $U = 0$). L'équation générale de \mathbf{G}_0^{-1} est la suivante ([18]) :

$$\mathbf{G}_0^{-1} = \omega + \mu - \mathbf{t} \quad (1.8)$$

où \mathbf{t} est la matrice qui contient les termes de sauts.

Si on applique cette équation pour un seul amas, on obtient une matrice qu'on peut facilement calculer pour l'amas :

$$\mathbf{G}'_0^{-1}(\omega) = \omega + \mu - \mathbf{t}' \quad (1.9)$$

où \mathbf{t}' est la matrice qui contient les termes de sauts qui sont ici restreints à l'amas.

On peut aussi réécrire l'équation de Dyson (1.7) pour l'amas et on obtient :

$$\Sigma'(\omega) = \mathbf{G}'_0^{-1}(\omega) - \mathbf{G}'^{-1}(\omega) \quad (1.10)$$

Cette équation nous permet de calculer la self-énergie de l'amas. On va supposer que cette self-énergie de l'amas est en fait la self-énergie du réseau, autrement dit que cette self-énergie se répète avec la même période de l'amas sur le réseau. Donc, ça enlève la dépendance en $\tilde{\mathbf{k}}$ sur la self-énergie de l'équation (1.7), ce qui donne pour le réseau :

$$\Sigma(\omega) = \mathbf{G}_0^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) - \mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \quad (1.11)$$

De plus, le fait de poser que $\Sigma(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \Sigma'(\omega)$ va imposer que les densités de spin et de charge se répèteront aussi de manière périodique sur les amas, ce qui fait que si on veut tester une onde de densité de spin ou de charge en particulier, il faut s'assurer qu'elle soit commensurable avec l'amas choisi.

1.2.2 Situation à plusieurs amas

Lorsqu'on désire utiliser une grande maille élémentaire, mais que celle-ci serait trop lourde à traiter en tant qu'amas unique, il existe une méthode consistant à diviser cette maille élémentaire en plusieurs petits amas en traitant les amas individuellement. Mais, avant d'aller plus loin, il est nécessaire d'introduire la terminologie utilisée pour éviter toute confusion. On appelle la grande maille élémentaire, qui contiendra les amas, la super maille élémentaire ou le super-amas. Ce super-amas se répète périodiquement comme s'il s'agissait d'un amas unique avec les vecteurs de base qui lui seront propres pour reproduire le réseau. Le réseau ainsi reproduit par le super-amas s'appelle le super-réseau. Pour illustrer le tout, un exemple de super-réseau avec des super-amas possédant deux amas est présenté à la figure 1.4.

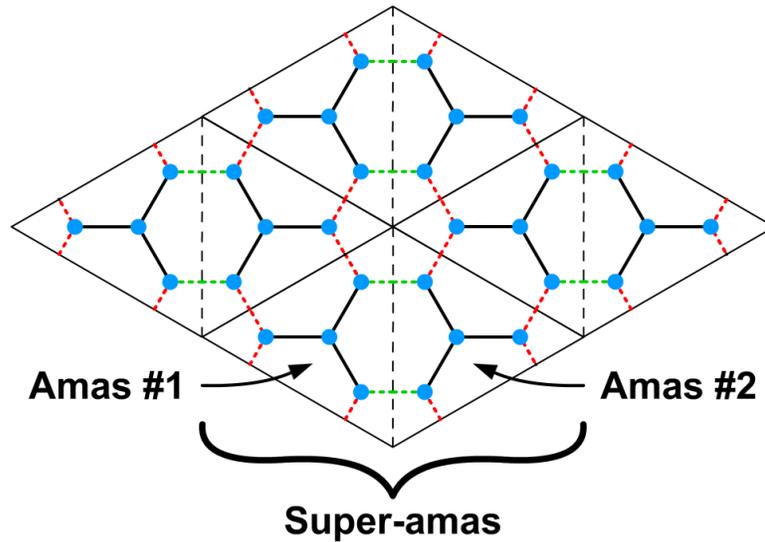


FIGURE 1.4 Exemple de super-réseau avec un super-amas comportant deux amas différents de 4 sites dans un réseau hexagonal. Les liens inter-amas entre les super-amas $V(\tilde{\mathbf{k}})$ sont tracés en pointillé rouge. Les liens en pointillé vert sont les liens entre les amas à l'intérieur du super-amas.

Pour calculer la fonction de Green du réseau à partir du super-amas, on peut calculer la fonction de Green du super-amas dont la matrice sera séparée en plusieurs blocs comme ceci :

$$\mathbf{G}'^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}'_1^{-1} & \mathbf{W}_{12} & \mathbf{W}_{13} & \cdots \\ \mathbf{W}_{21} & \mathbf{G}'_2^{-1} & \mathbf{W}_{23} & \cdots \\ \mathbf{W}_{31} & \mathbf{W}_{32} & \mathbf{G}'_3^{-1} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

où la première colonne et rangée correspondent aux sites et spins du premier amas et la deuxième colonne et rangée correspondent aux sites et spins du deuxième amas (et ainsi de suite pour chaque amas). Les \mathbf{W}_{ij} correspondent aux liens inter-amas entre les amas i et j à l'intérieur du super-amas.

On peut calculer les fonctions de Green \mathbf{G}'_i des amas séparément avec la méthode de Lanczos présentée à la section 1.3. Dans le cas des matrices \mathbf{W}_{ij} qui sont les liens inter-amas à l'intérieur du super-amas, on les approximera de la même manière que $\mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})$. Cependant, comme elles sont à l'intérieur de la maille élémentaire du super-réseau, elles n'auront pas de dépendance en $\tilde{\mathbf{k}}$. D'ailleurs $\mathbf{W}_{ij} = \mathbf{W}_{ji}^\dagger$ car les fonctions de Green sont hermitiques ($G_{ij}^*(z) = G_{ji}(z^*)$).

Maintenant qu'on a calculé la fonction de Green du super-amas, on peut trouver la fonction de Green du réseau avec l'équation (1.6) et la matrice $\mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})$ (qui contient uniquement l'information sur les liens inter-amas entre les super-amas). Par la suite, on peut aussi calculer la self-énergie $\Sigma(\omega)$ avec l'équation (1.10) et le \mathbf{G}'_0^{-1} qu'on peut facilement calculer (avec l'équation (1.9)).

1.3 Méthode de Lanczos

La méthode de Lanczos est un algorithme permettant d'obtenir une bonne approximation des vecteurs et valeurs propres de grandes matrices. Dans notre situation, on peut l'utiliser pour trouver l'état fondamental et son énergie et ensuite calculer la fonction de Green de l'amas, le tout à partir de l'hamiltonien de l'amas. Mais avant toute chose, il faut se définir une méthode pour encoder cet hamiltonien.

1.3.1 Encodage du hamiltonien

L'hamiltonien de l'amas sera encodé sous forme de matrice carrée où les colonnes et les rangées représenteront chacun des états électroniques possibles sur l'amas. Ces états devront respecter le principe d'exclusion de Pauli sur chaque site et ainsi, par site, on aura 4 états possibles : $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|0\rangle$. Ce faisant, il y aura 4^N états où N est le nombre de sites de l'amas.

Comme le modèle de Hubbard conserve le nombre d'électrons de spin up et de spin down, les états ayant un nombre d'électrons up et down donné ne seront pas liés aux états qui possèdent un nombre d'électrons up et down différent. Par conséquent, l'hamiltonien sera une matrice diagonale par blocs (voir l'exemple à la figure 1.5) avec

le reste de la matrice à zéro. Ce faisant, on va pouvoir effectuer le calcul de la fonction de Green sur un bloc de l'hamiltonien à la fois au lieu de traiter tout l'hamiltonien d'un coup, ce qui prendrait plus de temps vu qu'on traite une multitude de zéros. On peut aussi sélectionner le bloc avec lequel travailler, par exemple, si on sait qu'on est près du demi-remplissage, on prendra le bloc correspondant (avec $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = N/2$) et ignorer le reste du hamiltonien, ce qui réduit de manière appréciable le temps de calcul. Dans cette situation, le nombre d'états est $N!^2 / (N/2)!^4 \approx 4^N / N$.

1.3.2 Recherche de l'état fondamental

La méthode de Lanczos utilise le concept de l'espace de Krylov. Les vecteurs de cet espace s'obtiennent en appliquant successivement l'hamiltonien sur un vecteur de départ quelconque $|\phi_0\rangle$ un grand nombre de fois (M). On obtient ainsi le sous-espace suivant :

$$\text{span} \left\{ |\phi_0\rangle, H |\phi_0\rangle, H^2 |\phi_0\rangle, \dots, H^M |\phi_0\rangle \right\} \quad (1.13)$$

L'espace de Krylov a comme caractéristique de pouvoir bien représenter les deux états d'énergies extrêmes (dont l'état fondamental) même avec une faible valeur de M par rapport à la taille de l'hamiltonien.

La méthode de Lanczos utilisera une base différente de (1.13) dont les vecteurs seront maintenant orthogonaux tout en conservant les puissances de H d'un vecteur à l'autre, ce qui conservera aussi les caractéristiques de l'espace de Krylov quant à l'état fondamental. Les nouveaux vecteurs sont construits avec la relation de récurrence suivante :

$$|\phi_{n+1}\rangle = H |\phi_n\rangle - a_n |\phi_n\rangle - b_n^2 |\phi_{n-1}\rangle \quad (1.14)$$

où :

$$a_n = \frac{\langle \phi_n | H | \phi_n \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}, \quad b_n^2 = \frac{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}{\langle \phi_{n-1} | \phi_{n-1} \rangle} \quad \text{et} \quad b_0 = 0 \quad (1.15)$$

Si on transforme ces nouveaux états dans une base normalisée avec $|n\rangle = |\phi_n\rangle / \sqrt{\langle \phi_n | \phi_n \rangle}$, à partir de la relation de récurrence (1.14), on obtient :

$$H |n\rangle = b_n |n-1\rangle + a_n |n\rangle + b_{n+1} |n+1\rangle \quad (1.16)$$

Secteurs	États	·	·	↑	·	·	↑	↓	·	·	↓	↑	↑	↑↓	·	↑	↓	↓	↑	·	↑↓	↓	↓	↑↓	↑	↑	↑↓	↓	↓	↑↓	↑↓	
$N_e=0, S=0$	· ·	·	·																													
$N_e=1, S=1$	↑ ·			t																												
	· ↑			t																												
$N_e=1, S=-1$	↓ ·					t																										
	· ↓					t																										
$N_e=2, S=2$	↑ ↑																															
$N_e=2, S=0$	↑↓ ·																															
	↑ ↓																															
	↓ ↑																															
	· ↑↓																															
$N_e=2, S=-2$	↓ ↓																															
$N_e=3, S=1$	↑↓ ↑																															
	↑ ↑↓																															
$N_e=3, S=-1$	↑↓ ↓																															
	↓ ↑↓																															
$N_e=4, S=0$	↑↓ ↑↓																															

FIGURE 1.5 Matrice du hamiltonien d'un amas de deux particules reliées par un terme de saut t . Les blocs du hamiltonien sont mis en évidence par des blocs gris et la ligne diagonale en gris foncé contient des combinaisons de U et de μ . On y dénote aussi les secteurs ou les sous-espaces des différents états qui permettent de composer les blocs avec comme identifiants N_e correspondant au nombre d'électrons des états et S au spin total des états.

Ce qui nous permet de voir la forme de l'hamiltonien dans cette base :

$$H = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_d \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

Cet hamiltonien est tridiagonal et sous cette forme il est facilement diagonalisable, ce qui nous permettra facilement de trouver l'état fondamental et son énergie.

1.3.3 Calcul de la fonction de Green

Maintenant qu'on a trouvé l'état fondamental $|\Omega\rangle$ et son énergie E_0 , on peut l'utiliser pour calculer les éléments de la matrice de la fonction de Green de l'amas qui sont donnés par les équations :

$$G'_{\mu\nu}(\omega) = G'_{\mu\nu,e}(\omega) + G'_{\mu\nu,h}(\omega) \quad (1.18)$$

avec

$$\begin{aligned} G'_{\mu\nu,e}(\omega) &= \langle \Omega | c_\mu \frac{1}{\omega - H + E_0} c_\nu^\dagger | \Omega \rangle \\ G'_{\mu\nu,h}(\omega) &= \langle \Omega | c_\nu^\dagger \frac{1}{\omega + H - E_0} c_\mu | \Omega \rangle \end{aligned} \quad (1.19)$$

où les indices μ et ν permettent d'identifier les électrons sur les sites de l'amas tandis que les indices e et h représentent les deux situations où on crée et annihile un électron ou un trou.

Une méthode de calcul possible consiste tout d'abord à calculer les éléments diagonaux tels que (où $|\phi_\mu\rangle = c_\nu^\dagger |\Omega\rangle$) :

$$G'_{\mu\mu,e}(\omega) = \langle \phi_\mu | \frac{1}{\omega - H + E_0} | \phi_\mu \rangle \quad (1.20)$$

Pour calculer chacun de ces éléments, il faut relancer la procédure de Lanczos, mais cette fois, avec comme état de départ $|\phi_0\rangle = |\phi_\mu\rangle / \langle \phi_\mu | \phi_\mu \rangle$, ce qui nous donnera de nouveaux a_n et b_n . Dans ce sous-espace, la valeur de $G'_{\mu\mu,e}$ sera égale au premier élément

de la matrice inverse de $(\omega - H + E_0)$ multiplié par la normalisation $\langle \phi_\mu | \phi_\mu \rangle$ et il a été montré ([5]) qu'on peut calculer ce terme à partir de la fraction continue suivante :

$$G'_{\mu\mu,e}(\omega) = \frac{\langle \phi_\mu | \phi_\mu \rangle}{\omega - a_0 - \frac{b_1^2}{\omega - a_1 - \frac{b_2^2}{\omega - a_2 - \dots}}} \quad (1.21)$$

Pour les termes où $\mu \neq \nu$, on va utiliser le fait que la matrice de la fonction de Green est symétrique donc que $G'_{\mu\nu,e} = G'_{\nu\mu,e}$, ce qui nous permet d'écrire :

$$G'_{\mu\nu,e}(\omega) = \frac{1}{2} \left(\langle \Omega | (c_\mu + c_\nu) \frac{1}{\omega - H + E_0} (c_\mu^\dagger + c_\nu^\dagger) | \Omega \rangle - G'_{\mu\mu,e}(\omega) - G'_{\nu\nu,e}(\omega) \right) \quad (1.22)$$

Le premier terme de cette équation pourra se calculer de la même manière que pour les éléments diagonaux avec $|\phi_\mu\rangle = (c_\mu^\dagger + c_\nu^\dagger) |\Omega\rangle$, ce qui nous permettra de calculer tous les $G'_{\mu\nu,e}$. En effectuant la même procédure pour la partie des trous de la fonction de Green, on pourra finalement obtenir une bonne approximation de la fonction de Green de l'amas.

En pratique, on n'utilise pas exactement cet algorithme pour calculer les fonctions de Green, mais un algorithme similaire qui est la méthode de Lanczos de bande [19] qui donne à peu près les mêmes résultats dans un laps de temps un peu plus court.

1.3.4 Espaces de la fonction de Green et formalisme de Nambu

Avec la définition des éléments de la fonction de Green provenant des équations (1.18) et (1.19), on peut remarquer que si l'hamiltonien conserve le nombre de particules pour chaque spin, les éléments dont le μ et le ν ont des spins différents seront nuls. La forme de la fonction de Green de l'amas sera donc :

$$\mathbf{G}'(\omega) = \begin{pmatrix} \mathbf{G}'_{\uparrow}(\omega) & 0 \\ 0 & \mathbf{G}'_{\downarrow}(\omega) \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

où les premières colonnes et rangées correspondent aux sites de l'amas avec des électrons de spin up et les deuxièmes aux électrons de spin down.

Dans un hamiltonien comme celui introduit pour le modèle de Hubbard à une bande (1.2), les électrons de spin up et de spin down sont sur un pied d'égalité, ce qui occasionne que $\mathbf{G}'_{\uparrow}(\omega)$ sera égal à $\mathbf{G}'_{\downarrow}(\omega)$, ce qui réduit le nombre d'éléments de la fonction de Green à calculer. Si, par contre, l'hamiltonien contient des termes qui différentie les spins up des spins down, en induisant un ordre magnétique par exemple, $\mathbf{G}'_{\uparrow}(\omega)$ et $\mathbf{G}'_{\downarrow}(\omega)$ seront différents et il faudra les calculer séparément.

Dans cet espace de la fonction de Green qu'on peut qualifier d'espace "normal", on peut associer les colonnes aux opérateurs d'annihilation et les rangées aux opérateurs de création, ce qui fait que chaque élément de la fonction de Green correspond à un $c_{\mu}^{\dagger}c_{\nu}$. Cependant, on va introduire plus tard de la supraconductivité dans l'hamiltonien en insérant des termes d'appariement qui vont venir créer ou annihiler des paires de Cooper. Ces termes seront de la forme $c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\downarrow}^{\dagger}$ et $c_{i\uparrow}c_{j\downarrow}$ et sont incompatibles avec l'espace normal de la fonction de Green. Pour cette situation, il existe le formalisme de Nambu qui modifie l'espace de la fonction de Green pour permettre que les termes d'appariement soient pris en compte. L'astuce de ce formalisme est de prendre le conjugué complexe des opérateurs de création et d'annihilation pour un des deux spins. Ce faisant, la fonction de Green aura la forme suivante :

$$\mathbf{G}'(\omega) = \begin{pmatrix} \text{éléments } c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\uparrow} & \text{éléments } c_{i\uparrow}^{\dagger}c_{j\downarrow}^{\dagger} \\ \text{éléments } c_{i\downarrow}c_{j\uparrow} & \text{éléments } c_{i\downarrow}c_{j\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

Les termes d'appariement seront maintenant inclus dans les blocs hors-diagonaux de la fonction de Green.

1.4 Algorithmes de recherche de solutions

Il existe deux méthodes principales utilisant la CPT pour trouver une solution approximative à un système : la VCA et la CDMFT. Par solution, on entend ici qu'il s'agit du résultat final de la convergence d'un algorithme correspondant à une fonction de Green particulière duquel on pourra extraire des informations sur le système comme les densités électroniques sur chaque site par exemple.

1.4.1 VCA

La VCA (pour Variational Cluster Approximation) se base essentiellement sur la fonctionnelle de la self-énergie (SEF) qui se définit comme suit ([18]) :

$$\Omega[\Sigma] = F[\Sigma] - \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma) \quad (1.25)$$

où Tr est une trace d'une fonctionnelle qui va en fait sommer sur les fréquences ω et $\tilde{\mathbf{k}}$. $\Omega[\Sigma]$ a la propriété d'équivaloir thermodynamiquement au grand potentiel lorsque l'équation de Dyson (1.7) est respectée. Quant à $F[\Sigma]$, il s'agit d'une fonctionnelle définie de la manière suivante :

$$F[\Sigma] = \Phi[\mathbf{G}] - \text{Tr}(\Sigma\mathbf{G}) \quad (1.26)$$

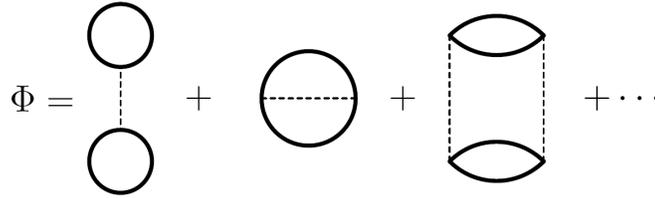


FIGURE 1.6 Fonctionnelle de Luttinger-Ward représentée à l'aide de diagrammes squelettes.

où $\Phi[\mathbf{G}]$ est la fonctionnelle de Luttinger-Ward qui est la somme des diagrammes squelettes à 2 particules qui sont fermés et non-séparés [15] (voir figure 1.6).

La fonctionnelle de Luttinger-Ward est d'ailleurs définie de sorte que sa dérivée fonctionnelle donne la self-énergie :

$$\frac{\delta\Phi[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} = \Sigma \quad (1.27)$$

Il est très difficile, voire impossible d'obtenir $\Phi[\mathbf{G}]$, ce qui semble causer un problème à priori pour calculer $\Omega[\Sigma]$. En fait, on ne calculera pas $\Phi[\mathbf{G}]$ ni même $F[\Sigma]$, mais on va utiliser la propriété que $F[\Sigma]$ ne dépend que de la self-énergie. Comme on a imposé plus tôt que la self-énergie de l'amas est la même pour le réseau, alors $F[\Sigma]$ sera aussi le même pour l'amas et le réseau. À partir de (1.25), on peut maintenant écrire :

$$F[\Sigma] = \Omega[\Sigma] + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma) = \Omega'[\Sigma] + \text{Tr} \ln(\mathbf{G}'_0^{-1} - \Sigma) \quad (1.28)$$

Ce qui devient à l'aide de l'équation de Dyson (1.7) et de l'équation (1.6) :

$$\Omega[\Sigma] = \Omega' + \text{Tr} \ln(\mathbf{1} - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}})\mathbf{G}'(\omega)) \quad (1.29)$$

Ici, Ω' est en fait l'énergie du fondamental de l'amas qu'on obtient avec la méthode de Lanczos, ce qui permettra de calculer $\Omega[\Sigma]$.

La fonctionnelle de la self-énergie est définie de sorte à ce que lorsqu'on la dérive par la self-énergie (et en utilisant la propriété (1.27)), on obtient les termes de l'équation de Dyson :

$$\frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} = -\mathbf{G} + (\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma)^{-1} \quad (1.30)$$

Si la self-énergie respecte l'équation de Dyson, alors la dérivée fonctionnelle de la SEF (1.30) sera nulle. Nous utiliserons cette propriété en incorporant des paramètres λ qui influenceront sur la self-énergie. Ces paramètres nous permettront de sonder l'espace de la self-énergie afin de tenter de trouver la self-énergie idéale permettant de respecter l'équation de Dyson. Si nous avons un nombre de paramètres suffisant pour sonder en entier l'espace de la self-énergie, on peut effectuer la transformation suivante sur la propriété (1.30) dans le cas où la self-énergie est idéale :

$$\left. \frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} \right|_{\Sigma_{\text{idéal}}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left. \frac{\partial\Omega[\lambda]}{\partial\lambda} \right|_{\lambda_{\text{idéaux}}} = 0 \quad (1.31)$$

Autrement dit, en trouvant un extremum des paramètres λ sur $\Omega[\lambda]$, la self-énergie qui en résultera sera la self-énergie idéale. Cet extremum (minimum, maximum ou point de selle) pourra être trouvé par une méthode d'optimisation telle que la méthode de Newton-Raphson. Cependant, nous utiliserons généralement que quelques paramètres λ pour sonder l'espace de la self-énergie. Ce faisant, il sera peu probable que les paramètres λ permettent d'atteindre la self-énergie idéale, mais le fait de trouver les valeurs de ces paramètres λ qui satisfont l'égalité (1.31) permettra d'obtenir une self-énergie qui s'y rapproche.

Les paramètres que nous utiliserons ici pour sonder la self-énergie seront des champs de Weiss. Un champ de Weiss permet d'induire un phénomène que l'on veut observer sur les amas (ordre de spin, ordre de charge, supraconductivité, etc...) en ajoutant les termes d'énergie correspondant au phénomène à l'hamiltonien. Si on désire, par exemple, traiter l'antiferromagnétisme de Néel, on va utiliser le champ de Weiss suivant :

$$H'_M = M\mathcal{O}_M \equiv M \sum_{\mathbf{R}} \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) (n_{\mathbf{R}\uparrow} - n_{\mathbf{R}\downarrow}) \quad (1.32)$$

où $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ dans la situation antiferromagnétique, ce qui permettra au cosinus d'alterner le signe pour chaque site voisin et ainsi reproduire le bon patron. Le paramètre M permettra de modifier librement l'amplitude du champ de Weiss. Cette équation permet aussi de traiter les ordres de charge, il suffira simplement de modifier la dernière parenthèse par $(n_{\mathbf{R}\uparrow} + n_{\mathbf{R}\downarrow})$ pour utiliser la densité de charge des sites et non leur densité de spin.

Maintenant, pour traiter la supraconductivité, on aura un champ de Weiss passablement différent qui induit plutôt des paires de Cooper à l'hamiltonien avec l'équation :

$$\mathcal{O}_{sc} \equiv \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} (\Delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\mathbf{r}\uparrow} c_{\mathbf{r}'\downarrow} + h.c.) \quad (1.33)$$

Ce champ de Weiss peut induire plusieurs types de supraconductivité à l'aide du choix de l'appariement $\Delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$. Par exemple, pour une supraconductivité de type s-wave, on a $\Delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$. Pour la supraconductivité d-wave ($d_{x^2-y^2}$), dans le cas d'un réseau carré :

$$\Delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} - \mathbf{r}' = \pm \mathbf{e}_x \\ -1 & \text{si } \mathbf{r} - \mathbf{r}' = \pm \mathbf{e}_y \end{cases} \quad (1.34)$$

Précédemment, on a vu qu'on pouvait utiliser la méthode sur un seul bloc ou sous-espace du hamiltonien, car les blocs du hamiltonien n'ont pas d'interactions entre eux. Cependant, en introduisant le champ de Weiss supraconducteur, on crée des interactions entre les blocs en enlevant et en ajoutant des paires d'électrons. Dans cette situation, on devra donc avoir un espace d'Hilbert plus grand pour tenir en compte de ces autres sous-espaces (qui ont un spin total égal au sous-espace de départ). Aussi, comme la définition du champ de Weiss supraconducteur enlève ou ajoute deux électrons à la fois, on n'utilisera pas les sous-espaces qui sont inaccessibles à partir du sous-espace qu'on désire utiliser. À titre d'exemple, en se basant sur la figure 1.5, avec un champ de Weiss supraconducteur, si on s'intéresse au demi-remplissage qui est le sous-espace ($N=2, S=0$), on devra prendre aussi inclure les sous-espaces ($N=0, S=0$) et ($N=4, S=0$) pour traiter la supraconductivité.

1.4.2 CDMFT

La CDMFT (pour Cluster Dynamical Mean Field Theory) [21] [13] [12] est, comme son nom l'indique, une méthode qui utilise des amas et qui a comme origine la DMFT (Dynamical Mean Field Theory). La DMFT permet d'obtenir une multitude de résultats intéressants tels que la caractérisation de la transition de Mott [1], mais je vais plutôt mettre l'emphasis sur la CDMFT qui est un peu plus générale et permet de traiter les ondes de densité de spin et de charge.

L'idée derrière la CDMFT est d'ajouter un bain à l'amas pour simuler l'influence extérieure du réseau sur les sites de l'amas. Ce bain comporte des orbitales électroniques qui ajoutent des degrés de liberté supplémentaires aux sites leur permettant de sonder une plus grande plage de configurations électroniques en échangeant des électrons avec le bain. Ces orbitales peuvent être schématisées comme étant des sites sans position qu'on ajoutera à l'hamiltonien et qui posséderont une énergie ϵ et une hybridation θ avec les sites de l'amas (voir figure 1.7). L'hamiltonien de l'amas avec ces sites de bains devient :

$$H' = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + \sum_{i,k,\sigma,\sigma'} \left(\theta_{k\sigma i\sigma'} c_{i\sigma'}^\dagger a_{k\sigma} + \text{h.c.} \right) + \sum_{k,\sigma} \epsilon_{k\sigma} n_{k\sigma} \quad (1.35)$$

où les i et j identifient les sites dans l'amas, k identifie les sites de bains et les opérateurs a et a^\dagger annihilent et créent des électrons sur les sites de bains. En guise de clarification, $\theta_{k\sigma i\sigma'}$ est le terme d'hybridation entre le site de bain k de spin σ et le site de l'amas i de spin σ' . Soulignons que cette terminologie nous permet plusieurs libertés dans le choix

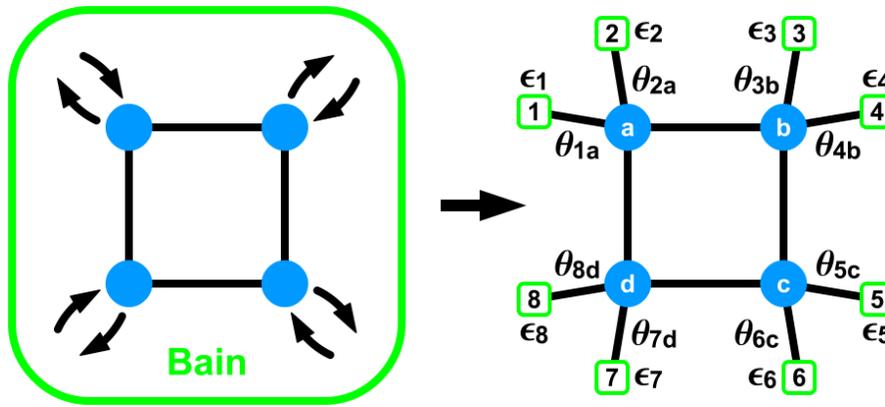


FIGURE 1.7 Exemple d'amas 2x2 avec 8 sites de bain. Les différents termes d'énergie ϵ et termes d'hybridation θ sont indiqués.

des sites de bains et leur hybridation avec les sites. On peut par exemple avoir des sites de bains qui sont liés à plusieurs sites de l'amas. Aussi, on peut attribuer des énergies et des hybridations différentes selon le spin, ce qui permettra d'ajouter encore plus de degrés de liberté à l'amas.

Il est possible de montrer [21] que ces termes contribueront à la fonction de Green de l'amas de la manière suivante :

$$\mathbf{G}^{-1} = \omega + \mu - \mathbf{t}' - \Gamma(\omega) - \Sigma(\omega) \quad (1.36)$$

où $\Gamma(\omega)$ est appelée la fonction d'hybridation, qui interviendra directement dans la CDMFT, dont les éléments sont définis comme suit :

$$\Gamma_{\mu\nu}(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{\theta_{\mu\alpha} \theta_{\nu\alpha}^*}{\omega - \epsilon_{\alpha}} \quad (1.37)$$

où μ et ν réfèrent à un site de l'amas et à un spin (autrement dit : $\mu = i, \sigma$) et α réfère à un site de bain et à un spin.

Au niveau du choix des sites de bain, idéalement on désire en avoir le plus grand nombre possible, car plus on a de degrés de liberté, plus la CDMFT sera près de la solution exacte. Cependant, chaque site de bain s'ajoute à l'espace de Hilbert de la même manière qu'un site de l'amas, ce qui peut rapidement faire gonfler et peut donc alourdir beaucoup les calculs de la fonction de Green qui dépendent de l'hamiltonien de l'amas. Il faut donc bien doser le nombre de sites de bain et les mettre à des endroits stratégiques [14].

Les étapes de l'algorithme de la CDMFT vont comme suit :

1. On commence tout d'abord en se définissant des paramètres ϵ et θ de départ.
2. On calcule la fonction de Green $\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ avec l'équation (1.6).
3. À partir de la fonction de Green, on calcule sa transformée partielle sur le premier amas (à $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{0}$) qui vaut :

$$\bar{\mathbf{G}}(\omega) = \frac{L}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \quad (1.38)$$

où L est le nombre de sites de l'amas et N le nombre de sites du réseau, ce qui fait en sorte que le rapport N/L est le nombre de valeurs de $\tilde{\mathbf{k}}$.

4. Ensuite, on minimise la fonction suivante appelée fonction de distance en faisant varier les valeurs de ϵ et θ .

$$d = \sum_{\omega, \nu, \nu'} \left| (\mathbf{G}'^{-1}(\omega) - \bar{\mathbf{G}}^{-1}(\omega))_{\nu\nu'} \right|^2 \quad (1.39)$$

$$d = \sum_{\omega, \nu, \nu'} \left| (\omega + \mu - \mathbf{t}' - \mathbf{\Gamma}(\omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) - \bar{\mathbf{G}}^{-1}(\omega))_{\nu\nu'} \right|^2$$

Cette fonction a pour objectif de faire équivaloir la fonction de Green de l'amas à celle du réseau (elles ne seront jamais égales, mais on tente de les faire correspondre le plus possible). Pour justifier cette étape, on se sert du fait que si l'amas représentait parfaitement le réseau, la fonction de Green de l'amas et du réseau seraient égales et donc c'est pourquoi on tente de s'approcher de cette situation. Cette étape donne à la CDMFT l'avantage d'être relativement rapide, car pour minimiser d , en ayant calculé \mathbf{G} et $\mathbf{\Sigma}$, on n'a qu'à modifier les paramètres ϵ et θ qui apparaissent uniquement dans la fonction d'hybridation $\mathbf{\Gamma}$ qui est très peu coûteuse à calculer.

5. Répéter le tout à partir de l'étape 2 avec les nouveaux paramètres trouvés à l'étape 4 jusqu'à ce que $\mathbf{\Gamma}$ ait convergé de manière satisfaisante.

La CDMFT peut aussi traiter la supraconductivité de type d. On commence par ajouter des termes d'appariement singulets dans l'hamiltonien de manière similaire aux champs de Weiss supraconducteur en VCA (1.33), mais cette fois-ci, au lieu de former des paires entre les sites du réseau, on en forme entre les sites de bain. On ajoute à l'équation (1.35) la somme suivante :

$$\sum_{i,j} d_{ij} \left(a_{i,\uparrow}^\dagger a_{j,\downarrow}^\dagger + a_{j,\uparrow}^\dagger a_{i,\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \quad (1.40)$$

où d_{ij} sont les paramètres des liens d'appariement entre les sites de bain i et j qu'on pourra ajouter aux autres paramètres variationnels.

Cependant, pour calculer celle-ci, on ne peut pas utiliser directement la fonction d'hybridation (1.37), car cette définition de la fonction d'hybridation ne tient pas compte des termes entre des sites de bain différents, ce que les d_{ij} vont produire. On prendra donc une définition différente de la fonction d'hybridation qui est la suivante :

$$\Gamma(\omega) = \boldsymbol{\theta} \frac{1}{\omega - \boldsymbol{\epsilon}} \boldsymbol{\theta}^\dagger \quad (1.41)$$

Les matrices $\boldsymbol{\theta}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ vont contenir tous les paramètres variationnels tels que les sauts $\theta_{\mu\alpha}$ et les énergies ϵ_α vus précédemment. Ces matrices font d'ailleurs partie de la fonction de Green complète (qui comprend aussi les sites de bains) de la manière suivante :

$$\mathbf{G}_{\text{complète}}'^{-1} = \begin{pmatrix} \omega + \mu - \mathbf{t}' & \boldsymbol{\theta} \\ \boldsymbol{\theta}^\dagger & \omega - \boldsymbol{\epsilon} \end{pmatrix} \quad (1.42)$$

où les premières colonnes et rangées correspondent aux sites de l'amas et les deuxièmes correspondent aux sites de bains.

Ce faisant, la matrice $\boldsymbol{\epsilon}$ ne contient pas seulement les énergies des sites de bain ϵ_α , mais aussi toutes les hybridations possibles entre les sites de bain dont les liens d'appariement d_{ij} qui sont entre les sites voisins de spin opposé. Donc, à l'aide de l'équation (1.41), on peut désormais calculer la fonction de Green en tenant compte des d_{ij} .

1.4.3 CDIA et méthodes mixtes

La VCA et la CDMFT possèdent chacun leurs avantages et inconvénients et il existe des méthodes qui mélangent des éléments de ces deux dernières dans le but d'aller chercher les avantages de chaque méthode et d'obtenir de meilleures solutions.

En particulier, il y a la méthode de la CDIA (pour Cluster Dynamical Impurity Approximation) [18] qui consiste à traiter le même système que la CDMFT avec des sites de bain, mais au lieu de trouver les paramètres variationnels via l'algorithme de la CDMFT, on les trouve en minimisant/maximisant la fonctionnelle de la self-énergie comme dans la VCA. Cette méthode a l'avantage d'être, en théorie, plus exacte, mais à un coût plus élevé en temps de calcul étant donné qu'on doit calculer beaucoup plus de fois la fonction de Green qu'en CDMFT.

Il existe aussi une autre variante de la CDIA qui est d'effectuer la VCA avec les champs de Weiss, mais auquel on y ajoute un ou plusieurs sites de bain [18]. Un exemple d'amas pour cette situation est illustré à la figure 1.8. Un peu comme la CDIA, les paramètres variationnels des sites de bains seront trouvés à partir de la fonctionnelle de la self-énergie. Cette méthode a l'avantage de mélanger deux types de degrés de liberté différents (ceux du bain et ceux des champs de Weiss), ce qui permet potentiellement d'obtenir une meilleure solution avec une augmentation du temps de calcul plutôt modérée.

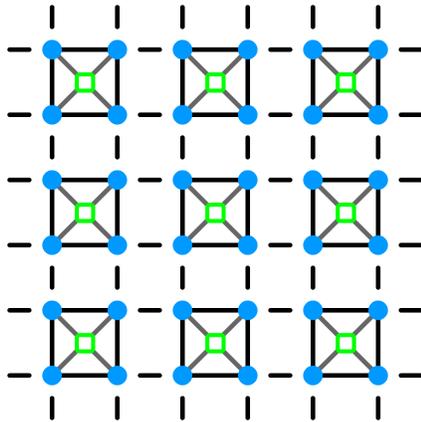


FIGURE 1.8 Exemple d'amas de 4 sites avec un seul site de bain pouvant servir pour la méthode de la VCA avec des sites de bain additionnels.

1.4.4 Calcul de moyennes et paramètres d'ordre

Obtenir une solution en VCA ou en CDMFT est une chose, mais il faut aussi en tirer des résultats. Pour cela, nous allons mesurer des observables sur la solution obtenue, ce qui permettra de caractériser ses propriétés physiques.

On peut mesurer par exemple le paramètre d'ordre d'un champ de Weiss pour savoir si le champ est présent sur l'amas et avec quelle intensité. Pour ce faire, il faut d'abord réécrire le champ de Weiss en un terme à un corps du hamiltonien :

$$\mathcal{O} = \sum_{\alpha\beta} s_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \quad (1.43)$$

où les α et β sont les indices permettant d'identifier les sites et les spins. $s_{\alpha\beta}$ sera déterminé par le champ de Weiss. Par exemple, pour l'antiferromagnétisme, la définition de $s_{\alpha\beta}$ aura la forme suivante :

$$s_{\mathbf{R}\sigma, \mathbf{R}'\sigma'} = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \delta_{\sigma\sigma'} (-1)^\sigma e^{i(\pi, \pi) \cdot \mathbf{R}} \quad (1.44)$$

où σ vaut 1 pour un spin up et 0 pour un spin down (ou inversement).

Pour calculer le paramètre d'ordre, on va calculer la valeur moyenne $\bar{\mathcal{O}}$ de \mathcal{O} qui vaut :

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha\beta} s_{\alpha\beta} \langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle \quad (1.45)$$

où N est le nombre d'électrons (qui se calculera avec $s_{\mathbf{R}\sigma, \mathbf{R}'\sigma'} = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \delta_{\sigma\sigma'}$). La moyenne $\langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle$ est directement reliée à la fonction de Green de la manière suivante :

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle = \int_{C<} \frac{dz}{2\pi i} G_{\beta\alpha}(z) \quad (1.46)$$

où le domaine de l'intégrale $C <$ est le contour dans le plan complexe de l'axe réel négatif de la fréquence ω (z étant ici la fréquence complexe). La valeur attendue devient donc :

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \int_{C<} \frac{dz}{2\pi i} \text{tr}[\mathbf{s}\mathbf{G}(z)] \quad (1.47)$$

Ici, l'espace des matrices \mathbf{s} et $\mathbf{G}(z)$ couvre tous les sites du réseau. On va ramener ces matrices à l'espace de l'amas en réincorporant au vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{k}}$ et en sommant sur celle-ci (la somme sur $\tilde{\mathbf{k}}$ provient en fait de la trace) :

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \int_{C<} \frac{dz}{2\pi i} \text{tr}[\mathbf{s}(\tilde{\mathbf{k}})\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, z)] \quad (1.48)$$

Cette équation nous permettra de calculer les paramètres d'ordre des champs de Weiss assez facilement à partir de la fonction de Green d'une solution obtenue en VCA ou en CDMFT. Fait intéressant à noter : elle permet de mesurer les paramètres d'ordres des champs de Weiss même s'ils ne sont pas utilisés dans la méthode prise pour trouver la solution comme c'est le cas en CDMFT.

Dans le cas de la supraconductivité, on peut aussi calculer un paramètre d'ordre supraconducteur à l'aide de son champ de Weiss (1.33). Ce paramètre d'ordre nous indique la force de la supraconductivité à température nulle et peut nous donner une idée grossière de la température critique T_c car plus la supraconductivité est forte à $T = 0$, plus elle devrait persister longtemps face à l'augmentation de la température.

Chapitre 2

Techniques employées

Nous allons présenter dans ce chapitre les différentes techniques et méthodes utilisées appliquées à la VCA et la CDMFT ayant servi à l'obtention des résultats du prochain chapitre. Une partie d'entre elles sont des méthodes que j'ai élaborées pour répondre à certains besoins particuliers que ma recherche demandait.

2.1 Balayage en fonction du potentiel chimique

Un résultat intéressant à obtenir avec la VCA ou la CDMFT est de produire un diagramme de phase des paramètres d'ordre des champs de Weiss voulus en fonction de la densité électronique. Rappelons qu'on peut modifier la densité électronique à l'aide du potentiel chimique μ , alors pour tracer un tel diagramme de phase, il faudra effectuer la VCA ou la CDMFT pour plusieurs valeurs de μ différentes. On peut donc faire un balayage en fonction du potentiel chimique où on commence en calculant la VCA ou la CDMFT avec des paramètres variationnels de départ pour une valeur de μ initiale (ce qui nous donnera une densité électronique donnée), puis de refaire la méthode pour une valeur de μ un peu plus grande (pour sonder les densités électroniques plus grandes) ou un peu plus petite jusqu'à ce qu'on soit satisfait. À chaque itération de la VCA ou de la CDMFT, les paramètres de départ seront les mêmes que les paramètres obtenus par la dernière solution (ou une extrapolation des paramètres à l'aide des n dernières solutions) pour avoir des paramètres qui sont plus susceptibles d'être près des valeurs où ils devront converger.

Notons qu'il est difficile de savoir quelle densité électronique on obtiendra pour un potentiel chimique donné. De plus, la densité électronique ne varie pas de manière linéaire en fonction du potentiel chimique et possède une dépendance en fonction de tous les autres paramètres (autant des paramètres du modèle utilisé que les paramètres variationnels). Il faut donc parfois faire quelques calculs d'essai pour savoir quelles valeurs de μ permettront d'obtenir les densités électroniques désirées.

2.2 Balayage à densité constante

Parfois on désire voir l'effet d'un changement d'un paramètre sur une solution de VCA ou de CDMFT, mais à densité électronique constante. Mais, tel que mentionné précédemment, chaque paramètre a un impact sur la densité électronique, donc en modifiant un paramètre, on modifiera la densité électronique. Heureusement, on peut ramener la densité électronique à celle de départ en l'ajustant à l'aide du potentiel chimique.

Alors, pour effectuer un balayage d'un paramètre à densité constante, il faut à chaque valeur du paramètre calculer une première fois la VCA ou la CDMFT, vérifier si la densité électronique résultante de ce calcul se situe suffisamment près de la densité espérée. Si elle est trop haute, on ré-effectuera le calcul pour un μ plus faible (et vice-versa), ce qui nous donnera une seconde densité électronique. Si cette densité électronique n'est pas satisfaisante, on peut interpoler linéairement la valeur de μ pour laquelle on devrait avoir la densité désirée à l'aide de l'information sur la densité électronique et μ que l'on connaît des deux dernières solutions. Il suffit de répéter le processus jusqu'à ce qu'on obtienne la bonne densité électronique puis de passer à la valeur suivante du paramètre balayé.

2.3 Détermination des solutions retenues en VCA

Dans le chapitre 1, nous avons affirmé qu'il y a présence de solution en VCA lorsque la dérivée seconde de Ω est nulle en fonction des champs de Weiss. Nous avons donc trois types de solutions possibles qui répondent à ces critères pour chaque champ de Weiss : soit que le champ de Weiss engendre un minimum, un maximum ou un point de selle.

Lorsque nous avons un champ de Weiss de spin ou de supraconductivité, nous avons tendance à ne tenir compte que des solutions qui offrent un minimum à Ω . Il n'y a pas d'explication fondamentalement théorique pour expliquer cette décision, mais nous considérons Ω comme s'il s'agissait d'une énergie à minimiser. Ce faisant, les solutions maximales et les points de selle seraient en quelque sorte des solutions en équilibre instable où il ne suffirait que d'une légère perturbation pour quitter l'état d'équilibre. De plus, ça permet de justifier de ne pas utiliser les solutions où les champs de Weiss sont nuls (qui donnent généralement un maximum en Ω) lorsqu'une solution non-nulle existe pour un même potentiel chimique.

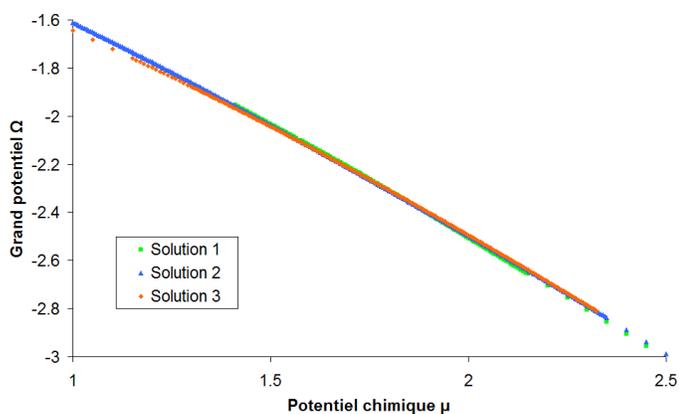
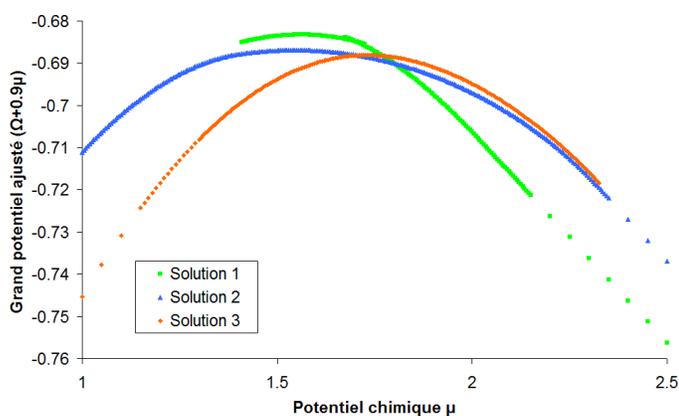
Cependant, pour les champs de Weiss de charge, la situation s'avère être différente. En pratique, les champs de Weiss de charge minimisent rarement Ω et ne possède qu'un seul maximum, ce qui a comme conséquence que la VCA n'aura pas d'autre choix que de converger vers ce maximum.

2.4 Comparaison des solutions en fonction du grand potentiel

Lorsque nous sommes en VCA et que nous avons calculé plusieurs types de solutions différentes (en utilisant des champs de Weiss différents par exemple) qui se produisent pour de mêmes valeurs du potentiel chimique μ , il est intéressant de savoir laquelle des solutions calculées est la plus favorable (celle qui est la plus susceptible de se produire) et à quel moment on passe d'une solution favorable à une autre. Pour ce faire, on peut utiliser la prémisse donnée dans la section précédente qui spécifiait qu'on désire généralement obtenir des minimums de la valeur de Ω comme si on la considérait comme une sorte d'énergie. Ce faisant, la solution qui aura la plus basse valeur de Ω devrait être la meilleure. Donc, pour savoir quel type de solution est la meilleure dépendamment de la valeur de μ , on peut réaliser un graphique de Ω de chaque solution obtenue pour, ce qui nous permettra de visualiser quelle solution est la plus favorable comparativement aux autres solutions.

Cependant lorsqu'on réalise un tel graphique, on constate rapidement que la courbe courbe est très pentue (voir exemple à la figure 2.1a) et il peut être difficile d'observer quel type de solution est la plus basse en Ω . C'est dû au fait que Ω a une forte dépendance en fonction du potentiel chimique. Pour atténuer ce problème, on peut ajouter une fonction linéaire en μ pour redresser la courbe de Ω , ce qui ne changera pas l'écart de la valeur de Ω et permet ainsi d'espacer visuellement les courbes (voir exemple à la figure 2.1b). Sinon, il est possible de faire encore mieux en calculant la valeur de Ω en l'absence de champs de Weiss pour toutes les valeurs de μ et de soustraire les valeurs Ω obtenues à celles des solutions à comparer (pour le même potentiel chimique). Ce faisant, on peut afficher l'écart entre la valeur de Ω des solutions et de la solution à champ nul, ce qui s'avère être encore plus facile à visualiser étant donné que l'on fait disparaître les toutes les dépendances importantes en μ sur Ω (voir exemple à la figure 2.1c).

En utilisant un de ces graphiques, on peut déterminer à quel moment (ou potentiel chimique) on passe d'une solution à une autre. Par exemple, en prenant la figure 2.1c, on peut déterminer que pour $\mu < 1.7$, on a la solution 3, suivie par la solution 2 jusqu'à $\mu = 1.8$, puis la solution 1 prends le dessus.

(a) Grand potentiel Ω sans correction.(b) Ajout d'une composante linéaire en μ .

(c) Soustraction de la solution à champ de Weiss nul. Le graphique est inversé.

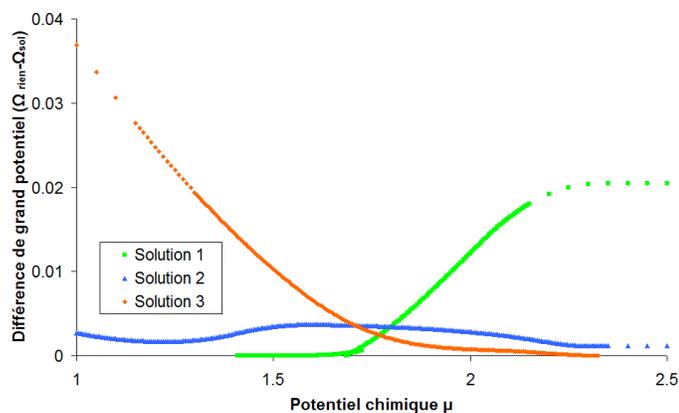


FIGURE 2.1 Exemple de graphiques du grand potentiel en fonction du potentiel chimique dans le but de comparer trois solutions différentes.

Évidemment, cette méthode ne fonctionnera pas avec les champs de Weiss de charge, car comme mentionné précédemment, on recherchera des maximums pour ceux-ci. Mais si les solutions auxquelles on s'intéresse sont, par exemple, des solutions de champ de Weiss de spin ou de supraconductivité et qu'on utilise les mêmes champs de Weiss de charge pour toutes les solutions, on peut voir la situation d'un point de vue différent. Il suffit d'imaginer qu'on ajoute les champs de Weiss de spin et de supraconductivité par rapport à une solution "à champ nul" qui fait varier uniquement les champs de Weiss de charge. Certes, cette solution où on n'a que des champs de Weiss de charge aura un Ω plus élevé par rapport à la solution où tous les champs sont nuls, mais les champs de spin et de supraconductivité vont réduire Ω à partir de celle-ci et la solution qui parvient à réduire le plus Ω devrait techniquement rester la plus favorable. On peut donc continuer à utiliser la méthode de comparaison dans cette situation.

2.5 Comparaison des solutions en fonction de l'énergie interne

La méthode de comparaison des solutions en fonction du grand potentiel a le désavantage d'être ambiguë lorsqu'on tente de connaître à quelle densité électronique on passe d'une solution à une autre lorsque les solutions possèdent des champs de Weiss différents. C'est que tous les champs de Weiss agissent sur la densité électronique, et ce, de manière différente, ce qui a pour conséquence que même si deux solutions ont le même potentiel chimique, les densités électroniques de ces solutions seront différentes. Alors, lorsqu'on désire trouver le potentiel chimique d'une frontière entre deux solutions, ces deux solutions auront deux densités électroniques différentes. Alors, cela produit l'effet indésirable qu'entre ces densités électroniques, les deux solutions sont soit simultanément présentes ou simultanément absentes.

Pour corriger ce problème, on prendra donc une méthode différente qui utilise le fait que la fonction Ω est le grand potentiel et qu'on peut effectuer une transformation de Legendre pour obtenir l'énergie interne en y ajoutant μN . Le nombre de particules N va être en fait ici la densité électronique qu'on obtient. La transformation de Legendre a comme conséquence que l'énergie interne variera en fonction de la densité électronique et non plus en fonction du potentiel chimique. Une fois que les énergies internes sont calculées, on va pouvoir comparer les solutions entre elles et celle qui aura la plus basse énergie interne en fonction de la densité électronique (ou du dopage) sera la plus favorable. Cette méthode lève le problème d'ambiguïté au niveau des densités électroniques, car ce sera maintenant une valeur de densité et non une valeur de μ qui définira la frontière entre deux solutions.

Encore une fois, on voudra comparer les solutions par le biais d'un graphique, cette fois avec l'énergie interne en fonction de la densité électronique. Cependant, comme Ω avait une forte dépendance en μ , l'énergie interne aura aussi une forte dépendance en densité électronique. On peut donc utiliser les mêmes méthodes pour atténuer les dépendances indésirables en ajoutant une composante linéaire en densité électronique ou en soustrayant la solution à champ nul. Par contre, pour la solution à champ nul, on n'obtiendra pas la même densité électronique même si on conserve le même potentiel chimique, donc il faudra par exemple faire un balayage en μ , puis utiliser des interpolations pour estimer l'énergie interne correspondant aux densités électroniques des solutions à comparer.

Autant la méthode de comparaison du grand potentiel que celle-ci s'appliquent difficilement à la CDMFT, car l'approche de la CDMFT est complètement différente en tentant d'égaliser la fonction de Green de l'amas à celle du réseau. Il s'agit en fait d'une approximation qui sera parfois meilleure pour un type de solution plutôt qu'un autre, ce qui biaise les méthodes de comparaisons et les rendent peu fiables pour la CDMFT.

2.6 Cartographie des solutions

Lorsqu'on utilise la VCA, on a besoin d'un point de départ pour définir l'amplitude des champs de Weiss. Il est essentiel de définir correctement ce point de départ, car si les valeurs des champs de Weiss sont trop éloignées des valeurs correspondantes à la solution recherchée (lorsque les dérivées secondes de Ω en fonction de l'amplitude des champs de Weiss sont nulles), il se peut que la méthode d'optimisation n'arrive pas à converger correctement. Dans ce cas, la méthode d'optimisation peut converger vers une situation où les champs de Weiss sont nuls ou à l'inverse converger vers des champs de Weiss qui tendent vers l'infini ou à ne pas converger tout simplement. Ce sont évidemment toutes des situations que l'on désire éviter lorsqu'on lance un calcul.

Pour éviter les problèmes de convergence, lorsqu'on a un champ de Weiss dont on ne sait pas pour quelle valeur la VCA devrait converger, généralement on effectue un balayage en calculant Ω pour plusieurs valeurs différentes du champ de Weiss. Ainsi, on pourra produire un graphique dans le but d'observer pour quelles valeurs on devrait se rapprocher d'une dérivée seconde nulle (voir exemple à la figure 2.2). Puis, il suffit de prendre l'estimation de la ou des valeurs où on a un minimum ou un maximum et de les utiliser comme point de départ dans la VCA (dans le cas de l'exemple donné, on prendrait une valeur autour de 0.6 comme point de départ).

Cependant, la situation se complexifie lorsqu'on fait face au même problème, mais sans savoir non plus pour quelle densité électronique (et secteur électronique) on a une solution. Ce qui est logique à faire dans ce cas est de réaliser plusieurs balayages

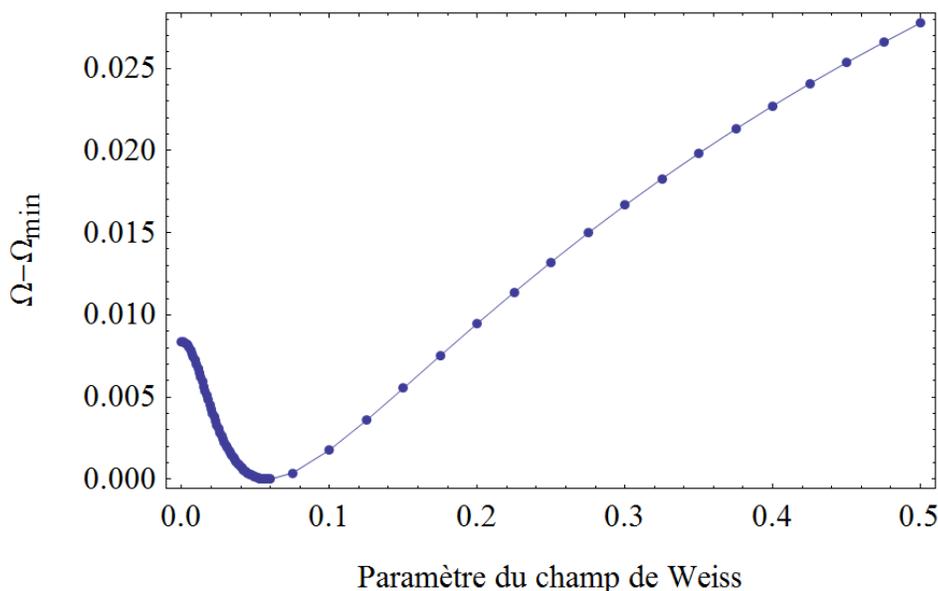


FIGURE 2.2 Exemple de recherche d'un minimum en VCA. La figure montre la forme de Ω en fonction du paramètre du champ de Weiss de l'ordre de rayure pour $\mu = 2$.

du champ de Weiss, mais pour plusieurs potentiels chimiques. Il me semblait naturel d'automatiser la tâche pour effectuer les balayages sur un grand nombre de potentiels chimiques dans le but de s'assurer de voir la présence de tous les types de solutions y compris les solutions qui n'existent que pour des densités électroniques très restreintes. Ces balayages permettent de connaître la valeur de Ω en fonction du potentiel chimique et de la valeur du champ de Weiss (voir l'exemple à la figure 2.3). À partir de ces données, il est relativement simple d'effectuer un traitement informatique pour estimer la position des maximums et minimums de Ω en fonction de la valeur du champ de Weiss pour chaque potentiel chimique. Cela nous permet de produire une sorte de carte qui montre les endroits où la VCA devrait converger vers une solution (voir la suite de l'exemple à la figure 2.4) et ainsi nous permettre de voir en un coup d'œil tous les types de solutions possibles pour le champ de Weiss.

La méthode que nous utilisons pour estimer la position des points sur la figure 2.4 est de tester, pour chaque potentiel chimique et pour chaque trois points consécutifs de l'amplitude du champ de Weiss si un minimum ou un maximum est présent entre ces trois points (si le point central est le plus grand ou le plus petit par rapport aux deux autres). Si tel est le cas, on estime la position de l'extremum avec une projection parabolique. Notons qu'on aurait pu aussi uniquement prendre la valeur du point central comme grossière estimation de l'extremum, ce qui est suffisant comme point de départ pour converger vers la solution en VCA.

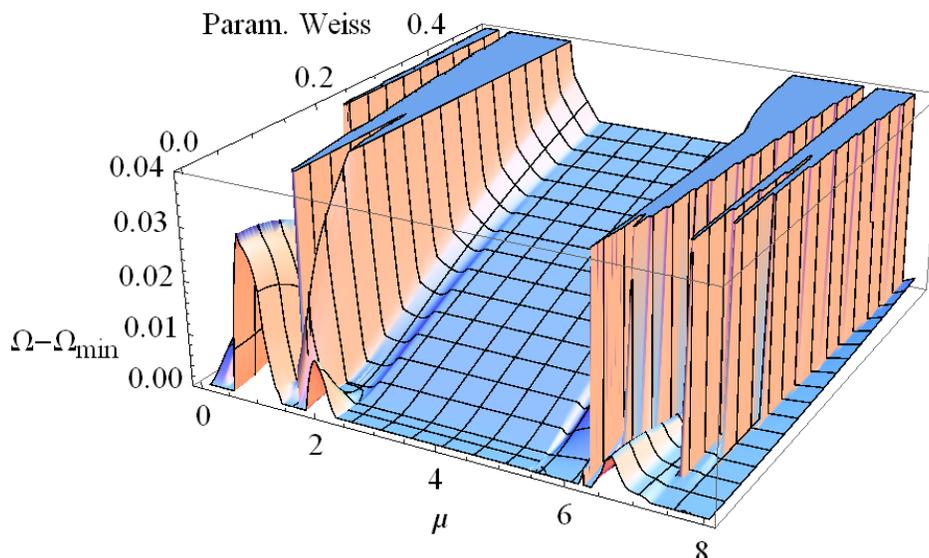


FIGURE 2.3 Graphique de la valeur de Ω en fonction de μ du paramètre d'un champ de Weiss de spin. Pour chaque μ , on a trouvé Ω_{min} , la valeur de Ω qui est la plus basse pour ce μ et on l'a soustraite à toutes les valeurs de Ω (pour les mêmes μ) pour faciliter la visualisation du graphique sans nuire au comportement de Ω en fonction du champ de Weiss. Notons la présence de discontinuités dans la valeur de Ω qui sont dues aux changements de secteur électronique.

Lorsqu'on veut utiliser cette méthode avec un champ de Weiss de densité de spin, il n'est pas nécessaire de sonder les valeurs négatives de celui-ci (tel que montré dans l'exemple à la figure 2.4). Les valeurs négatives du champ de Weiss devraient donner exactement les mêmes valeurs de Ω que les valeurs positives pour donner un effet miroir. C'est qu'en inversant le champ de Weiss, on permute son effet sur les spins up et down et si le modèle utilisé (tel que le modèle de Hubbard) traite les spins up et down de manière identique et indiscernable, on obtiendra le même effet.

On peut aussi utiliser cette méthode lorsqu'on a plusieurs champs de Weiss différents, par exemple, lorsqu'on veut faire intervenir en plus un champ de Weiss de charge globale. Cependant, ça implique que le nombre de valeurs de Ω à calculer sera plus grand et il faudra choisir soigneusement la plage de valeurs pour chaque paramètre (champs de Weiss et potentiel chimique) dans le but de calculer un minimum de points sans que ceux-ci soient trop distants pour détecter les extremums ou que l'espace sondé des valeurs soit trop restreint. Une fois que les points sont calculés, le traitement informatique demeure sensiblement le même pour estimer la position des extremums : pour chaque point, on prend deux points voisins dans le sens de chaque champ de

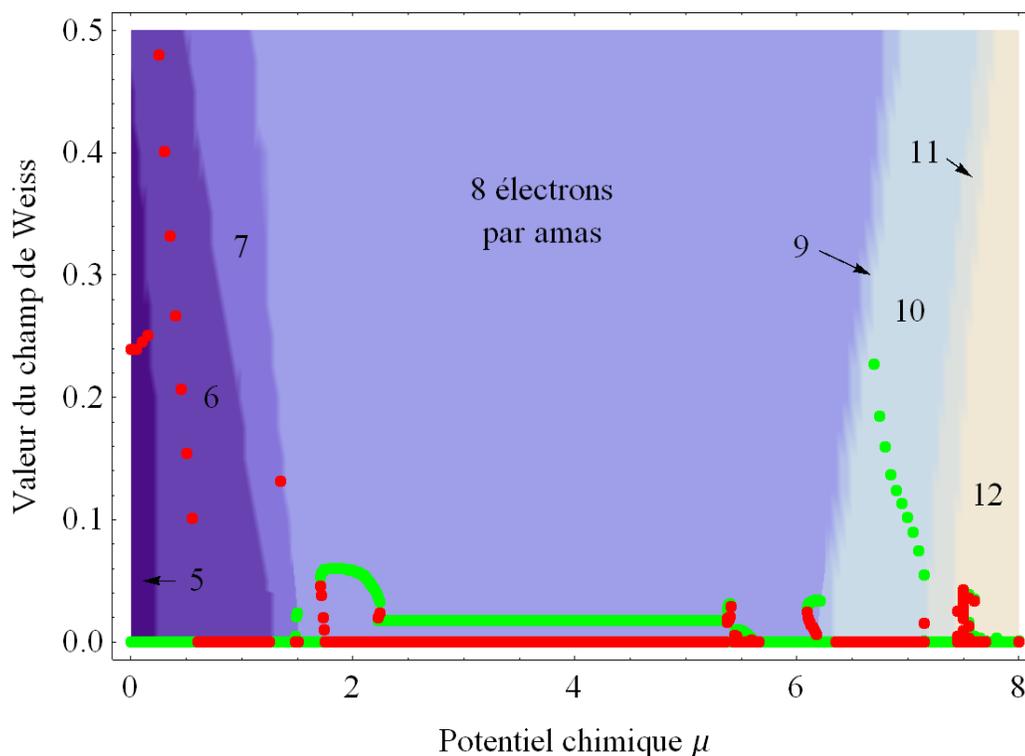


FIGURE 2.4 Exemple de carte des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω pour un champ de Weiss de spin en utilisant les données obtenues des balayages (figure 2.3). Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques qui changent en fonction du potentiel chimique, mais aussi en fonction de la valeur du champ de Weiss.

Weiss pour tester si un minimum ou un maximum est près de ce point central et si c'est le cas dans toutes les directions, on estime la position où on aura une dérivée seconde nulle de Ω à l'aide d'interpolations paraboliques.

Pour illustrer le tout, prenons un exemple où on a deux champs de Weiss possédant les valeurs x et y . Autour de chaque point (x_{test}, y_{test}) , on prend la valeur suivante et précédente en x pour savoir si dans cette direction on a un maximum ($\Omega(x_{test}, y_{test})$ est plus grand que les deux points voisins en x) ou un minimum ($\Omega(x_{test}, y_{test})$ est plus petit que les deux points voisins en x) et on fait de même en y . Si on détecte la présence d'un extremum dans les deux directions, c'est signe qu'on devrait avoir une solution autour du point (x_{test}, y_{test}) et avec les cinq points sondés ((x_{test}, y_{test}) et ses voisins en x et y), on fait régresser l'équation $\Omega = a_x(x - k_x)^2 + b_y(y - k_y)^2 + c$ où (k_x, k_y) nous donnera la position selon les valeurs des champs où on devrait obtenir une solution en VCA.

2.7 Variation de tous les paramètres de spin et de charge

Généralement, autant en VCA qu'en CDMFT, on cherche à utiliser un petit nombre de paramètres variationnels (champs de Weiss, termes de sauts et énergies des sites de bains) pour réduire les temps de calcul. On choisit ces paramètres de façon à représenter le plus fidèlement et efficacement possible les ordres étudiés. Cependant, il est très facile de faire un mauvais choix de paramètres (en particulier lorsque l'on est moins expérimenté avec la VCA ou la CDMFT). Dans cette situation, il se peut que les solutions obtenues soient altérées et qu'on observe, par exemple, une solution à un endroit où elle ne devrait pas exister, ce qui pourrait causer des erreurs d'interprétation des résultats lors de l'analyse des données.

Dans le cas où on désire s'assurer de ne pas avoir ce genre de problèmes, on peut laisser tous les paramètres possibles varier de manière indépendante pour permettre toutes les possibilités de densité de spin et de charge sur les sites des amas. Ce faisant, les ordres de spin et de charge qui correspondent le mieux aux amas apparaîtront d'eux-mêmes. Il est évident que cela alourdira le calcul, mais il sera généralement possible de réduire le nombre de paramètres variationnels après avoir exécuté et analysé quelques essais (pour différents potentiels chimiques et paramètres de départs par exemple). En effet, si par exemple, on remarque que des paramètres sont toujours égaux ou qu'ils varient avec un facteur constant, on pourra ne faire varier qu'un seul paramètre pour obtenir le même effet. De plus, si des paramètres sont toujours nuls ou constants, on pourra les exclure des paramètres variationnels et n'utiliser que leur valeur constante.

Concernant le choix des paramètres de départ, on préférera prendre des valeurs aléatoires. Ce faisant, la VCA et la CDMFT pourront converger vers des solutions possibles dont certaines seraient difficiles à prévoir (surtout en ayant un grand nombre de paramètres). Il se peut que certains ensembles de valeurs aléatoires soient trop distants d'une solution et ne permettent pas à la VCA ou à la CDMFT de converger. Pour cette raison et pour pouvoir idéalement converger sur toutes les solutions possibles, il faut effectuer le calcul un bon nombre de fois avec différents ensembles de valeurs aléatoires.

Lorsqu'on aura effectué ces calculs avec plusieurs ensembles de valeurs aléatoires et qu'on aura réduit le nombre de paramètres variationnels, on pourra par la suite effectuer des balayages habituels en fonction du potentiel chimique avec ces nouveaux paramètres.

Chapitre 3

Résultats

Ce chapitre rapportera les principaux résultats obtenus. Il contiendra aussi toute l'information qui s'y rattache tels que les modèles utilisés qui servent de base aux simulations, les champs de Weiss employés et l'analyse qui en découle. Notons qu'en annexe, on retrouvera les premiers résultats obtenus. Ces résultats sont moins développés que les résultats présentés dans cette section, mais ont tout de même été essentiels en permettant de faire des observations importantes, ce qui a permis de perfectionner les résultats principaux.

Tous ces résultats ont été obtenus à l'aide du programme QCM (Quantum Cluster Methods) élaboré par le professeur David Sénéchal et son équipe de recherche à l'Université de Sherbrooke. Ce programme permet en particulier d'effectuer des calculs de VCA et de CDMFT sur des matériaux qui peuvent être décrits par le modèle de Hubbard et par les méthodes d'amas telles que présentées dans le chapitre portant sur la théorie. De plus, la grande majorité des résultats ont été obtenus en effectuant les calculs sur le super-ordinateur Mammouth Parallèle 2 de l'Université de Sherbrooke qui fait partie de Calcul Canada. Sans ce super-ordinateur, il aurait été difficile d'obtenir la quantité et la qualité des résultats qui seront présentés ici.

3.1 Résultats de VCA avec amas rectangulaires

Dans cette section, nous allons effectuer des calculs de VCA en utilisant des amas possédant la bonne périodicité pour permettre la présence d'un ordre de rayure et l'antiferromagnétisme. Les calculs se feront pour le modèle de Hubbard à une bande en utilisant les paramètres correspondant à l'YBCO (présenté à la section 1.1.2). Nous allons utiliser la méthode de faire varier tous les champs de Weiss de spin et charge possibles dans le but de permettre à la VCA de converger vers des solutions qui apparaîtront naturellement pour la situation qu'on impose avec les amas et les paramètres utilisés. Ainsi, si l'ordre de rayure apparaît de lui-même dans le monde réel, alors il devrait

tout autant apparaître avec cette méthode de calcul et si c'est le cas, ce sera une preuve dénudée d'ambiguïté que l'ordre de rayure existe. De plus, nous inclurons aussi le champ de Weiss supraconducteur que l'on fera varier simultanément avec les autres champs de Weiss, ce qui nous permettra d'observer l'effet des solutions trouvées sur la supraconductivité dans le matériau.

Comme le dit si bien le proverbe «Rome ne s'est pas faite en un jour». Ce fut particulièrement le cas pour ce projet audacieux de calcul qui fut le fruit de longues réflexions et d'un long cheminement dont celui-ci est présenté en partie en annexe (aux sections A, B et C).

3.1.1 Modèle à deux amas

Pour que l'antiferromagnétisme et l'ordre de rayure puissent être testés sur le même modèle, il faut que les sites du super-amas puissent reproduire les deux ordres avec la même périodicité. Pour ce faire, on peut prendre deux amas de 2 sites par 4 sites et les disposer côte-à-côte dans un super-amas comme présenté à la figure 3.1.

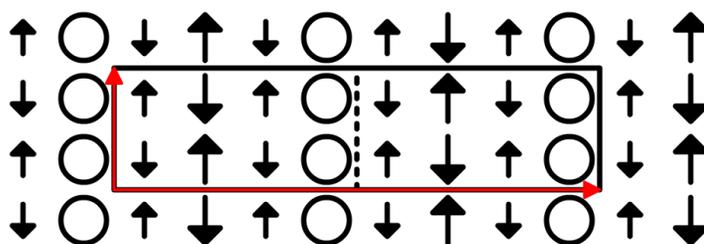


FIGURE 3.1 Schéma du modèle à deux amas compatible avec l'ordre de rayure (tel que présenté sur les sites du modèle) et l'antiferromagnétisme. Le super-amas est entouré d'un trait plein et se répète avec les vecteurs de base représentés par les flèches rouges.

3.1.2 Champs de Weiss utilisés

Comme on veut maintenant tout laisser varier, nous aurons alors un grand nombre de champs de Weiss. La seule contrainte que nous imposerons est d'avoir un comportement antiferromagnétique à la verticale. Ça impliquera donc que les sites de la deuxième rangée des amas auront un spin inversé par rapport aux sites de la première rangée. De plus, ça signifie que chaque colonne aura une densité de charge propre à la colonne et égale sur les deux sites de la colonne. Nous aurons donc un champ de spin et de charge par colonne du modèle pour un total de 16 champs de Weiss à varier.

Pour définir les champs de Weiss, on pourrait, par exemple, en définir un propre à chaque colonne qui fera varier seulement la charge ou le spin des colonnes individuellement, mais nous allons plutôt utiliser des fonctions sinusoïdales pour décrire l'amplitude des densités de spin et de charge des sites à l'horizontale (un peu à la manière d'une série de Fourier). Cela permettra de recréer tous les ordres de spin et de charge possibles et comme nous encodons les champs de Weiss dans le programme QCM à l'aide de fonctions sinusoïdales, ça s'avèrera être plus beaucoup plus pratique de cette manière. Nos champs de Weiss auront 4 fréquences spatiales différentes ($\pi/4, \pi/2, 3\pi/4, \pi$) qui respectent la périodicité du super-amas et pour chaque fréquence, nous aurons deux champs de Weiss déphasés de $\pi/2$. Une exception réside pour la fréquence π (qui correspondra à l'antiferromagnétisme pour le champ de Weiss de spin), car en la déphasant de $\pi/2$ nous aurions des densités nulles sur les sites. À cela on ajoute des champs de Weiss constants sur les sites, ce qui produit les champs de Weiss illustrés à la figure 3.2. Nous avons choisi les déphasages des champs de Weiss de sorte à ce qu'ils soient symétriques ou antisymétriques à l'horizontale sur les amas. Cela aura comme effet que si nous avons affaire à une solution symétrique (ou antisymétrique) sur les amas, seuls les champs de Weiss symétriques (ou antisymétriques) seront utilisés. Alors, on utilisera moins de champs de Weiss pour traiter la solution en question.

3.1.3 Solutions obtenues

En laissant tous les champs de Weiss varier, on obtient trois types de solutions de spin : une solution antiferromagnétique utilisant les champs de Weiss AF et B, une solution d'ordre de rayure utilisant les champs de Weiss A et C et finalement une solution utilisant les champs de Weiss F et B2. Ces trois solutions s'obtiennent toutes dans le secteur à 8 électrons par amas. Nous n'observons jamais de mélange de ces trois types solutions, seulement un type particulier de solution à la fois (où les champs de Weiss des autres solutions sont nuls). Concernant les champs de Weiss de charge, seuls les champs cdwF (la charge globale) et cdwB2 sont utilisés. On remarque que les champs de Weiss viennent en paires. En fait, à chaque fois, on a un champ de Weiss principal (AF, C, F, cdwF) qui définit le comportement général des spins ou des charges et ces champs sont ajustés par leur champ de Weiss associé (B, A, B2, cdwB2) qui trouve le bon rapport entre les densités de spin ou de charges entre les colonnes intérieures et extérieures des amas. Pour faire de plus amples calculs sur chacun de ces types de solutions, on pourra n'utiliser que 4 paramètres variationnels à la fois (les deux champs de Weiss de spin propres à la solution et les deux champs de Weiss de charge). Pour traiter la supraconductivité, on pourra ajouter le champ de Weiss supraconducteur comme cinquième paramètre variationnel, ce qui demande, au final, un temps de calcul tout à fait raisonnable.

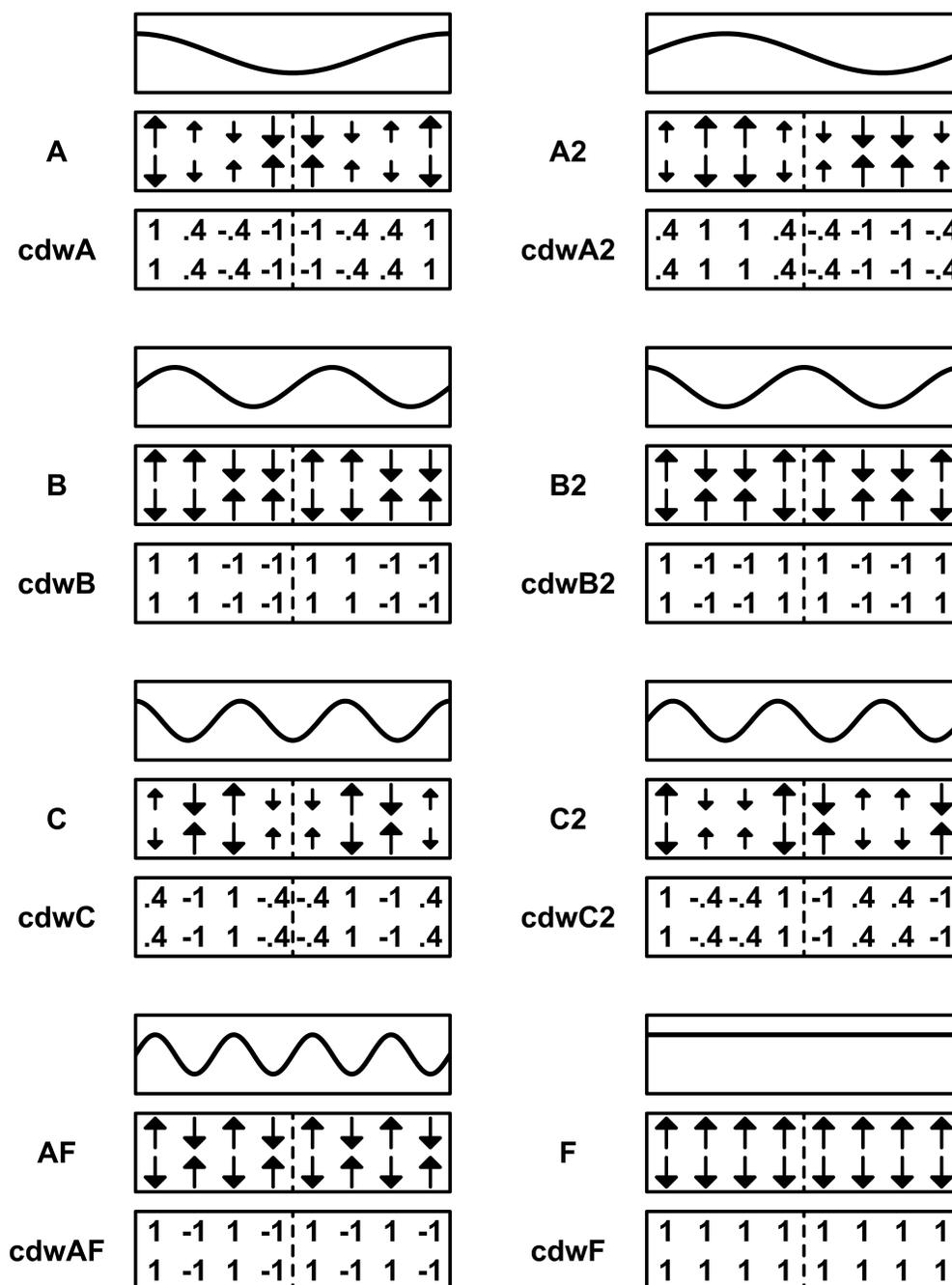


FIGURE 3.2 Schémas des champs de Weiss de spin et de charge utilisés en VCA. Pour chaque paire de champs de Weiss, la fonction sinusoïdale correspondant aux champs de Weiss est tracée suivie de la représentation du champ de Weiss de spin et les valeurs du champ de Weiss de charge dont les valeurs ont été multipliées par un facteur pour que les valeurs extrêmes atteignent 1 et -1.

La solution de l'ordre de rayure que l'on trouve est centrée sur les liens (ce qui signifie que la colonne de trous est centrée sur deux colonnes de sites). On se serait plutôt attendu à ce que la solution trouvée soit centrée sur les sites (comme à la figure 3) comme ce l'est généralement représenté dans la littérature. Il est fort probable ici que ce soit dû à la forme des amas : il semble que la VCA tende à préférer les solutions qui ont un comportement symétrique sur les amas en terme de densité de spin et de charge (ce qui est d'ailleurs le cas pour les deux autres ordres trouvés). Cela semble logique, nous définissons le côté gauche et droit des amas de manière identique, alors les densités de spin et de charge des solutions trouvées devraient être les mêmes du côté gauche que du côté droit des amas (à un signe près pour les spins). La seule exception qui pourrait survenir pour avoir une solution non-symétrique est d'avoir un ordre qui nécessite absolument de briser cette symétrie pour exister, ce qui n'est pas le cas dans la situation actuelle.

Concernant la solution utilisant les champs de Weiss F et B2, cette solution est principalement ferromagnétique horizontalement et antiferromagnétique verticalement. D'ailleurs, cette combinaison de champs de Weiss pourrait permettre l'ordre de rayure d'une périodicité de quatre sites, mais ce n'est pas une solution observée. En terme de dopage, la solution obtenue par ces champs de Weiss commence autour d'un dopage de 0.2 sans la présence de supraconductivité. Lorsqu'on ajoute la supraconductivité, cette dernière rentre en compétition avec cette solution et la fait disparaître. Comme cette solution n'est pas présente à bas dopage en présence du champ de Weiss supraconducteur nous ne nous pencherons pas davantage sur celle-ci, car elle n'aura probablement pas d'impact sur la solution de l'ordre de rayure et l'antiferromagnétisme.

3.1.4 Résultats des balayages

En effectuant des balayages sur les solutions de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme, on obtient le graphique des paramètres d'ordre de la figure 3.3. Nous avons tracé à la fois les solutions obtenues avec et sans coexistence avec la supraconductivité. Les paramètres d'ordre tracés correspondent à ceux de l'ordre présent sur les amas et non du champ de Weiss principal. Les paramètres d'ordre de chaque solution sont le résultat de la norme (la racine carrée de la sommes des carrés) des deux paramètres d'ordre des champs de Weiss composant la solution (car les champs de Weiss sont orthogonaux entre eux).

Pour l'antiferromagnétisme et la supraconductivité, on obtient des résultats conformes à nos attentes, c'est à dire un fort antiferromagnétisme à demi-remplissage suivi d'un dôme supraconducteur lorsqu'on augmente le dopage. Au niveau de l'ordre de rayure, on observe une solution large en dopage qui possède un maximum autour d'un dopage de 0.05. On remarque sur le graphique que la courbe de la solution de l'ordre de

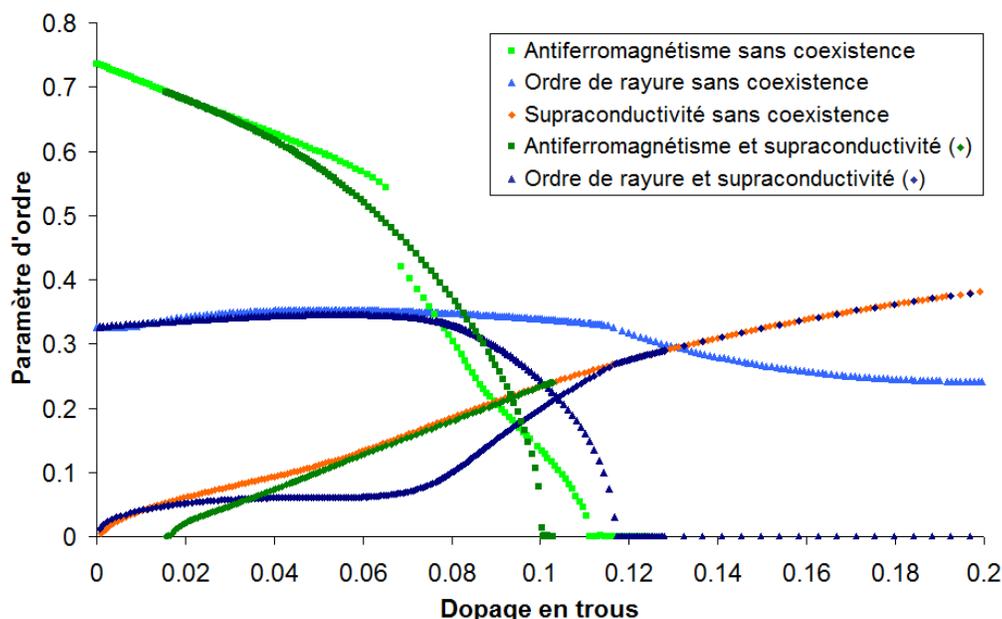


FIGURE 3.3 Graphique des paramètres d'ordre des solutions trouvées en VCA avec et sans coexistence. Toutes les solutions se situent dans le secteur à 8 électrons par amas et ont été effectuées avec le modèle à deux amas pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

rayure ne retombe pas à zéro et d'ailleurs, même en diminuant beaucoup le potentiel chimique (ce qui augmente le dopage en trous), nous n'y arrivons pas. De plus, on observe une étrange discontinuité de la dérivée première au dopage de 0.115 à laquelle nous n'arrivons pas à justifier sa présence. Lorsqu'on ajoute la supraconductivité aux solutions d'ordre de rayure, la solution change d'allure et tombe à zéro pour un dopage de 0.117. On serait tentés d'associer la fin de la solution au changement de pente précédemment observé pour expliquer celui-ci. Mais après vérification, il n'y a pas de lien à faire entre ces deux événements, car en changeant les paramètres de calcul (tel que les paramètres du modèle), on peut distancer facilement les deux valeurs en dopage. La supraconductivité rentre visiblement en compétition avec l'ordre de rayure, car, d'une part, elle l'empêche d'exister à fort dopage et aussi, lorsque l'ordre de rayure est présent, il fait généralement diminuer le paramètre d'ordre supraconducteur. Cependant, cette compétition s'arrête à bas dopage où on observe un léger accroissement des paramètres d'ordre de l'ordre de rayure et de la supraconductivité. Mais, rappelons qu'à bas dopage, l'antiferromagnétisme devrait dominer fortement, ce qui nous permet d'ignorer cette entraide et de considérer que l'ordre de rayure et la supraconductivité devraient en tout temps entrer en compétition.

Comme les champs de Weiss utilisés permettent d'ajuster les spins et les charges des colonnes intérieures et extérieures de l'amas, il serait intéressant d'observer visuellement, ce qui se produit à ce niveau sur les amas. Nous avons donc tracé plusieurs profils de densité de spin et de charge pour plusieurs points des solutions antiferromagnétiques et de l'ordre de rayure toutes deux sans coexistence avec la supraconductivité (voir figure 3.4). Pour l'antiferromagnétisme, l'amplitude des spins semble être égale partout sur les amas, peu importe le dopage. Cependant, pour la densité de charge, les colonnes extérieures des amas voient une plus grande concentration de trous apparaître. Ce semble être dû à un effet de bord provoqué par les amas étant donné que la prise en compte des amas voisins est traitée par un calcul perturbatif. Concernant l'ordre de rayure, le comportement des spins et des charges est celui auquel on s'attend, les colonnes de trous (les colonnes extérieures) possèdent un spin plus faible et une plus grande densité de trous. Par contre, lorsqu'on augmente beaucoup le dopage, l'amplitude des spins devient plus forte sur les colonnes extérieures. Possiblement qu'il s'agit ici encore une fois d'un effet de bord, mais ça rend visiblement la solution plus fragile et devient facilement anéantissable par l'ajout de la supraconductivité.

En traçant les énergies internes des solutions, on obtient la figure 3.5, ce qui nous permet de sélectionner les solutions dans le paramètre d'ordre pour produire le graphique 3.6. Sur ce dernier graphique, on a aussi ajouté le paramètre d'ordre de charge des colonnes de trous pour chaque solution pour observer son évolution en dopage. Ceci nous permet de voir que les charges sont relativement égales sur les amas pour l'antiferromagnétisme (à l'exception de la fin de celle-ci où on observe des effets de bords tel que discuté précédemment) et que les colonnes de trous sont chargées en trous pour l'ordre de rayure, ce qui est conforme à nos attentes pour les deux solutions. Cependant, cela ne concorde pas exactement avec les résultats expérimentaux (voir figure 2) où on avait littéralement deux solutions distinctes, une pour la densité de spin de l'ordre de rayure et une pour la densité de charge qui se situe plus loin en dopage. Il n'est pas impossible qu'en continuant les calculs en allant plus loin en dopage et en utilisant les solutions qu'on a négligées (avec les champs de Weiss F et $B2$), qu'on puisse retrouver cette solution manquante de charge, mais à priori, ce semble peu probable.

3.1.5 Conclusion

Ces résultats en VCA nous ont montré que l'ordre de rayure est une solution viable sur le super-amas en plus d'être la plus favorable pour une large étendue en dopage. Nous avons aussi montré que la supraconductivité et l'ordre de rayure entrent en compétition. De plus, l'ordre de rayure observé est centré sur les liens, ce qui est possiblement le résultat de la forme des amas utilisés.

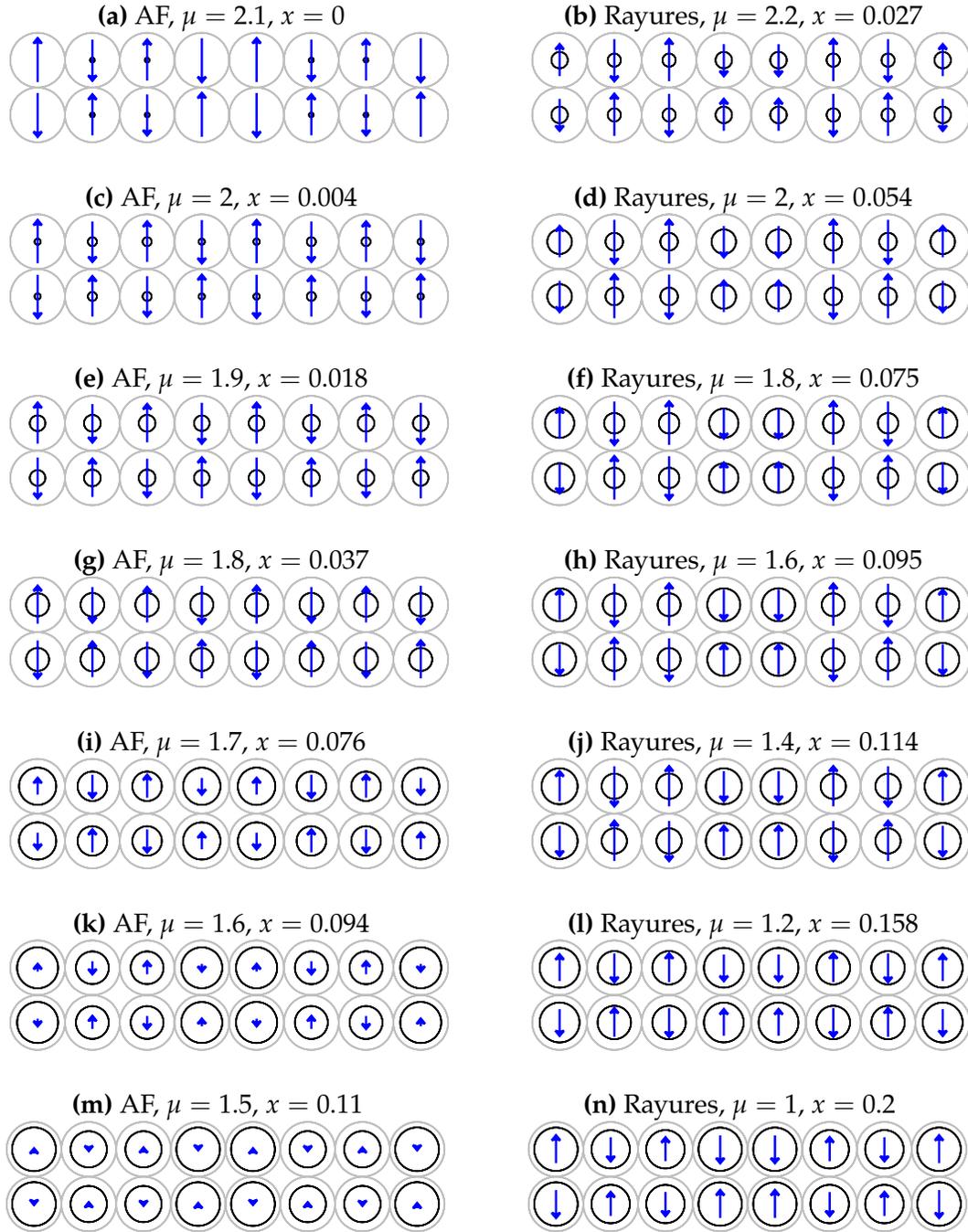


FIGURE 3.4 Profils de densité de spin et de charge pour les deux types de solutions trouvées en VCA sans coexistence avec la supraconductivité. Ces solutions ont été trouvées avec le modèle à deux amas pour les paramètres correspondant à l'YBCO pour le modèle de Hubbard. Les spins sont représentés par les flèches bleues et les cercles noirs représentent la densité de trous sur chaque site. La variable x correspond au dopage en trous.

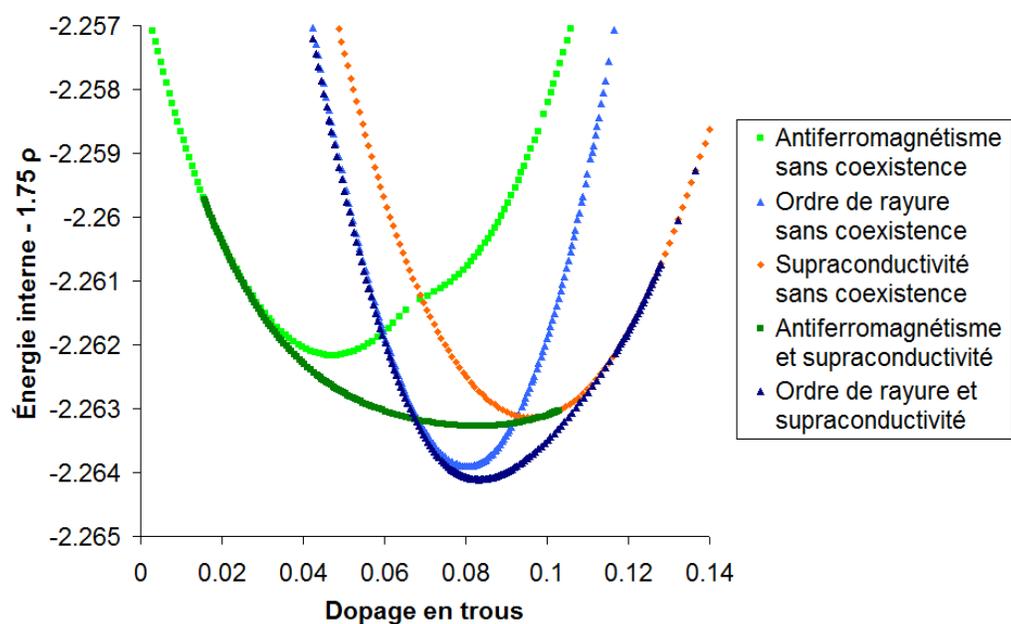


FIGURE 3.5 Graphique des énergies internes des solutions trouvées en VCA avec et sans coexistence. Les solutions ont été obtenues en utilisant le modèle à deux amas de la figure 3.1 avec les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Les courbes sont redressées avec un terme dépendant de la densité électronique, ce qui facilite la comparaison visuelle entre les solutions

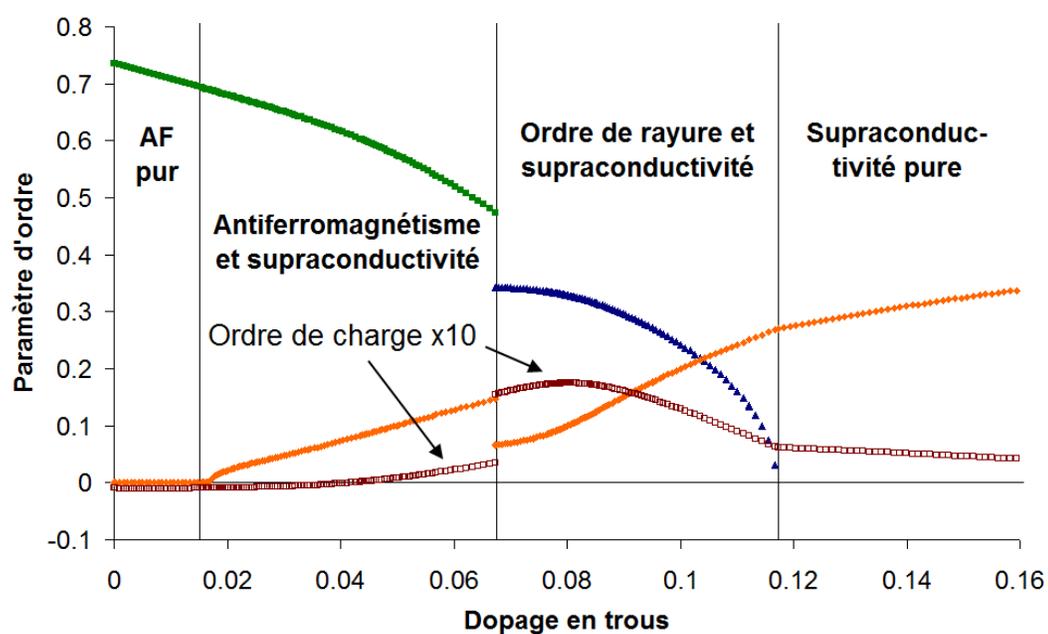


FIGURE 3.6 Graphique des paramètres pour les solutions les plus favorables en VCA sur le modèle à deux amas pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard. Les carrés rouges représentent le paramètre d'ordre de la densité de charge du champ de Weiss $cdwB2$ (plus ce paramètre d'ordre est fort, plus les colonnes extérieures des amas possèdent des trous).

3.2 Résultats de CDMFT

Maintenant, nous allons utiliser la CDMFT, une méthode différente, pour vérifier si on obtient les mêmes résultats qu'en VCA et idéalement les confirmer. Nous utiliserons toujours les mêmes paramètres pour le modèle de Hubbard qui correspondent à l'YBCO.

Modèle à amas de 8 sites

Nous allons reprendre le modèle de deux amas de 2 sites par 4 sites que l'on s'était défini précédemment en VCA (figure 3.1) où on ajoutera des sites de bain aux amas. Nous n'ajouterons que quatre sites de bain par amas, car l'ajout de chaque site augmente exponentiellement le temps de calcul, ce que nous voulons limiter à tout prix. Pour optimiser l'effet de ces sites de bain sur l'amas, chaque site de l'amas sera relié à un site de bain et les sites de bains seront reliés entre eux tel que présenté à la figure 3.7.

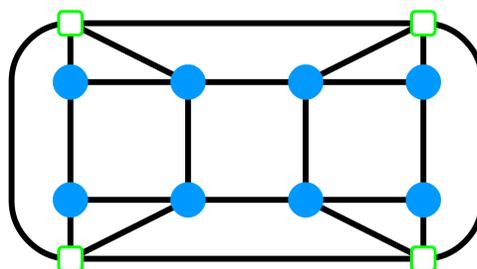


FIGURE 3.7 Amas de 2 sites par 4 sites auquel on a ajouté des sites de bain à chaque coin pour effectuer des calculs en CDMFT.

Paramètres variationnels utilisés

Nous allons utiliser la méthode de faire varier tous les paramètres variationnels possibles pour permettre aux solutions d'apparaître sous la forme qui leur sont la plus naturelle. Notre seule contrainte, comme c'était le cas précédemment en VCA, sera d'imposer un antiferromagnétisme vertical. Dans le cas de la CDMFT, ça implique que les liens et les énergies de spin up vont être égaux aux liens et énergies de spin down en inversant verticalement l'amas (par exemple, l'énergie du bain en haut à gauche pour le spin down va être égale à celle du bain en bas à gauche pour le spin up). Au total, nous aurons 32 paramètres variationnels.

Solutions obtenues

En observant les profils de densité des sites du modèle, on trouve trois types de solutions : l'antiferromagnétisme, une solution d'ordre de rayure et une solution mixte où on a l'antiferromagnétisme sur un amas et l'ordre de rayure sur l'autre. Ces trois types de solutions sont illustrés à la figure 3.8. La solution mixte semble hautement improbable, car elle implique que deux colonnes voisines auront des spins forts et dans la même direction. On aurait pu (et aurait dû) régler ce problème en ajoutant des liens entre les paramètres de sorte d'imposer une symétrie gauche-droite entre les amas (égaliser les énergies et liens de spin up à gauche à ceux de spin down à droite). Ça aurait empêché ce type de solution d'apparaître et le calcul aurait convergé soit vers une solution connue ou nouvelle de l'antiferromagnétisme ou de l'ordre de rayure.

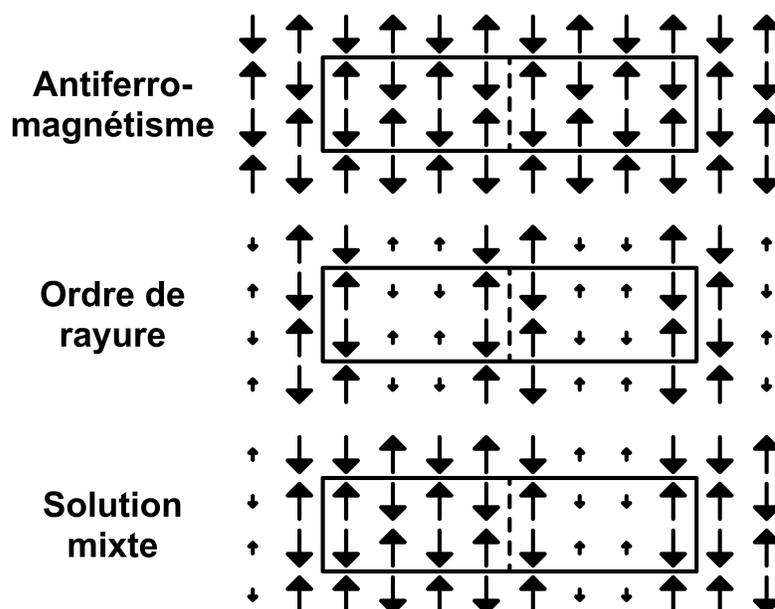


FIGURE 3.8 Profils de densité de spin des solutions trouvées en CDMFT avec le modèle à deux amas de 2 sites par 4 sites pour les paramètres correspondants à l'YBCO pour le modèle de Hubbard.

La solution de l'ordre de rayure est centrée une fois de plus sur les liens, ce qui fait qu'on a deux colonnes de trous avec des spins faibles, mais non nuls. Aussi les colonnes de trous se situent toujours sur les deux colonnes intérieures de l'amas et jamais sur les colonnes extérieures. Concernant la densité de charge des colonnes de trous (les colonnes intérieures) est largement plus grande que celles des colonnes extérieures. Les colonnes intérieures possèderaient donc plus d'électrons, ce qui est complètement contraire à ce qui est attendu. Notons aussi que l'antiferromagnétisme n'est pas complètement uniforme : les densités de spin et de charge des colonnes intérieures et extérieures ne

sont pas égales. Ça montre qu'il y a des effets de bords qui affectent les résultats, ce qui pourrait expliquer pourquoi par exemple les colonnes de trous pour l'ordre de rayure n'en sont pas vraiment dans le cas présent.

Si on désire calculer le paramètre d'ordre de ces solutions pour en faire un diagramme de phase, nous devons définir des champs de Weiss correspondant aux solutions et calculer leur paramètre d'ordre. Cependant, nous nous sommes rendus compte que le rapport entre les densités de spin des colonnes extérieures et intérieures change en fonction du dopage, et ce, pour toutes les solutions. Ça a comme conséquence qu'on ne peut pas utiliser un seul champ de Weiss pour effectuer les mesures des paramètres d'ordre d'un type de solution. Pour ne pas avoir à définir un champ de Weiss particulier pour chaque solution trouvée, nous utilisons plutôt deux champs de Weiss pour chaque type de solution afin de permettre toutes les variations possibles sur les colonnes intérieures et extérieures. En se basant sur les champs de Weiss introduit à la figure 3.2, on utilisera les champs de Weiss AF et B2 pour l'antiferromagnétisme, C2 et A2 pour l'ordre de rayure et de ces quatre champs pour la solution mixte. Comme ces champs sont tous orthogonaux, la norme des paramètres d'ordre de ces champs de Weiss sera égale au paramètre d'ordre du champ de Weiss spécifique à la solution.

Résultats des balayages

En effectuant des balayages en fonction du potentiel chimique et en calculant les paramètres d'ordre des solutions, on obtient la figure 3.9 où on y montre les trois types de solutions. On remarque au premier coup d'œil que l'ordre de rayure possède ici un comportement différent de ce qu'on a obtenu avec les tests effectués en VCA, on obtient un dôme centré autour d'un dopage de 0.12 et non une solution qui s'étire loin en dopage. Ce dopage de 0.12 se trouve très près du dopage $1/8$ en trous (ou $7/8$ en densité électronique) où on devrait trouver en théorie l'ordre de rayure selon la littérature. C'est donc un résultat passablement rassurant. On trouve cependant des solutions parasites, dont certaines qui semblent dédoubler le dôme principal de l'ordre de rayure. Ce dédoublement est possiblement causé par des seuils trop grands sur les paramètres pour le nombre de paramètres qu'on a pour déterminer à quel moment on arrête les itérations de la CDMFT. Autrement dit, c'est comme si on avait arrêté le programme trop hâtivement avant que la solution ne converge de manière raisonnable. Mais cette hypothèse est difficile à vérifier à moins de refaire tous les calculs.

Concernant l'antiferromagnétisme, plusieurs solutions sont aussi présentes. On a une solution partant du demi-remplissage qui disparaît rapidement en diminuant très peu, mais les autres solutions ne concordent pas du tout à ce qu'on s'attend de l'antiferromagnétisme, ce qui pose un problème si on veut comparer les solutions antiferromagnétiques à l'ordre de rayure. Aussi, on remarque la présence d'un large

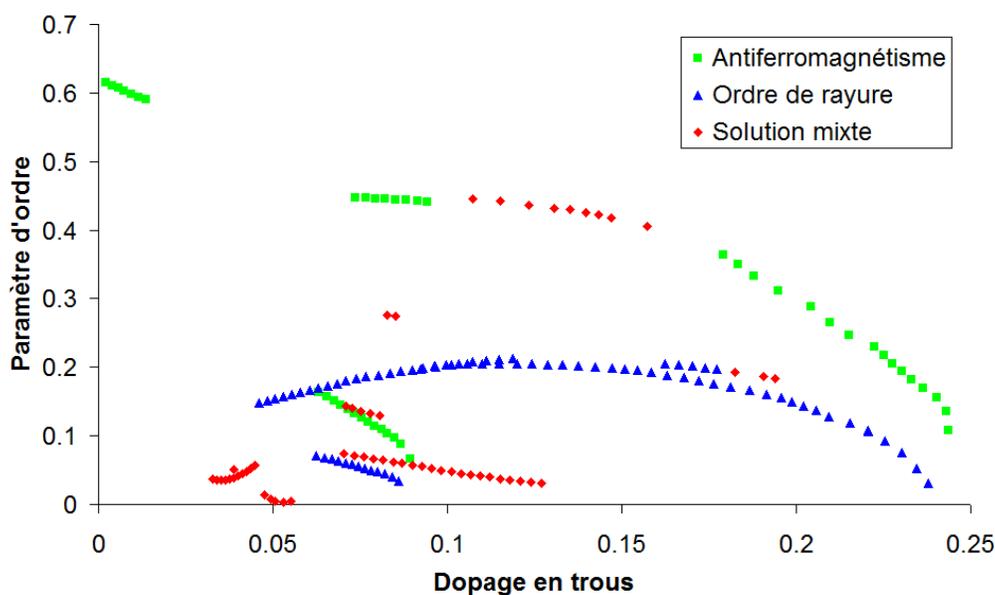


FIGURE 3.9 Graphique du paramètre d'ordre des solutions obtenues en CDMFT avec le modèle à deux amas de 2 sites par 4 sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

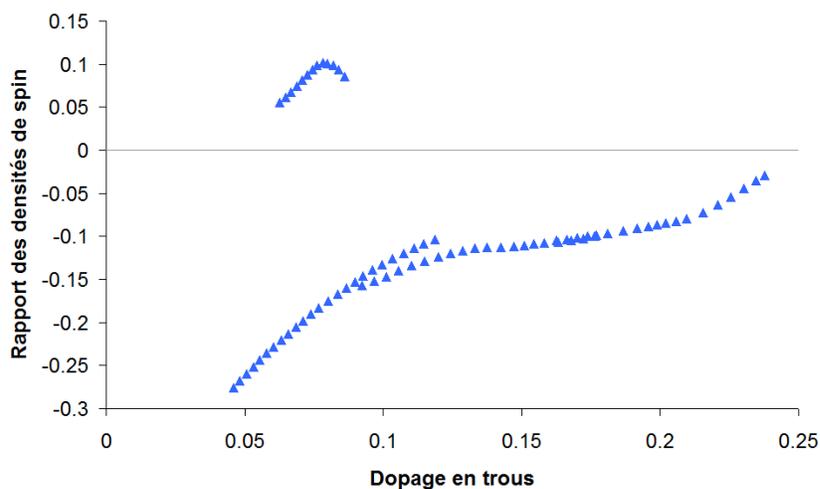


FIGURE 3.10 Rapport des amplitudes des densités de spin entre les colonnes intérieures et les colonnes extérieures des amas pour l'ordre de rayure. Ces résultats proviennent des solutions effectuées en CDMFT avec le modèle à deux amas de 2 sites par 4 sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard. Un rapport négatif signifie que le signe des spins s'inversent en passant des colonnes intérieures aux colonnes extérieures.

espace à bas dopage entre la fin de la première solution antiferromagnétique à 0.013 et le début du dôme de l'ordre de rayure à 0.046 (en excluant les solutions mixtes) qui n'aide en rien le sort de l'antiferromagnétisme.

Nous avons mentionné précédemment que, pour toutes les solutions (dont l'ordre de rayure), le rapport entre les densités de spin des colonnes intérieures aux colonnes extérieures changeait en fonction du dopage. Nous l'avons illustré à la figure 3.10 où on voit une grande fluctuation de ce rapport. On remarque aussi que ce rapport tend à s'approcher de 0 à la fin de la solution, ce qui semble d'ailleurs causer sa perte, car si le rapport devenait positif, les spins ne s'inverseraient plus dans les rangées des amas, ce qui causerait une solution fondamentalement différente à l'ordre de rayure. Étrangement, on obtient d'ailleurs ce type de solution où on a un rapport positif autour d'un dopage de 0.07, ce qui signifie que ce segment de solution comporte des spins du même signe pour les sites voisins entre les colonnes intérieures et extérieures des amas. Finalement, ce graphique nous donne une réponse sur notre questionnement antérieur à savoir si les solutions qui semblaient dédoubler le dôme de l'ordre de rayure le font en étant des solutions différentes de celle du dôme ou à cause de problèmes de convergence. On voit que le dôme est en fait constitué de deux solutions séparées, une qui correspond à la montée du dôme et l'autre à la descente. Le petit segment de solution autour du dopage 0.17 se superpose sur la solution descendante du dôme et nous laisse croire que seul ce segment a eu des problèmes de convergence.

Conclusion

Ces résultats en CDMFT nous ont montré qu'on peut obtenir une solution d'ordre de rayure qui forme un dôme autour du dopage $1/8$. Malgré que nous ayons atteint nos objectifs en CDMFT, on délaissera cette méthode en faveur de la VCA, car elle apporte son lot d'inconvénients :

1. L'antiferromagnétisme est mal représenté.
2. Une présence de nombreuses solutions parasites.
3. Le nombre de sites de bain est très faible, ce qui laisse planer un doute sur la qualité des solutions obtenues.
4. Il est difficile de comparer les solutions en CDMFT pour déterminer la solution la plus favorable.
5. Elle est beaucoup plus laborieuse à utiliser que la VCA.

3.3 Balayages en VCA en fonction des paramètres U , t , t' et t''

Dans cette section, nous allons effectuer des balayages en VCA en ayant modifié les paramètres du modèle de Hubbard. En faisant cela, on modifie en quelque sorte le matériau utilisé, ce qui nous permettra d'observer le comportement de l'ordre de rayure pour d'autres matériaux que l'YBCO.

3.3.1 Méthodologie

Nous allons effectuer des balayages en μ pour les solutions antiferromagnétique et de l'ordre de rayure avec coexistence avec la supraconductivité, mais pour plusieurs valeurs de chaque paramètre du modèle de Hubbard par rapport aux paramètres originaux qui correspondent à l'YBCO ($U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$ et $t'' = 0.2$). Ça nous permettra d'observer l'effet individuel de chaque paramètre sur ces solutions. Pour trouver les points de départ des balayages en μ , il suffit d'effectuer des balayages progressifs en fonction du paramètre testé sur les solutions connues.

Une fois les balayages réalisés, on fera des graphiques des paramètres d'ordre, mais on cherchera à obtenir aussi les dopages correspondant aux frontières entre les différents types de solutions pour chaque valeur du paramètre testé. Pour bien faire les choses, nous allons utiliser deux méthodes simples, mais rigoureuses, pour trouver les dopages de ces frontières. La première qui sera utilisée pour la frontière entre l'antiferromagnétisme et l'ordre de rayure utilisera tout d'abord les énergies internes des solutions qui devraient se croiser. À ce croisement, on prendra le point le plus près de chaque côté du croisement et on fera une interpolation linéaire entre ces points pour les deux solutions et le dopage où les deux droites produites se coupent sera la valeur utilisée comme frontière. Pour les frontières entre les solutions avec et sans coexistence, nous prendrons les trois dernières valeurs du paramètre d'ordre du champ de Weiss qui tend à disparaître, ferons une régression quadratique sur ces points et en trouvant les zéros de l'équation quadratique on obtiendra l'estimation du dopage où le paramètre d'ordre du champ de Weiss deviendra nul.

3.3.2 Résultats

Premièrement, nous avons effectué plusieurs balayages pour le paramètre U pour les solutions de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme (voir figure 3.11). Notons que les figures des paramètres d'ordre ne contiennent que les paramètres d'ordre de spin pour ne pas alourdir les figures. Il revêt une certaine importance de tester plusieurs valeurs de U différentes, car ce paramètre est défini de manière plutôt arbitraire dans le modèle de Hubbard pour l'YBCO et il se pourrait fort bien que la valeur de U utilisée ne soit pas la meilleure pour simuler le matériau.

Le graphique des paramètres d'ordre de l'ordre de rayure (figure 3.11a) montre que celui-ci réagit beaucoup en fonction du paramètre U . L'ordre de rayure semble être le plus favorisé autour de $U = 7$ et $U = 8$ et diminue lorsqu'on s'éloigne de ces valeurs. Cet ordre semble ne pas pouvoir exister en dessous de $U = 5$ si on se fie à la chute rapide des paramètres d'ordres pour les valeurs basses de U . À U élevé, il ne semble pas a priori avoir de valeur limite où l'ordre de rayure ne peut exister, l'effet de l'augmentation de U pour ces valeurs ne fait que concentrer graduellement la solution dans le coin inférieur gauche du graphique, près du demi-remplissage. Cependant, les segments de solution qu'on obtient pour l'antiferromagnétisme à de hautes valeurs de U semblent grossièrement conserver leur forme, ce qui nous indique que l'ordre de rayure disparaîtra fort probablement pour une certaine valeur de U dû au fait que l'antiferromagnétisme le supplantera en terme de solution plus favorable. Notons aussi qu'on a eu des difficultés à produire les balayages des solutions antiferromagnétiques, il semble que la discontinuité qui apparaissait sans la coexistence avec la supraconductivité (voir figure 3.3) réapparait pour de hautes valeurs de U et interrompt les balayages.

Nous avons comparé les solutions antiferromagnétiques et de l'ordre de rayure en fonction de leur énergie interne (lorsqu'on avait une solution dans les deux cas pour la même valeur de U). Cela nous a permis de trouver les différentes frontières entre les solutions en fonction de la valeur de U , ce qui nous donne la figure 3.12. Nous n'avons pas pu comparer les solutions au-delà de $U = 12$ car les solutions antiferromagnétiques ne vont pas assez loin en dopage et on n'observe pas de croisement avec l'ordre de rayure. Ce graphique nous montre que la solution de l'ordre de rayure semble se terminer autour de $U = 5.2$. Il faut comprendre ici qu'on se trouve à être très près de la transition de Mott qui est une transition métal-isolant. On obtient cette transition en modifiant U , car lorsque la répulsion électron-électron est forte, il est difficile d'avoir des sites possédant deux électrons, ce qui a comme conséquence de favoriser grandement l'occupation d'un électron par site sur tous les sites (au demi-remplissage en particulier). Ce faisant, le matériau devient isolant, car les électrons ne peuvent plus se déplacer étant donné que ça nécessitera d'avoir des sites possédant deux électrons. En diminuant U , on arrive à un point (à la transition de Mott) où U ne permettra plus aux électrons d'être localisés sur

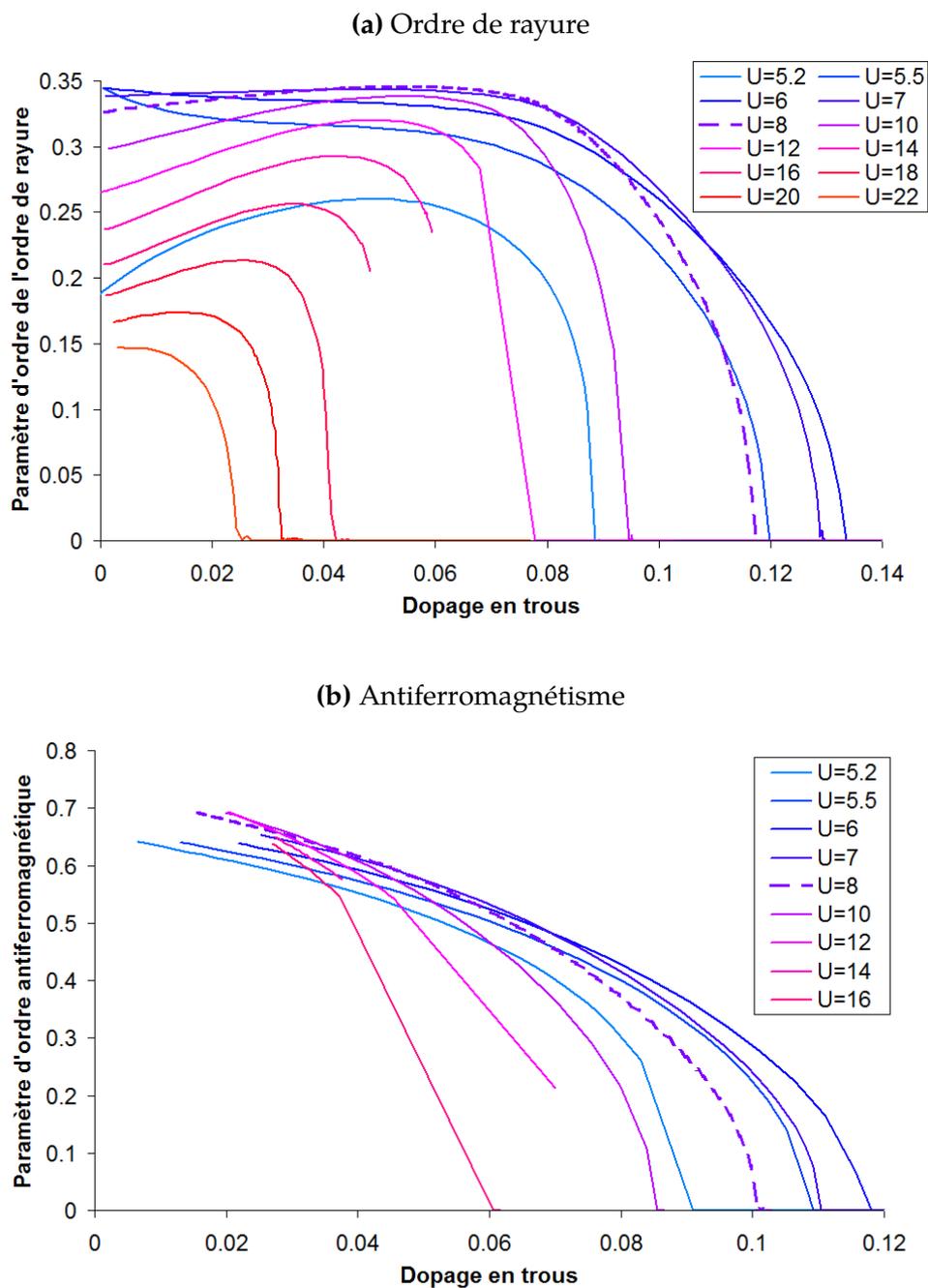


FIGURE 3.11 Graphique des paramètres d'ordre de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme pour différentes valeurs de U qui correspond à l'énergie de répulsion aux électrons de spin différent sur un même site. Ces résultats ont été effectués en VCA à l'aide du modèle à deux amas. Les courbes correspondantes au paramètre utilisé pour l'YBCO ($U = 8$) sont mises en évidence et les autres paramètres demeurent constants ($t = 1, t' = -0.3, t'' = 0.2$).

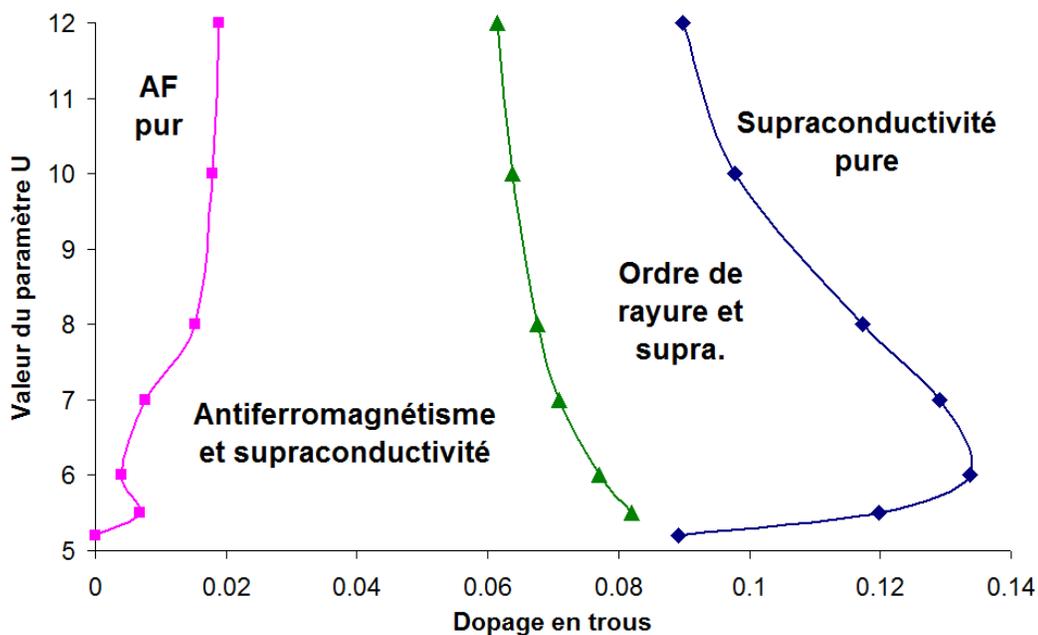


FIGURE 3.12 Graphique des frontières en dopage entre les différents types de solutions en fonction de la valeur de U . Ces résultats sont issus des balayages effectués à la figure 3.11. Les points pour les différentes frontières sont reliés entre eux uniquement pour mieux visualiser le résultat.

les sites et les électrons pourront désormais se déplacer dans le réseau pour former un métal. Il va de soi que la transition de Mott provoquera plusieurs bouleversements sur le réseau et un de ceux-là sera de rendre défavorable l'ordre de rayure. Cependant, ça ne signifie pas que l'ordre de rayure ne peut plus exister du côté métallique de la transition de Mott. En fait, le balayage de la solution trouvée de l'ordre de rayure à $U = 5.2$, se situe du côté métallique et on le constate à l'aide du changement rapide de comportement des paramètres d'ordres près du demi-remplissage, dont le plus important est d'avoir un paramètre d'ordre supraconducteur fort lorsqu'il devrait être nul (voir figure 3.13). Finalement, on remarque que la frontière entre l'antiferromagnétisme avec et sans coexistence est légèrement saccadée à $U = 5.5$. Il y a de fortes chances que ce soit dû à de grandes incertitudes sur les points dans cette région.

Maintenant, passons au paramètre t' qui représente le terme de saut entre les plus proches voisins à la diagonale. Ce paramètre est important à tester, car il induit de la frustration entre les sites, ce qui devrait nuire à l'antiferromagnétisme et pourrait rendre l'ordre de rayure plus favorable pour une plus grande plage de dopages. Aussi ce paramètre devrait avoir un grand impact sur l'ordre de rayure [24].

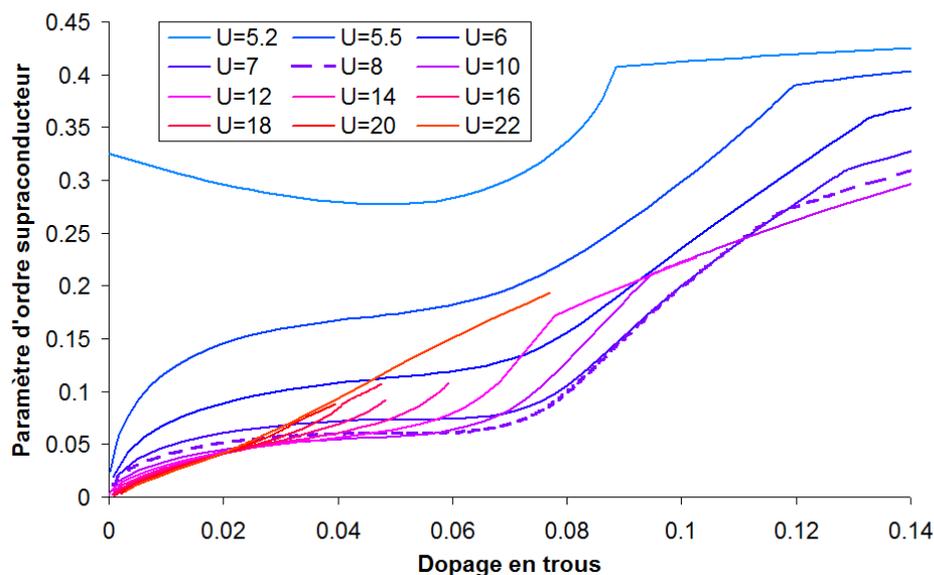


FIGURE 3.13 Graphique du paramètre d'ordre supraconducteur des solutions d'ordre de rayure pour différentes valeurs de U qui correspond à l'énergie de répulsion aux électrons de spin différent sur un même site. Ces résultats ont été effectués en VCA à l'aide du modèle à deux amas. Les courbes correspondantes au paramètre utilisé pour l'YBCO ($U = 8$) sont mises en évidence et les autres paramètres demeurent constants ($t = 1$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$).

Les paramètres d'ordre obtenus de l'ordre de rayure en modifiant t' sont montrés à la figure 3.14a. On observe clairement que lorsque t' est nul, l'ordre de rayure devient plus intense et que plus t' devient grand (positivement ou négativement), l'ordre de rayure a plus de difficulté à s'implanter. On observe d'ailleurs sensiblement la même chose pour l'antiferromagnétisme à la figure 3.14b quoique la descente pour les t' positifs se fait de manière moins prononcée. Donc, t' a un impact négatif autant sur l'antiferromagnétisme que sur l'ordre de rayure, ce qui est logique, car la frustration engendrée par t' va aussi affecter le comportement antiferromagnétique présent dans cet ordre.

Lorsqu'on trouve les différentes frontières en dopage pour les solutions, on obtient la figure 3.15. Nous n'avons pas pu compléter la partie du graphique pour les t' positifs, car les solutions antiferromagnétiques étaient incomplètes, probablement à cause de discontinuités présentes dans ces solutions. Par contre, ce qu'on peut en tirer comme information sur ce graphique est que plus on s'approche de $t' = 0$, plus la gamme de dopage où les solutions sont présentes est grande. Aussi, par extrapolation pour de fortes valeurs négatives de t' , la solution d'ordre de rayure (en coexistence avec la supraconductivité) semble vouée à disparaître. Ces deux observations s'expliquent par

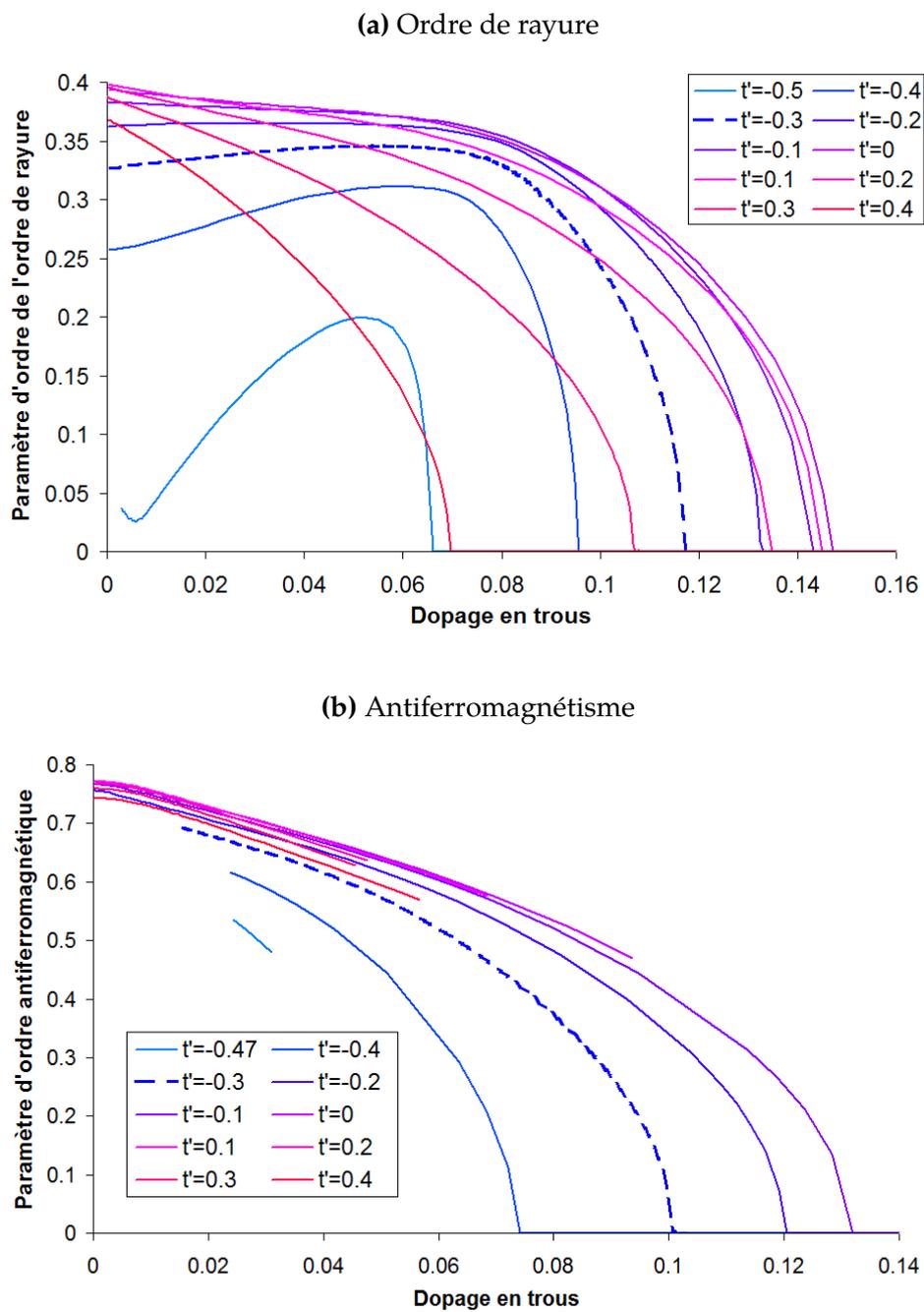


FIGURE 3.14 Graphique des paramètres d'ordre de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme pour différentes valeurs de t' qui est le terme de saut des électrons sur les sites voisins les plus proches se situant en diagonale. Ces résultats ont été effectués en VCA à l'aide du modèle à deux amas. Les courbes correspondantes au paramètre utilisé pour l'YBCO ($U = 8$) sont mises en évidence et les autres paramètres demeurent constants ($t = 1$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$).

le fait que t' est le terme de saut entre les sites diagonaux et celui, par sa nature, nuit au comportement antiferromagnétique (en reliant des sites qui ont des électrons de même spin). Comme l'ordre de rayure possède de l'antiferromagnétisme, l'augmentation de t' va nuire à celui-ci, jusqu'à le faire disparaître.

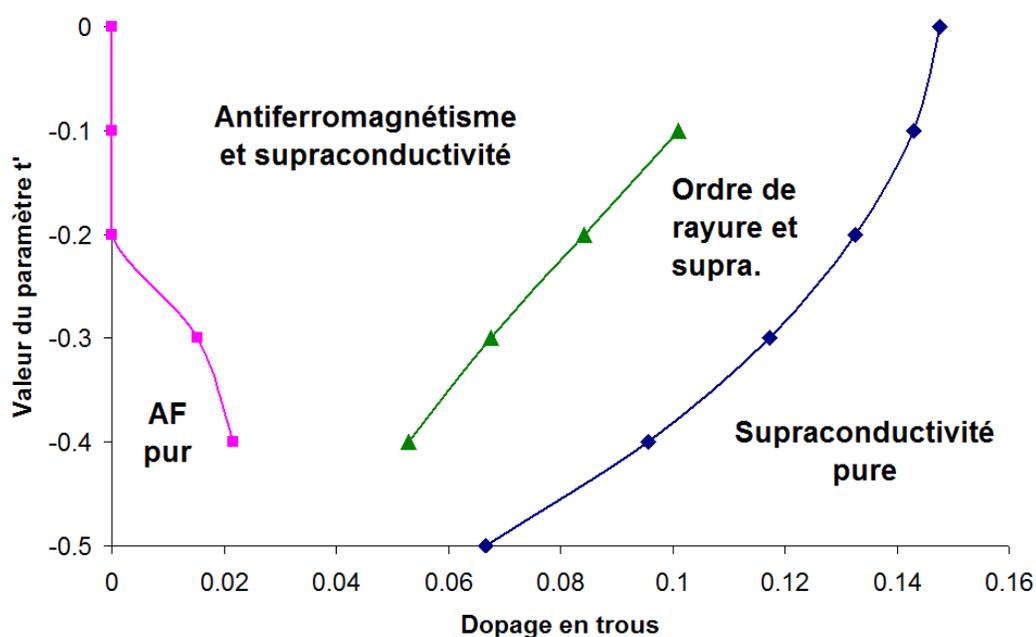


FIGURE 3.15 Graphique des frontières en dopage entre les différents types de solutions en fonction de la valeur de t' . Ces résultats sont issus des balayages effectués à la figure 3.14. Les points pour les différentes frontières sont reliés entre eux uniquement pour mieux visualiser le résultat.

Passons au paramètre t qui est le terme de saut entre les plus proches voisins. Comme ce paramètre est le principal terme de saut, modifier cette valeur va entraîner plusieurs effets simultanés dont la frustration (décrite généralement par le facteur t'/t) et l'effet sur U (ou le facteur U/t). Nous allons tout de même balayer ce paramètre pour vérifier comment se comporte l'ordre de rayure dans cette situation (voir figure 3.16a). On remarque que la forme de la solution change beaucoup en changeant la valeur de t . On observe même que l'ordre de rayure devient nul au demi-remplissage à partir d'environ $t = 2.1$. Lorsqu'on augmente davantage t , le dôme ainsi formé réduira en hauteur et en largeur pour disparaître autour d'un dopage de 0.13. À l'inverse, la diminution du paramètre t réduit l'amplitude de la solution, mais semble aussi vouloir former un autre dôme à plus bas dopage. Globalement, le paramètre le plus favorable pour l'ordre de rayure se situe autour de $t = 1.4$. Notons aussi que les solutions se terminent beaucoup plus loin en dopage qu'à l'ordinaire autour de ces valeurs. Pour

l'antiferromagnétisme (voir figure 3.16b), on obtient une allure un peu plus régulière, mais qui change tout de même en fonction de t : plus on augmente t , plus la solution va loin en dopage et moins elle est forte sur le reste de la courbe en général.

Les frontières en dopage entre les solutions où on a modifié t sont illustrées à la figure 3.17. Ce graphique nous indique que la solution de l'ordre de rayure tend à disparaître peu avant $t = 0.7$. Sinon cet ordre semble avoir une présence forte jusqu'à $t = 1.8$. Il est difficile ici d'analyser ces résultats car le fait d'augmenter t est équivalent à diminuer U , t' et t'' (et vice-versa), ce qui en résulte que ce qu'on observe est l'effet combiné de la diminution de ces trois variables (ou de leur augmentation). Nous n'avons pas pu déterminer la frontière entre la solution antiferromagnétique et l'ordre de rayure à $t = 2$ étant donné que la solution obtenue n'était pas complète, mais après, à $t = 2.2$ et pour des valeurs plus élevées, l'antiferromagnétisme domine toujours sur l'ordre de rayure en terme d'énergie interne, peu importe le dopage.

Finalement pour t'' , le dernier paramètre à tester qui est le terme de saut entre les deuxièmes plus proches voisins horizontalement et verticalement, on obtient respectivement pour l'ordre de rayure et l'antiferromagnétisme les figures 3.18a et 3.18b. Pour l'ordre de rayure, la solution est maximisée autour de $t'' = 0.1$ qui se trouve à être très près du paramètre habituellement utilisé de $t'' = 0.2$. Lorsqu'on diminue t'' , on pousse la solution vers le demi-remplissage et à l'inverse la solution forme un dôme qui diminue autour d'un dopage de 0.04. Comme les autres paramètres, on a aussi tracé un graphique des frontières en dopage des solutions à la figure 3.19. Ce graphique confirme que la solution de l'ordre de rayure disparaît autour de $t'' = 0.4$. La frontière entre les solutions de l'ordre de rayure et l'antiferromagnétisme cesse à partir de $t'' = 0$, car les solutions antiferromagnétiques sont une fois de plus discontinues. Cependant, nous serions tentés d'extrapoler cette courbe pour rejoindre la limite où l'ordre de rayure disparaît, ce qui nous donnerait une valeur d'environ $t'' = -0.07$, mais ce n'est pas la bonne façon de procéder. Il faudrait plutôt tenter de trouver les solutions secondaires après les discontinuités de l'antiferromagnétisme, si elles existent, pour pouvoir continuer efficacement la comparaison avec la solution de l'ordre de rayure. t'' a un comportement similaire à t' car il relie des sites qui ont des spins égaux dans le cas de l'antiferromagnétisme. Ce faisant, l'antiferromagnétisme et l'ordre de rayure seront plus forts près de $t'' = 0$ puis diminueront en intensité en s'éloignant de cette valeur.

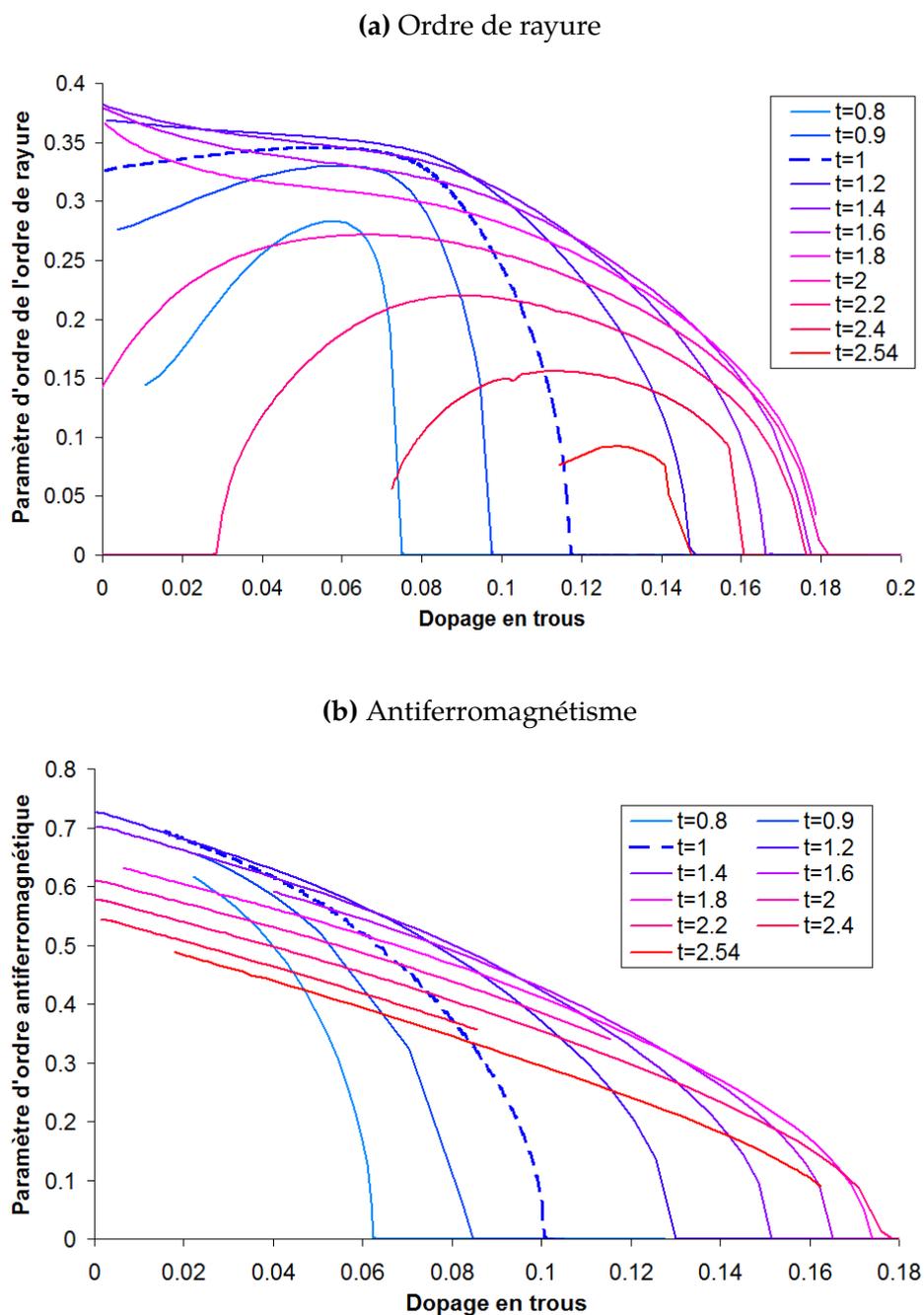


FIGURE 3.16 Graphique des paramètres d'ordre de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme pour différentes valeurs de t qui est le terme de saut des électrons sur les sites voisins les plus proches. Ces résultats ont été effectués en VCA à l'aide du modèle à deux amas. Les courbes correspondantes au paramètre utilisé pour l'YBCO ($t = 1$) sont mises en évidence et les autres paramètres demeurent constants ($U = 8$, $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$).

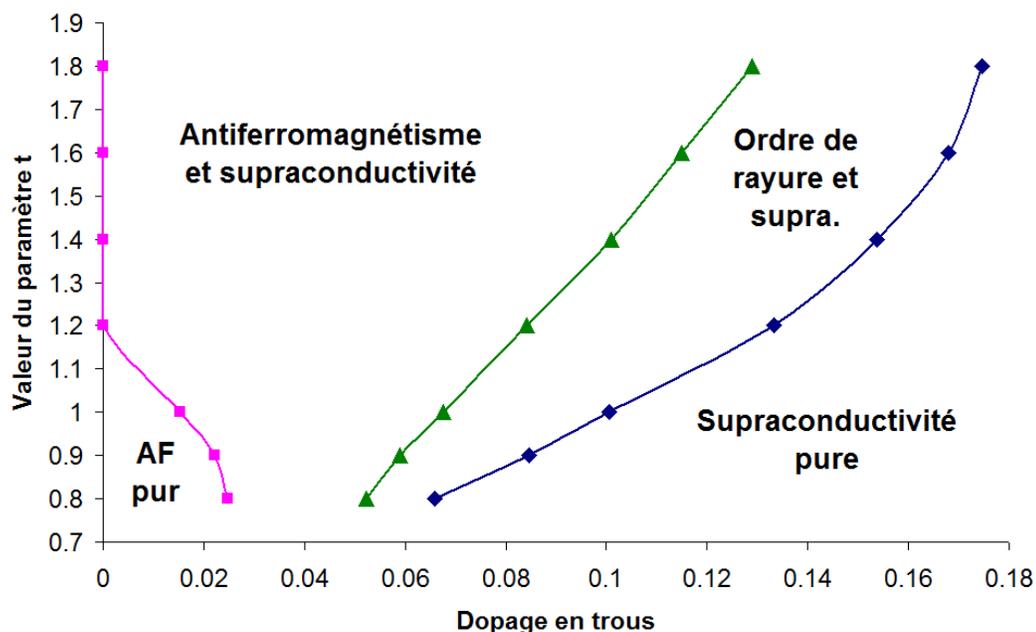


FIGURE 3.17 Graphique des frontières en dopage entre les différents types de solutions en fonction de la valeur de t . Ces résultats sont issus des balayages effectués à la figure 3.16. Les points pour les différentes frontières sont reliés entre eux uniquement pour mieux visualiser le résultat.

3.3.3 Conclusion

En effectuant tous ces balayages, nous avons pu observer l'effet des paramètres sur l'ordre de rayure. Nous avons montré que l'ordre de rayure est présent à condition de rester du côté isolant de la transition de Mott et que les termes de frustration t' et t'' ne soient pas trop grands. Mais l'ordre de rayure est tout de même présent sur une grande plage de valeurs, ce qui nous indique qu'il pourrait se trouver dans une grande variété de matériaux supraconducteurs possédant des plans cuivre-oxygène (ou des réseaux carrés similaires).

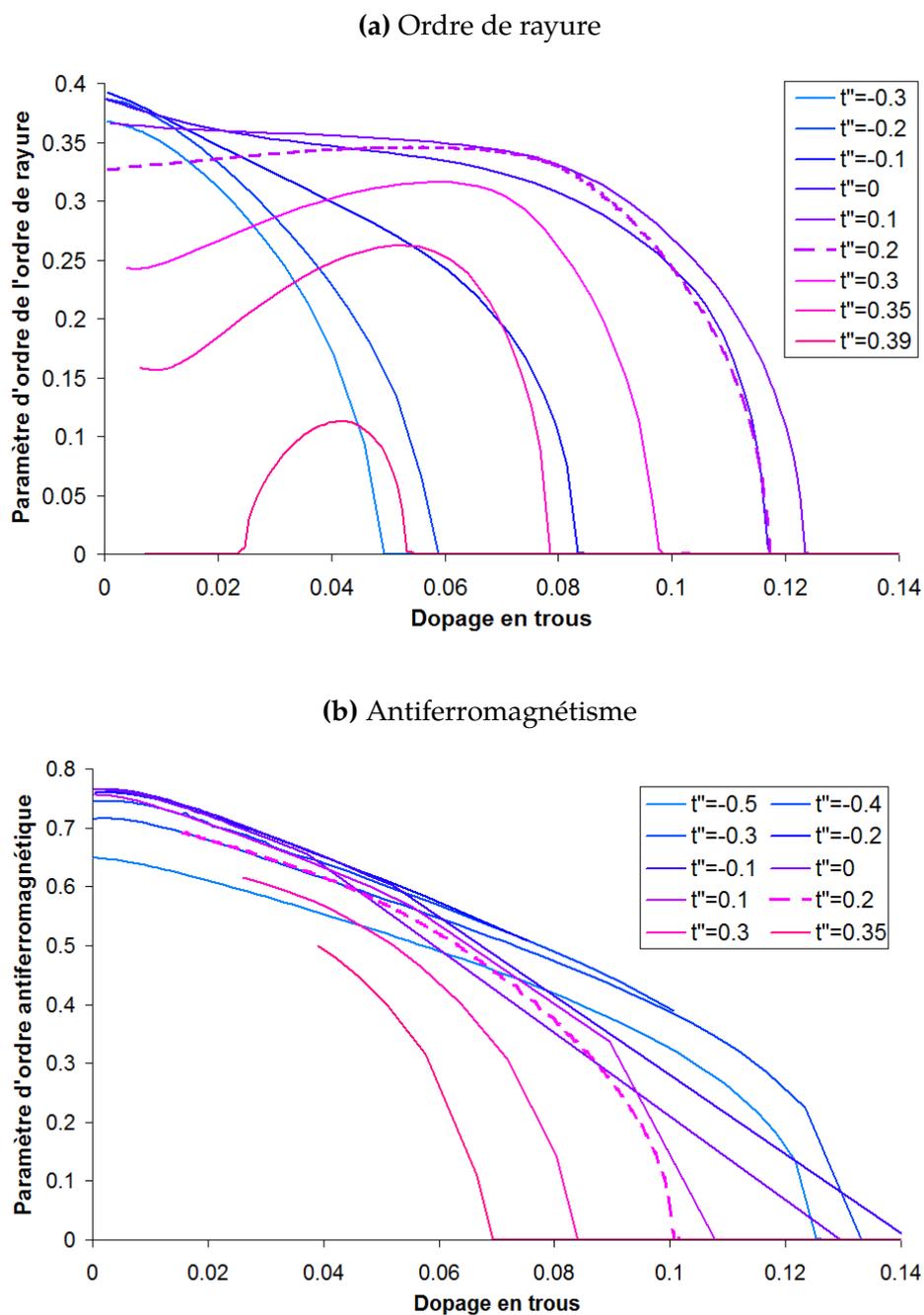


FIGURE 3.18 Graphique des paramètres d'ordre de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme pour différentes valeurs de t'' qui est le terme de saut des électrons sur les sites voisins les plus proches. Ces résultats ont été effectués en VCA à l'aide du modèle à deux amas. Les courbes correspondantes au paramètre utilisé pour l'YBCO ($t'' = 0.2$) sont mises en évidence et les autres paramètres demeurent constants ($U = 8$, $t = 1$, $t' = -0.3$).

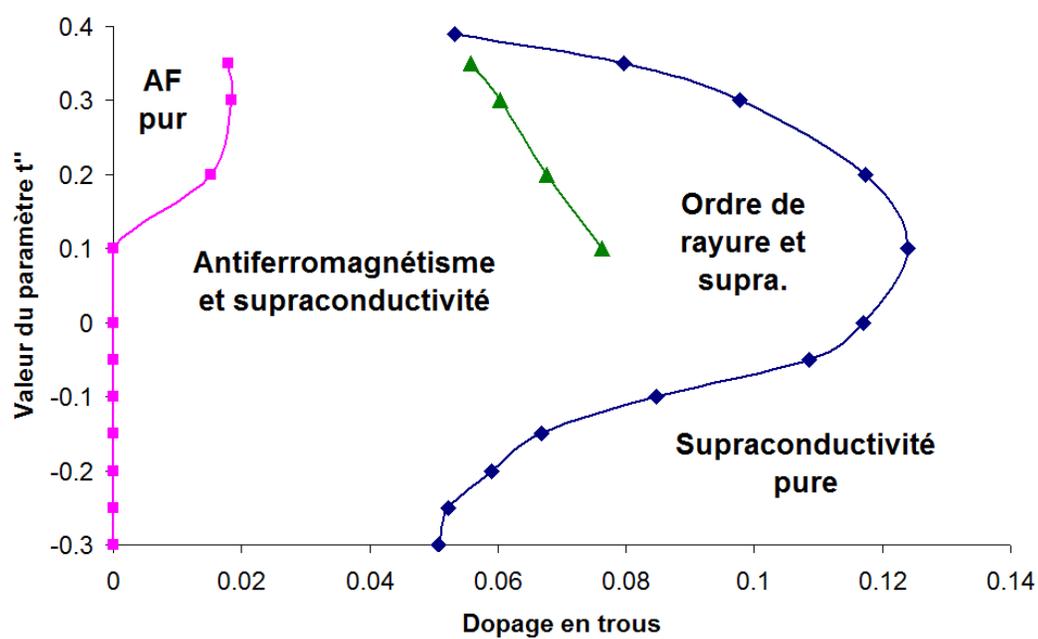


FIGURE 3.19 Graphique des frontières en dopage entre les différents types de solutions en fonction de la valeur de t'' . Ces résultats sont issus des balayages effectués à la figure 3.18. Les points pour les différentes frontières sont reliés entre eux uniquement pour mieux visualiser le résultat.

3.4 Tests avec des amas différents

Maintenant que nous avons atteint les objectifs que nous avons fixés avec le modèle à deux amas de deux par quatre sites, nous allons nous tourner vers d'autres types de modèles utilisant des amas différents pour tenter d'observer d'autres variantes de l'ordre de rayure. Pour tous les tests que nous allons effectuer dans cette section, nous utiliserons uniquement les paramètres du modèle de Hubbard pour l'YBCO (section 1.1.2).

3.4.1 Recherche de l'ordre de rayure avec une périodicité de 6 sites

Premièrement, nous avons voulu tenter de trouver un ordre de rayure possédant une périodicité différente. Plusieurs articles scientifiques montrent qu'il est possible de trouver un ordre de rayure possédant une périodicité horizontale plus grande de 10 sites [4] et de 12 sites [24] [4] [25] au lieu d'avoir la traditionnelle périodicité de 8 sites.

Dans notre situation, en CPT, augmenter la périodicité augmentera du même coup le nombre de sites des amas, ce qui augmentera aussi le temps de calcul. Comme l'ajout de chaque site multiplie le nombre d'états par 4 environ, le fait de passer à une périodicité de 10 sites (et donc à des amas de 10 sites) multipliera le temps de calcul par un facteur 16 au moins et ce sans compter que l'on aura plus de paramètres à varier et que le processus devra prendre plus d'itérations pour converger. Ça reste tout de même possible à faire autant en VCA qu'en CDMFT, mais ça devient beaucoup plus lourd et complexe à mettre en œuvre. Pour cette raison, plutôt que d'augmenter la périodicité de l'ordre de rayure, nous allons la diminuer à une périodicité de 6 sites, ce qui sera beaucoup plus facile à réaliser. Si on parvient à trouver un ordre de rayure pour cette périodicité, ça nous indique que l'ordre de rayure ne se limiterait pas à une périodicité de 8 sites et que des périodicités auraient de bonnes chances d'exister.

Modèle et champs de Weiss utilisés

Comme nos précédents calculs en VCA avec des amas de huit sites ont très bien fonctionné, nous allons utiliser la même stratégie avec un modèle et des champs de Weiss semblables, mais pour des amas de 6 sites. Nous allons donc avoir des amas de deux sites par trois sites tel qu'illustré à la figure 3.20. Ce modèle devrait théoriquement permettre à la fois l'antiferromagnétisme et l'ordre de rayure possédant une périodicité de 6 sites (tel que montré dans la figure). Nous avons centré cet ordre de rayure sur les amas, car comme nous l'avons découvert à la section 3.1, la VCA semble favoriser les solutions qui sont symétriques sur les amas. Comme les amas ont un nombre impair de

sites à l'horizontale, la colonne de trous sera centrée sur une seule colonne. Ce faisant, si on parvient à trouver cet ordre, on aura des résultats très intéressants sur l'ordre de rayure centré sur les sites et on pourra les comparer avec nos résultats sur l'ordre de rayure centré sur les liens.

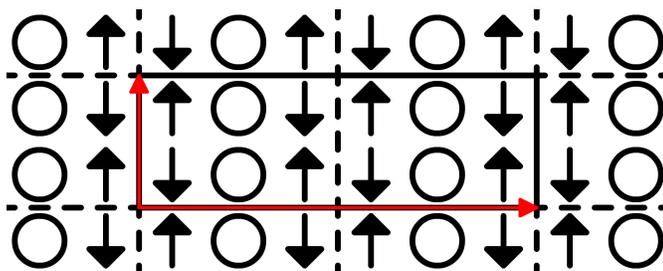


FIGURE 3.20 Schéma du modèle à deux amas de deux sites par trois sites. Les flèches rouges représentent la périodicité du modèle. Sur ses sites, on y montre un ordre de rayure centré sur les sites avec les colonnes de trous (représentées par des cercles) situées au centre des amas.

Nous allons laisser varier tous les champs de Weiss possibles. Ces champs de Weiss seront, une fois de plus, définis à l'aide de fonctions sinusoïdales centrées sur les amas, ce qui nous donnera les 12 champs de Weiss de la figure 3.21. On remarque, dans ces champs de Weiss, que le champ de Weiss H2 est l'ordre de spin qui correspond à l'ordre de rayure souhaité sur le super-amas, ce qui risque de s'avérer fort pratique en n'ayant qu'à utiliser un seul champ de Weiss de spin pour traiter cet ordre.

Résultats

Sans introduire le champ de Weiss supraconducteur (qui risque de compétitionner avec les ordres de rayures), nous n'arrivons pas à trouver de solution d'ordre de rayure. La seule solution que l'on trouve est l'antiferromagnétisme qui utilise les champs de Weiss AF, G (balance des spins sur les colonnes), $cdwF$ pour la charge globale et $cdwH$ (balance des charges sur les colonnes). Lorsqu'on trace les paramètres d'ordre de cette solution, on obtient la figure 3.22 et on observe une étrange discontinuité en dopage entre 0.01 et 0.025 qui est dû au fait qu'on a ici deux segments de solutions pour l'antiferromagnétisme. Sinon l'antiferromagnétisme se comporte comme précédemment et se termine autour d'un dopage de 0.09.

Conclusion

Nos résultats indiquent que l'ordre de rayure avec une périodicité de 6 sites ne peut exister dans le modèle à deux amas de 6 sites. Cela n'exclue par pour autant que d'autres périodicités sont possibles pour l'ordre de rayure.

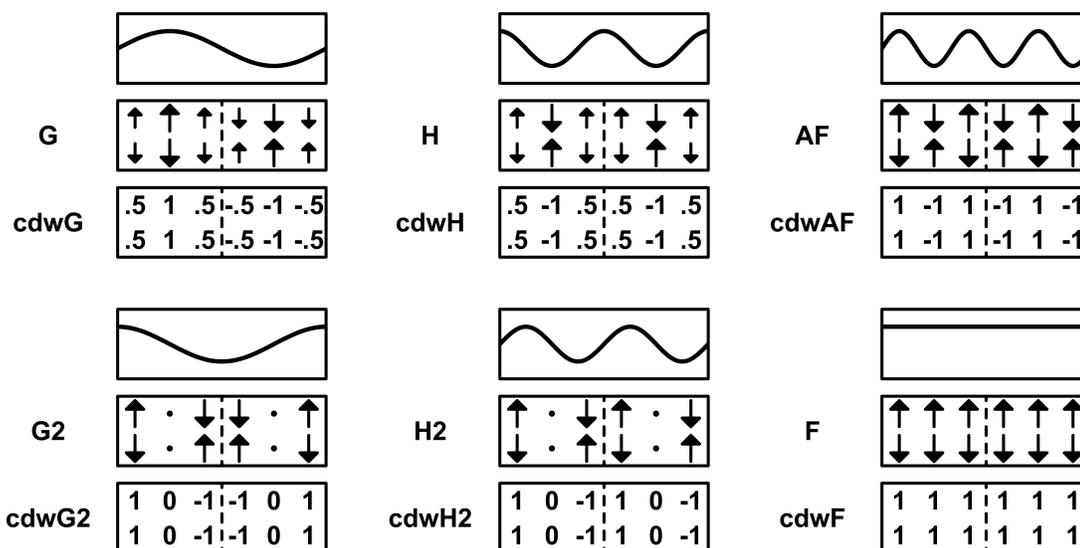


FIGURE 3.21 Schémas des champs de Weiss de spin et de charge utilisés sur le modèle de deux sites par six sites. Les champs de Weiss sont accompagnés de leur fonction sinusoïdale correspondante pour mieux comprendre leur origine.

3.4.2 Recherche de l'ordre de rayure centré sur les sites

Nous allons ici tenter d'obtenir un ordre de rayure centré sur les sites, mais en revenant à une périodicité horizontale de 8 sites. Nous allons effectuer les calculs en VCA, avec des amas modifiés qui seront centrés sur une colonne de sites, dans l'espoir qu'en laissant tous les champs de Weiss varier, un tel ordre de rayure apparaisse.

Modèle et champs de Weiss utilisés

Pour ce problème particulier, nous avons conçu un amas à partir de l'amas habituel de deux sites par quatre sites (voir 3.1), duquel on a déplacé les deux sites d'une des colonnes extérieures pour les placer au-dessus et en dessous de l'amas vis-à-vis le centre des sites non déplacés. Ces amas seront centrés sur une colonne de sites et seront symétriques horizontalement et verticalement. Le modèle comprenant ces amas est illustré à la figure 3.23. Remarquons qu'en raison de la forme des amas, il est impossible de prendre seulement deux amas et de les répéter pour reproduire l'ordre de rayure. Il en faut absolument un minimum de quatre qui auront chacun une disposition des spins différente sur leurs sites pour bien reproduire l'ordre de rayure. Si, à partir de ce modèle, on arrive à obtenir une solution d'ordre de rayure, celle-ci devra être centrée sur les sites (tel que montré sur les sites de la figure 3.23) étant donné que la VCA préfère

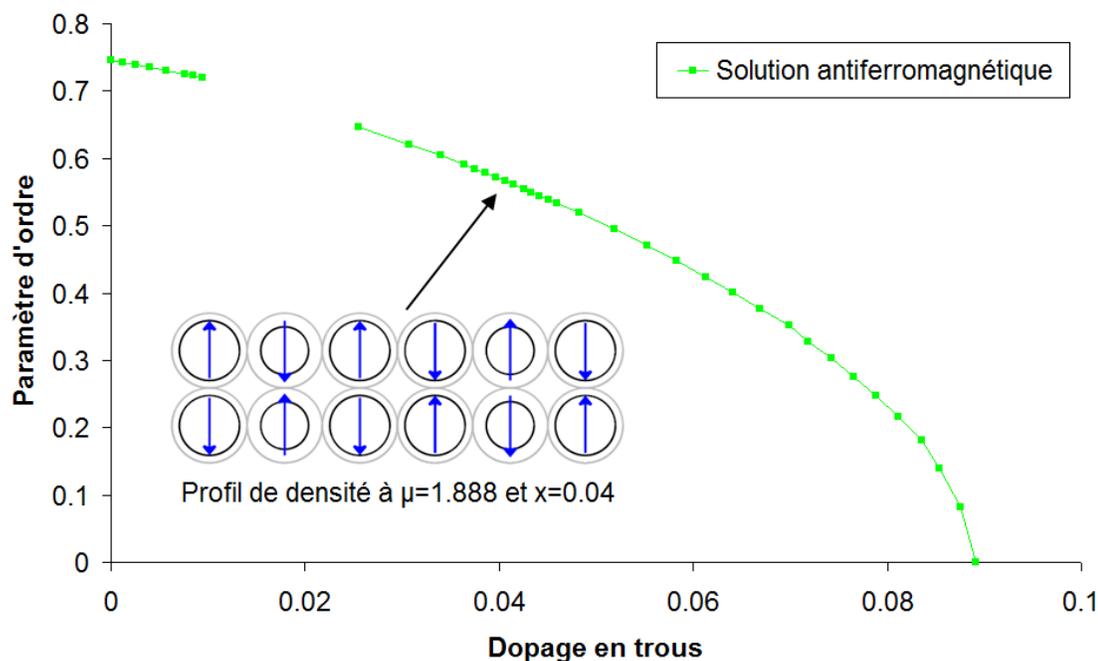


FIGURE 3.22 Paramètre d'ordre de la solution antiferromagnétique obtenue en VCA avec le modèle à deux amas de deux sites par trois sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

les solutions qui sont symétriques sur les amas. On aura ainsi deux amas centrés sur la colonne de trous et les deux autres centrés sur la partie antiferromagnétique de l'ordre de rayure.

Nous allons utiliser les mêmes champs de Weiss définis avec les amas de deux sites par quatre sites (voir figure 3.2). Nous les avons décalés d'un demi-site pour qu'ils soient centrés sur les amas tel que montré à la figure 3.24. Cela fera en sorte qu'il y aura moins de chances d'avoir des combinaisons entre les champs de Weiss de même vecteur d'onde, ce qui donnera plus de champs de Weiss qui convergeront vers une valeur nulle et réduira plus facilement le nombre de champs de Weiss à traiter.

Notons qu'en utilisant ces champs de Weiss uniquement, nous ne sommes plus dans une situation où on utilise réellement tous les paramètres variationnels possibles. Pour que ce soit le cas, il faudrait avoir deux fois plus de champs de Weiss pour pouvoir traiter la différence de densité de spin et de charge entre les rangées horizontales qui pourraient survenir par les effets de bord des amas. Par souci de simplicité, nous n'allons pas tenir compte de tous ces champs de Weiss, ce qui implique de supposer que les densités de spin et de charge seront les mêmes pour chaque colonne, ce qui est une approximation raisonnable à faire.

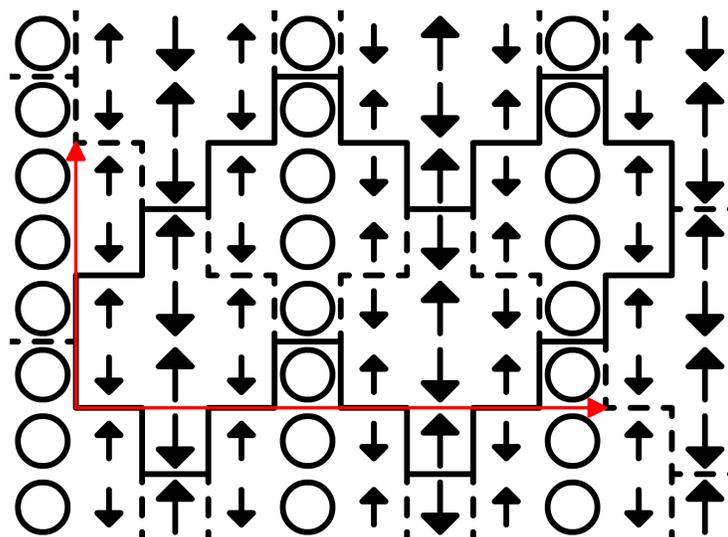


FIGURE 3.23 Schéma du modèle destiné à tester l'ordre de rayure centré sur les sites. La solution de l'ordre de rayure espérée est indiqué sur les sites des amas. Les vecteurs de périodicité sont indiqués en rouge.

Résultats

Nous parvenons à trouver la solution d'ordre de rayure espérée à l'aide des champs de Weiss A2 et C2 pour les spins (on aurait aussi bien pu utiliser A et C ici), le champ $cdwF$ pour la charge globale et le champ $cdwB$ pour les colonnes de trous. Un profil de densité de la solution est donné à la figure 3.25. Cet ordre est centré sur les sites et est très bien défini : ses colonnes de trous possèdent des spins presque nuls et sont fortement dopées en trous tandis que les autres colonnes possèdent un antiferromagnétisme fort. Ce résultat ressemble donc beaucoup au schéma simplifié que l'on fait généralement pour présenter l'ordre de rayure (voir 3). Nous avons aussi obtenu la solution antiferromagnétique avec les champs de Weiss AF, F, $cdwF$ et $cdwAF$ où les champs F et $cdwAF$ servent à balancer les densités de spin et de charge des colonnes extérieures par rapport aux colonnes intérieures. Il a été cependant impossible d'introduire le champ de Weiss supraconducteur qui, étrangement, convergeait toujours vers une valeur nulle.

Avec les solutions antiferromagnétiques et de l'ordre de rayure, nous avons fait des balayages pour obtenir le graphique des paramètres d'ordre à la figure 3.26. La solution de l'ordre de rayure a une forme similaire à celle qu'on avait trouvée avec les amas rectangulaires (voir figure 3.3). On obtient par contre un paramètre d'ordre un peu plus élevé que précédemment (0.41 au lieu de 0.35), ce qui indique que la solution centrée sur les sites serait probablement plus favorable qu'une solution centrée sur les liens. Concernant l'antiferromagnétisme, la solution va anormalement loin

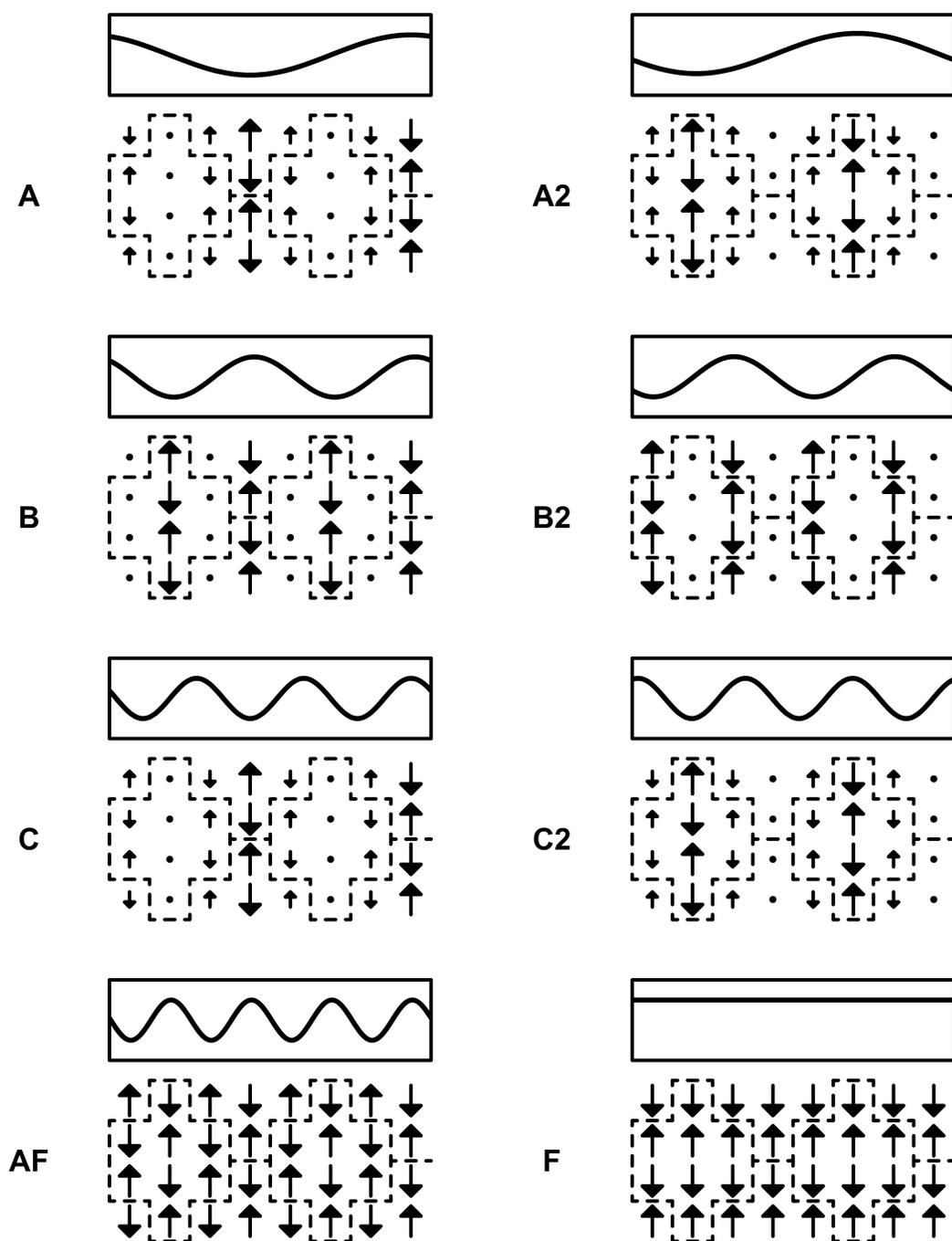


FIGURE 3.24 Champs de Weiss de spin utilisés pour les tests sur les amas centrés sur les sites. Les champs de Weiss de charge (avec le préfixe "cdw") ne sont pas montrés, mais sont définis de la même manière sans le comportement antiferromagnétique vertical.

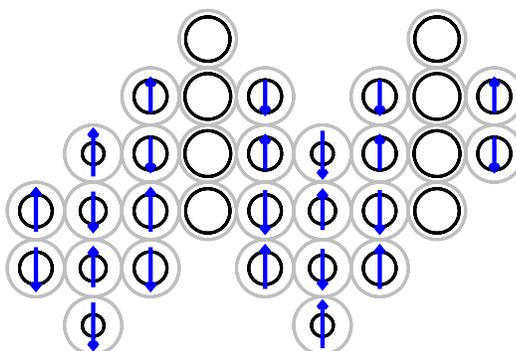


FIGURE 3.25 Profil de densité pour la solution de l'ordre de rayure pour une valeur de $\mu = 1.7$ correspondant à un dopage en trous de 0.079. Cette solution a été obtenue en VCA sur le modèle à amas centré sur les sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

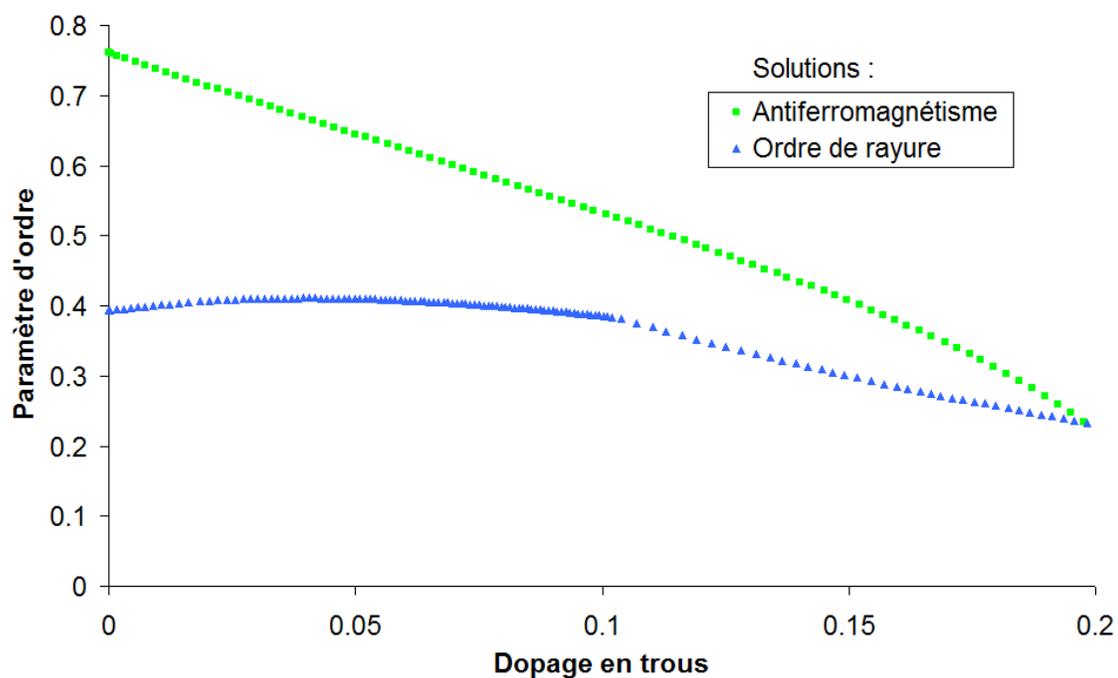


FIGURE 3.26 Graphique des paramètres d'ordre des solutions trouvées en VCA avec le modèle utilisant des amas centrés sur les sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

en dopage et se continue jusqu'à un dopage de 0.225. En comparant les énergies internes des deux solutions, l'ordre de rayure commence à être favorable par rapport à l'antiferromagnétisme autour d'un dopage de 0.065.

Pour tenter de comprendre pourquoi l'antiferromagnétisme est si persistant, nous avons effectué un profil de densité de la solution pour un fort dopage à la figure 3.27. Nous ne remarquons rien d'anormal à priori, les densités de charges sont constantes et les densités de spin reproduisent correctement l'antiferromagnétisme. On dénote cependant que les spins sont plus forts aux bordures de l'amas dû à un effet de bord. Cependant, il est difficile d'expliquer uniquement par ces résultats pourquoi l'antiferromagnétisme se trouve favorisé avec les amas utilisés. On serait tenté de dire que nous n'avons pas suffisamment de champs de Weiss de spin pour contrôler efficacement l'amplitude des spins sur chaque site différent de l'amas pour contrebalancer les effets de bords. Mais en ajoutant ces champs de Weiss pour corriger les spins de l'antiferromagnétisme, on se trouve à faire des corrections relativement mineures par rapport à l'apport au champ de Weiss principal de l'antiferromagnétisme, ce qui devrait avoir un impact minime sur la densité électronique. De plus, en ajoutant ces champs de Weiss qui vont, par la VCA, venir minimiser Ω , on diminue davantage la valeur de Ω , ce qui améliore la solution obtenue. Ce faisant, on verra une augmentation des paramètres d'ordre et la solution ira plus loin en dopage, ce qui est complètement l'effet contraire désiré. On peut constater d'ailleurs cet effet en comparant les solutions antiferromagnétiques avec coexistence avec la supraconductivité des figures 55 et 3.3, où la seule différence entre les deux courbes est que l'on a ajouté à la deuxième figure le champ de Weiss de spin B à la solution.

Comme le problème ne provient pas des champs de Weiss, il vient fort probablement du modèle qui est très différent des modèles rectangulaires définis jusqu'à présent autant par la forme des amas que par la périodicité des amas. Nous n'arrivons pas à expliquer pourquoi le choix du modèle entraîne ces effets sur l'antiferromagnétisme. Mais, en contrepartie, nous savons que les paramètres du modèle de Hubbard ont été définis pour des amas carrés de quatre sites répétés de manière orthogonale. Donc, l'antiferromagnétisme devrait être bien représenté pour des amas rectangulaires, mais lorsque l'on change drastiquement le modèle, ces paramètres deviennent possiblement erronés, ce qui se traduirait par des changements du comportement des solutions. Possiblement aussi que l'impossibilité d'introduire le champ de Weiss supraconducteur auquel nous avons fait face origine aussi de ce problème.

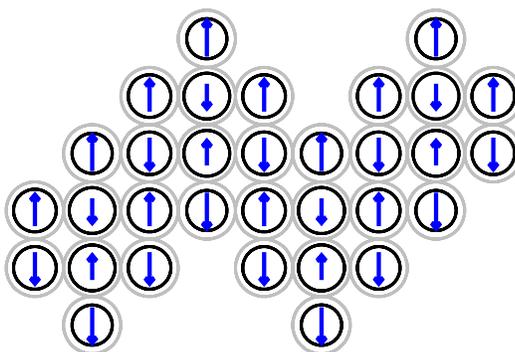


FIGURE 3.27 Profil de densité pour la solution antiferromagnétique pour une valeur de $\mu = 1.25$ correspondant à un dopage en trous de 0.15. Cette solution a été obtenue en VCA sur le modèle à amas centré sur les sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

Conclusion

Nous sommes parvenus à obtenir un ordre de rayure centré sur les sites qui apparaît avec vigueur sur les amas. Ça confirme que la forme des amas encourage fortement les ordres obtenus à se soumettre aux symétries des amas (s'il y en a). Aussi, nous avons observé des comportements étranges avec la solution antiferromagnétique et la supraconductivité, ce qui serait probablement dû à la forme inhabituelle des amas utilisés et au positionnement différent des amas.

3.4.3 Recherche de différentes formes d'ordre de rayure en VCA avec des amas en étoile

Maintenant que nous avons prouvé que l'ordre de rayure peut apparaître sous deux formes différentes dans le réseau (en étant centré soit sur les sites ou les liens) il serait intéressant de vérifier si d'autres types d'ordre de rayure apparaissent tel que l'ordre diagonal qui est parfois mentionné dans la littérature [11] [3] dont la colonne de trous est inclinée à 45° et centrée sur les sites.

Modèle et champs de Weiss utilisé

Il faut concevoir un nouveau modèle qui puisse accommoder l'ordre de rayure diagonal et idéalement on voudrait qu'il puisse aussi le faire pour l'ordre de rayure vertical tel qu'on le connaît et l'antiferromagnétisme. Aussi, dans le même esprit que les précédents tests, on aimerait que les ordres apparaissent d'eux-mêmes en laissant tous les champs de Weiss varier. Le modèle qui a été conçu pour répondre à ces critères est illustré à la figure 3.28 avec les principales solutions qu'il permet. Les amas qu'il

contient sont des amas en forme d'étoile qui possèdent 8 sites et qui sont symétriques par rotation de 90° . Cette symétrie confère un avantage important aux amas en étant balancés autant verticalement que diagonalement à 45° . Par balancé, on entend que l'amas est symétrique par rotation de 180° et ainsi, comme la VCA préfère les ordres qui apparaissent de manière symétrique sur les amas, les ordres obtenus seront centrés sur les amas et pourront avoir un axe de symétrie à la verticale, à l'horizontale ou à la diagonale. Ainsi, on pourra obtenir un ordre de rayure vertical et un ordre de rayure diagonal dans ce même modèle.

Nous nous sommes rendu compte que ce modèle permet aussi de tester un ordre de rayure différent qui serait en fait l'addition d'un ordre de rayure vertical et un ordre de rayure horizontal où on aurait des colonnes de trous verticales et horizontales tel que montré à la figure 3.28. L'intérêt d'explorer cette nouvelle possibilité vient d'une hypothèse où cet ordre de rayure en deux dimensions serait une solution plus favorable que l'ordre de rayure vertical. Si tel est le cas, lorsqu'on utilise un modèle qui ne permet pas de rayures horizontales, le mieux que les champs de Weiss peuvent faire pour reproduire l'ordre de rayure en deux dimensions est de reproduire uniquement les rayures verticales, ce qui serait conforme à ce qu'on a obtenu jusqu'à maintenant. Ce modèle nous permettra donc de pouvoir confirmer ou d'infirmer cette hypothèse.

Pour les champs de Weiss, il sera difficile d'utiliser à la lettre la méthode de laisser tous les champs de Weiss varier, car cela nécessiterait au total 64 champs de Weiss de spin et 64 champs de Weiss de charge. Ce n'est pas impossible à réaliser, mais ça nécessiterait une quantité impressionnante de tests préliminaires à faire et de temps de calcul. Nous allons plutôt faire quelques simplifications. Chaque champ de Weiss de spin que nous allons définir modifiera uniquement les densités de spins des sites qui devraient avoir la même amplitude (en négligeant les effets de bord des amas). Nous aurons donc de un à trois champs de Weiss de spin par type de solution. On aurait pu faire la même chose pour les champs de Weiss de charge, mais pour simplifier encore plus nous n'allons modifier que la densité de charge globale étant donné que les autres champs de Weiss de charge ne modifient habituellement que peu les résultats. De plus, nous n'utiliserons pas le champ de Weiss supraconducteur.

Résultats

Les quatre solutions présentées à la figure 3.28 ont toutes été obtenues sur le modèle. Pour être certains que les solutions soient les bonnes, nous avons tracé un profil de densité de spin et de charge pour un point de chaque solution à la figure 3.29. Les solutions sont conformes aux attentes générales : les spins sont dans les bonnes directions et les colonnes de trous des ordres de rayure sont bien représentées. Cependant, l'amplitude des spins pour les colonnes de trous de l'ordre de rayure vertical et de l'ordre de rayure en deux dimensions (les profils 3.29b et 3.29d) est relativement

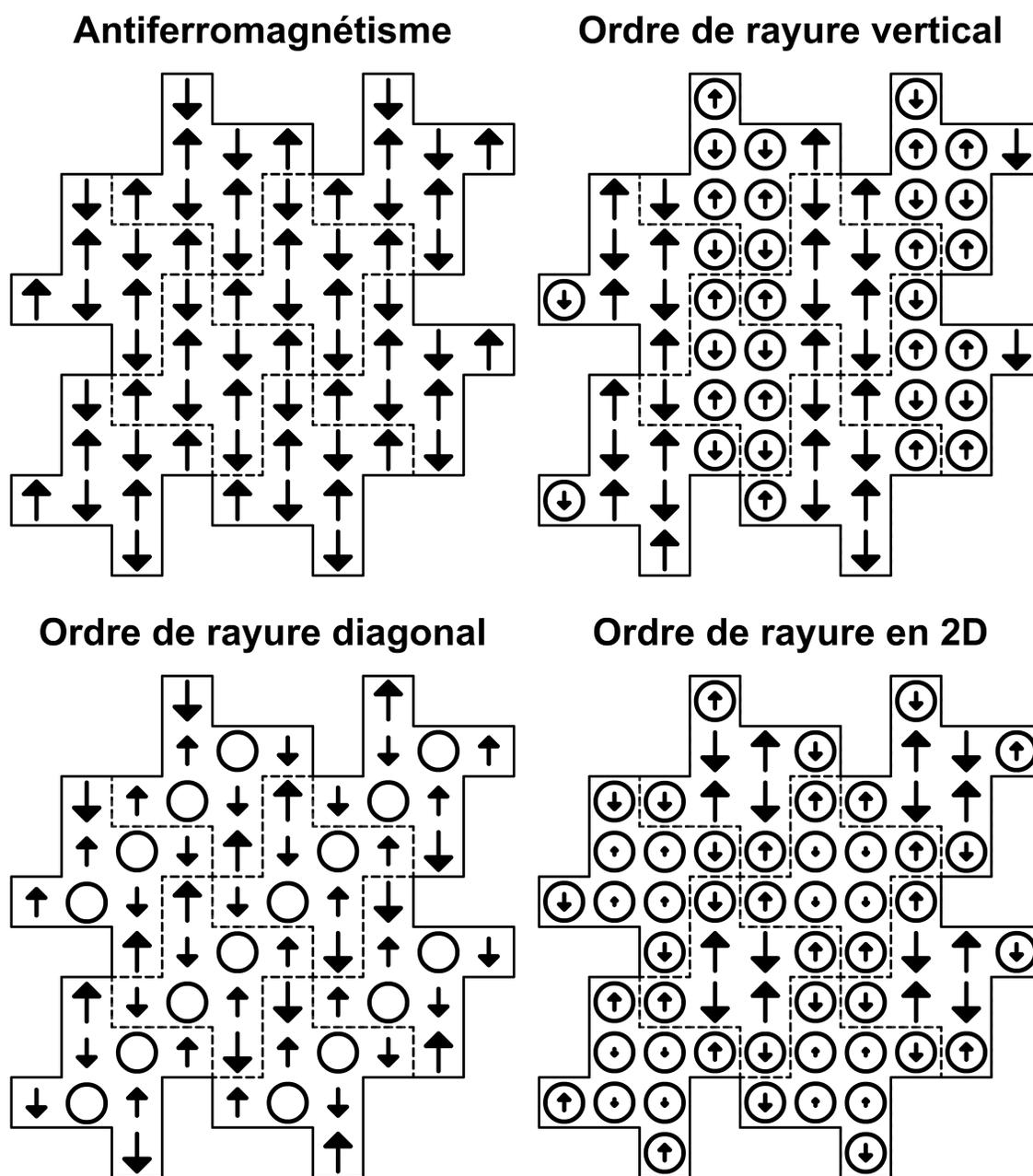


FIGURE 3.28 Schéma des quatre solutions testées pour le modèle utilisant des amas en étoile. Les vecteurs de périodicité ne sont pas affichés et sont de 8 sites à la verticale et de 8 sites à l'horizontale.

forte lorsqu'on s'attend à une faible amplitude. Pourtant, les colonnes de trous se situent parfois au centre des amas et devraient donc être très bien représentées. Nous ne savons donc pas pourquoi ce problème survient, mais le problème demeure mineur pourvu que l'amplitude de ces spins soit plus faible que les autres spins en dehors des colonnes de trous.

Nous avons effectué des balayages des solutions, mais cette fois-ci, nous n'avons pas calculé les paramètres d'ordre des solutions, car le calcul des paramètres d'ordre des solutions de l'ordre de rayure diagonal et de l'ordre de rayure en deux dimensions semblait complexe et que nous étions limités en temps. Par contre, nous avons accès facilement aux énergies internes (voir figure 3.30) qui nous permettent de voir pour quels dopages les solutions sont présentes et de comparer les solutions entre elles. Notons que sur ce graphique, une solution supplémentaire est présente où nous avons calculé l'énergie interne en l'absence de champ de Weiss de spin, ce qui correspond à une situation où le paramètre d'ordre est nul et nous permettra de juger avec quelle force les solutions sont présentes. Un détail important à mentionner est que nous avons effectué la VCA de manière indépendante pour chaque type de solution recherchée. Ce faisant, il se peut qu'en incluant les champs de Weiss d'un autre type de solution, on quitte la solution trouvée pour converger vers une solution correspondant aux champs de Weiss ajoutés. Bref, il est donc possible que les solutions d'ordre de rayure diagonal et en 2D, qui ont une énergie interne plus forte, puissent quitter la solution trouvée pour converger vers une solution d'ordre de rayure vertical par exemple.

Le graphique nous indique que la solution antiferromagnétique est la plus favorable entre le demi-remplissage et 0.093 où elle laisse sa place à l'ordre de rayure vertical. D'ailleurs, on remarque aussi que l'antiferromagnétisme se poursuit au-delà de 0.16, l'échelle en dopage du graphique. Si l'antiferromagnétisme se terminait de manière habituelle, on observerait que son énergie interne se rapprocherait de plus en plus de la courbe de la solution sans champs de Weiss de spin jusqu'à la partager. En augmentant beaucoup le dopage, on observe ceci autour d'un dopage de 0.5. Ce dopage étant très élevé nous indique que nous avons clairement un problème où l'antiferromagnétisme est fortement exagéré de manière similaire à ce qu'on avait avec des amas centrés sur les sites. Possiblement que la forme de l'amas est en cause ici où on a plusieurs sites n'ayant qu'un seul plus proche voisin au sein de l'amas, ce que nous n'avions pas pour des amas rectangulaires.

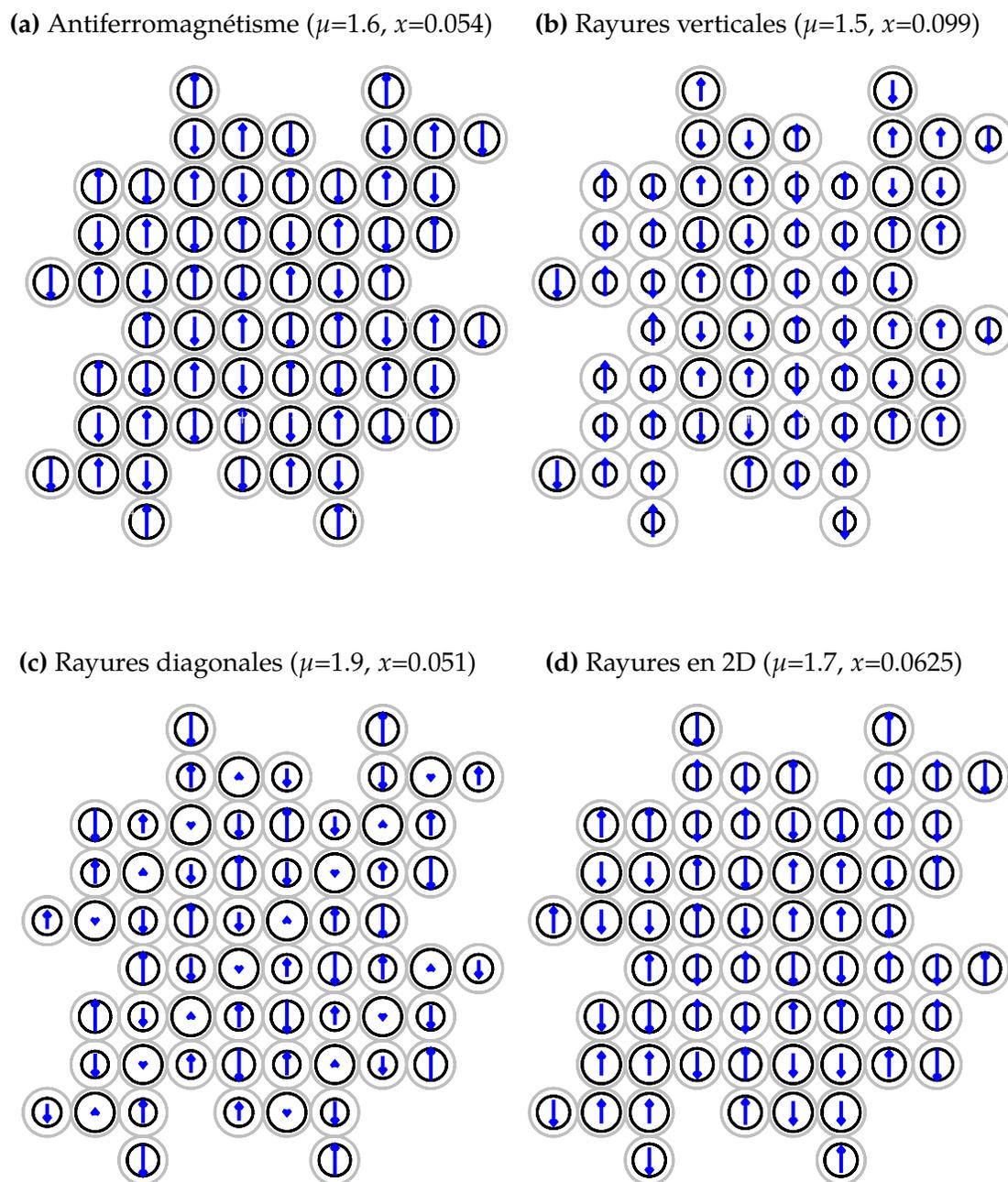


FIGURE 3.29 Profils de densité de spin et de charge pour les quatre types de solutions testées en VCA avec le modèle utilisant des amas en étoile pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard. Les spins sont représentés par les flèches bleues et les cercles noirs représentent la densité de trous sur chaque site. La variable x correspond au dopage en trous.

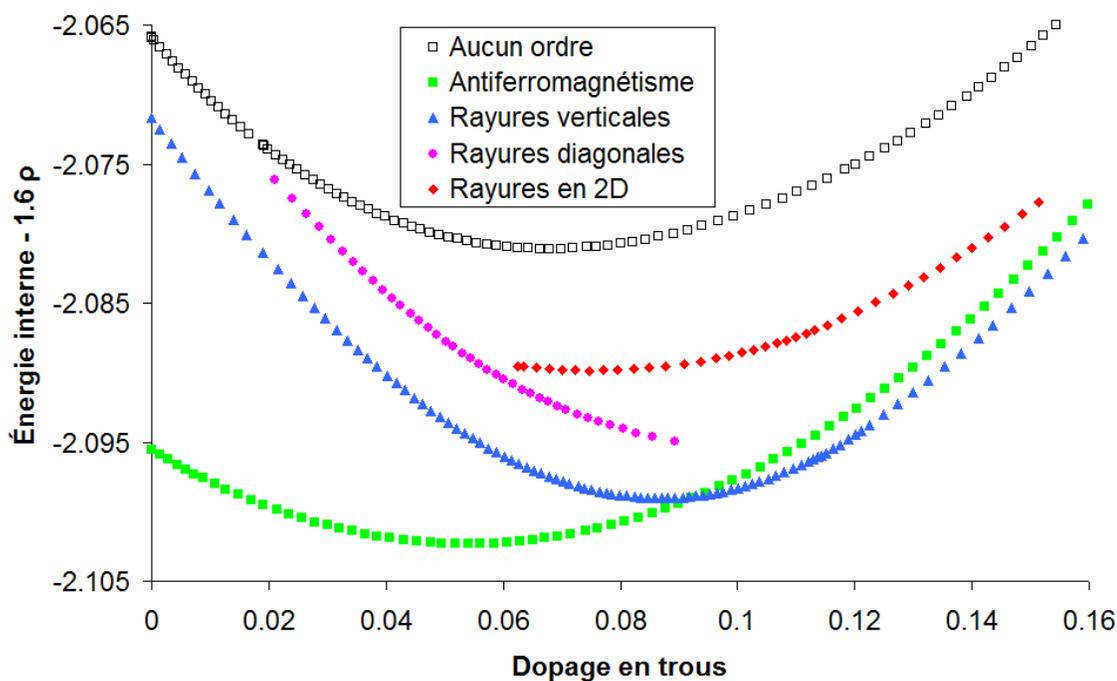


FIGURE 3.30 Graphique des énergies internes des solutions obtenues en VCA dans le modèle utilisant des amas en étoile pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard. Toutes les courbes sont redressées avec un terme dépendant de la densité électronique pour faciliter la comparaison visuelle entre les solutions.

Concernant les solutions d'ordre de rayure, la plus favorable est celle de l'ordre de rayure vertical. L'ordre de rayure diagonal semble débuter autour d'un dopage de 0.016 et s'arrête autour de 0.09, ce qui l'empêche de devenir plus favorable que l'ordre de rayure vertical malgré qu'elle s'aligne pour la surpasser. Pour l'ordre de rayure en deux dimensions, si on utilise la solution sans ordre de spin comme référence, elle est environ deux fois moins forte que l'ordre de rayure vertical, ce qui infirme l'hypothèse que cette solution est la solution que l'ordre de rayure vertical tenterait d'imiter. Une particularité étrange survient pour l'ordre de rayure en deux dimensions, sa courbe du paramètre d'ordre se termine abruptement et précisément à un dopage 0.0625 (1/16) sans pouvoir aller à des dopages plus faibles. Il est possible d'augmenter la valeur de μ à partir de ce point, mais on obtient exactement la même solution (donne le même dopage et le même paramètre d'ordre) et cela ne nous permet pas de sortir de cette impasse. Pourtant, nous avons augmenté beaucoup la valeur de μ de 1.66 à 2.02, ce qui correspond habituellement à un écart en dopage de 0.05. Le profil de densité présenté à la figure 3.29d montre quel type de solution on obtient à ce dopage et on ne dénote aucune anomalie, en plus que les profils de densités pour les autres dopages sont très semblables à celui-ci. Nous ne savons pas pour quelle raison on obtient cette particularité

surtout qu'elle survient à un dopage très précis de $1/16$. Il est possible que le champ de Weiss de charge globale soit en faute et ne se comporte pas comme il le faut pour cette situation. Cela reste à vérifier et à confirmer.

Conclusion

Nous avons obtenu des résultats pour tous les types de solutions espérées pour le modèle avec des amas en étoile. Ces résultats nous ont permis de confirmer que l'ordre de rayure vertical serait la meilleure solution des types d'ordre de rayure. Cependant, l'antiferromagnétisme cause encore des soucis en étant présent pour des dopages très élevés.

Conclusion

Dans le cadre de ce projet de maîtrise, nous avons atteint les objectifs principaux fixés au départ : nous avons réussi à trouver une solution d'ordre de rayure en utilisant la méthode de la VCA et montré que cet ordre parvient à supplanter l'antiferromagnétisme et la supraconductivité pure pour certains dopages. De plus, cette solution se trouve avec un modèle relativement simple et facile à utiliser constitué d'amas rectangulaires de huit sites. Nous avons aussi montré que cet ordre de rayure trouvé à l'aide de ces amas est centré sur les liens pour satisfaire la VCA qui semble préférer les solutions qui ont une certaine symétrie sur les amas. De plus, les colonnes de trous sont bien représentées en ayant un spin faible et une densité de trous plus élevée. Ajoutons à cela que l'ordre de rayure peut coexister avec la supraconductivité et qu'il y a une compétition entre ces deux phases.

Nous avons pu reproduire une partie de ces résultats en CDMFT, une méthode numérique différente, où nous obtenions une solution en forme de dôme. Cependant, avec cette méthode, on obtient plusieurs irrégularités, dont un dédoublement de la solution et les colonnes de trous qui étaient étrangement dopées en électrons.

Puis, nous avons effectué une multitude de balayages en VCA en modifiant les paramètres du modèle de Hubbard pour observer le comportement de l'ordre de rayure pour différents matériaux se rapprochant de l'YBCO. Nous avons ainsi observé que l'ordre de rayure ne semble pas pouvoir dominer sur l'antiferromagnétisme et la supraconductivité en ayant dépassé la transition de Mott. De plus, les paramètres de frustration t' et t'' nuisent à l'ordre de rayure jusqu'à le faire disparaître si ces paramètres sont trop élevés. Malgré tout, l'ordre est présent pour une large variété de paramètres et donc il devrait se retrouver dans plusieurs matériaux à la condition de posséder des plans semblables aux plans cuivre-oxygène des cuprates supraconducteurs.

Nous avons aussi testé différents modèles d'amas en VCA pour pouvoir observer d'autres types d'ordre de rayure. Nous avons tenté de trouver un ordre de rayure possédant une périodicité horizontale plus petite à 6 sites, ce qui s'avère être impossible. Puis, nous sommes revenus à la périodicité de 8 sites, mais en utilisant un modèle avec des amas centrés sur les sites. Cela nous a permis d'obtenir un ordre de rayure centré sur les sites avec une grande netteté et amplitude. Cependant, nous n'avons pas pu incorporer la supraconductivité avec ce modèle (il était impossible de converger vers une solution). Aussi le modèle favorisait exagérément l'antiferromagnétisme ce qui est

probablement dû à un effet de bord sur les amas. Finalement, nous avons utilisé un modèle basé sur des amas en étoiles permettant une grande variété de solutions d'ordre de rayure, dont l'ordre de rayure diagonal. Nous avons pu trouver l'ordre de rayure diagonal, l'ordre de rayure vertical et un ordre de rayure en deux dimensions, mais l'ordre de rayure vertical demeure la solution dominante parmi celles-ci.

Malgré que ce travail nous ait permis de confirmer ou d'infirmer une partie des hypothèses concernant l'ordre de rayure, plusieurs questions majeures et fondamentales restent en suspens à ce sujet. Par exemple : quel est le mécanisme permettant à l'ordre de rayure de s'établir dans le réseau et de quelle manière cet ordre nuit-il à la supraconductivité ? Peut-être que ces questions feront partie des futurs projets de maîtrise d'étudiants en physique et, sait-on jamais, peut-être découvriront-ils la clé à la supraconductivité à température ambiante !

Annexe

Cet annexe contient essentiellement les premiers calculs effectués en VCA qui ont permis de faire des observations importantes sur l'ordre de rayure et d'améliorer grandement la qualité des résultats présentés au chapitre 3. Ce cheminement a été nécessaire pour comprendre comment traiter le problème à la fois de manière rigoureuse et efficace et c'est pourquoi il me semble tout aussi nécessaire de présenter ce cheminement.

A Variation simple de l'ordre de rayure en VCA

Notre objectif premier est tout d'abord de vérifier si l'ordre de rayure existe dans le réseau en utilisant les paramètres de l'YBCO pour le modèle du Hubbard à une bande (présentés à la section 1.1.2). Comme il s'agissait des premiers tests, il semblait évident d'utiliser la VCA qui s'avère être beaucoup plus simple à mettre en place. Il a donc fallu se définir un champ de Weiss représentant l'ordre de rayure, mais aussi un modèle qui comprend l'information sur les amas qui sont utilisés pour reproduire le réseau.

Modèles à un amas

Rappelons que l'ordre de rayure auquel on s'intéresse a l'allure illustrée à la figure 3. On peut se définir une maille élémentaire de cet ordre avec un rectangle de deux sites de haut par quatre sites de large tel qu'illustré à la figure 31. Les amas doivent être commensurables avec la maille élémentaire de l'ordre qu'on désire analyser, donc l'amas le plus petit possible sera cette maille élémentaire. On aurait pu aussi avoir des amas de 16 sites qui possèdent deux cellules unités, mais le nombre de sites pose problème pour les temps de calcul, car à chaque fois qu'on ajoute un site à un amas, on multiplie environ par 4 le nombre d'états quantiques de l'amas. Donc, à 16 sites, les calculs deviendraient beaucoup plus longs à effectuer, ce qui occasionnerait probablement un problème de dépassement de la mémoire vive pour pouvoir stocker les états et l'hamiltonien. C'est pourquoi on se limite à une seule maille élémentaire.

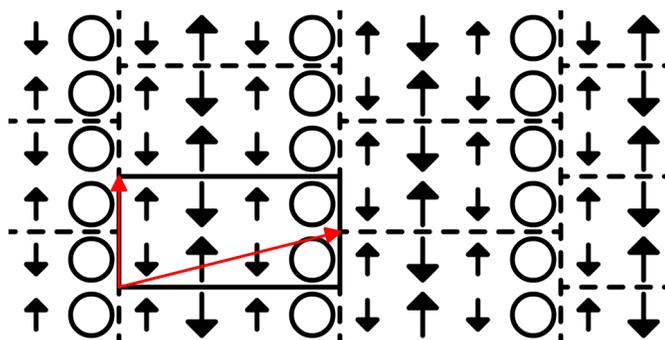


FIGURE 31 Modèle à un amas que nous utiliserons pour effectuer des calculs en VCA pour l'ordre de rayure (dont l'ordre espéré est présentée sur les sites du modèle). La maille élémentaire est entourée d'un trait plein et les vecteurs de base des amas sont représentés par les flèches rouges.

Au niveau de la périodicité de l'amas, il se répètera un par dessus l'autre en hauteur, mais en diagonale sur les cotés (voir la figure 31). Dans ce cas ci, on ne veut pas répéter l'amas directement à gauche et à droite, car les densités de spins sur les sites se répètent avec la périodicité de l'amas, ce qui entraînerait que les densités de spins seraient les mêmes à chaque quatre sites à l'horizontale. Ainsi, l'ordre de rayure serait impossible à obtenir, mais en décalant l'amas d'un site à la verticale, on utilise le comportement antiferromagnétique vertical pour inverser le sens des densités de spin, ce qui permet désormais de sonder correctement l'ordre de rayure.

Sur ce modèle, on voudrait aussi analyser le comportement antiferromagnétique en guise de comparaison avec l'ordre de rayure. Cependant, le modèle précédemment défini (figure 31) ne convient pas pour traiter l'antiferromagnétisme, car l'antiferromagnétisme ne voit pas sa densité de spin s'inverser à chaque quatre sites. Donc, dans le cas de l'antiferromagnétisme, il faudra utiliser un second modèle où les amas se répèteront à l'horizontale (tel que présenté à la figure 32).

Même si on utilisera deux modèles différents pour comparer les deux ordres, la comparaison devrait être relativement convenable, car les modèles sont presque identiques et devraient fournir des résultats similaires (par exemple, la densité électronique sera sensiblement la même pour un même potentiel chimique).

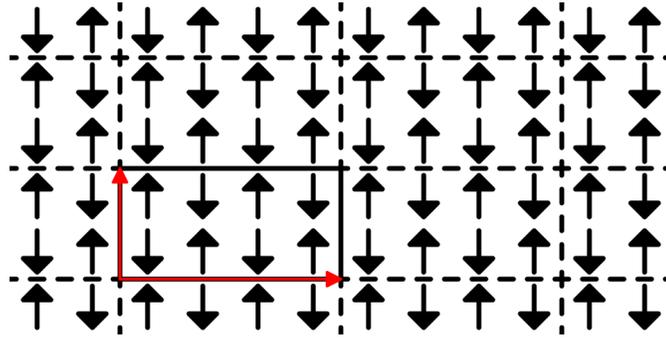


FIGURE 32 Modèle à un amas que nous utiliserons en VCA pour traiter l'ordre antiferromagnétique (dont la densité de spin attendue est présentée sur les sites du modèle). La maille élémentaire est entourée d'un trait plein et les vecteurs de base des amas sont représentés par les flèches rouges.

A.1 Champs de Weiss utilisés

On doit maintenant se définir un champ de Weiss pour analyser l'ordre de rayure. Pour le moment, nous allons définir ce champ de Weiss pour représenter seulement sa partie en ordre de spin sans faire intervenir l'ordre de charge et les colonnes de trous. L'ordre de spin sera encodé de la manière présentée à la figure 33 qui est basée sur une représentation très schématique de l'ordre de rayure présentée avec des spins de même amplitude.

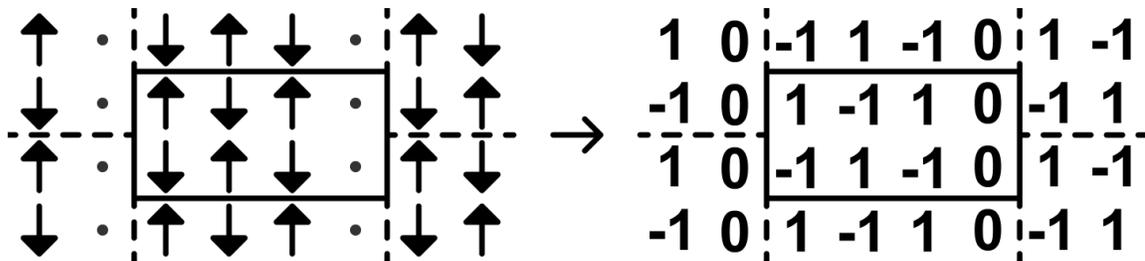


FIGURE 33 Schéma des spins dans l'ordre de rayure et champ de Weiss correspondant dans le modèle à un amas qui lui est associé (figure 31).

Nous effectuerons aussi des calculs avec les champs de Weiss de l'ordre antiferromagnétique et supraconducteur de type $d_{x^2+y^2}$ (car l'YBCO engendre une supraconductivité de type D) décrits dans la théorie (équations 1.32 et 1.33). Ces champs de Weiss nous permettront de comparer ces solutions à celle du champ de Weiss de l'ordre de rayure.

A.2 Résultats des cartes

En utilisant la méthode de cartographie introduite à la section 2.6, nous avons effectué une carte présentée à la figure 34 montrant les possibilités de solutions pour le champ de Weiss de l'ordre de rayure. Cette figure nous montre qu'on a à la fois des solutions qui minimisent ou qui maximisent Ω , ce qui est très encourageant pour la suite.

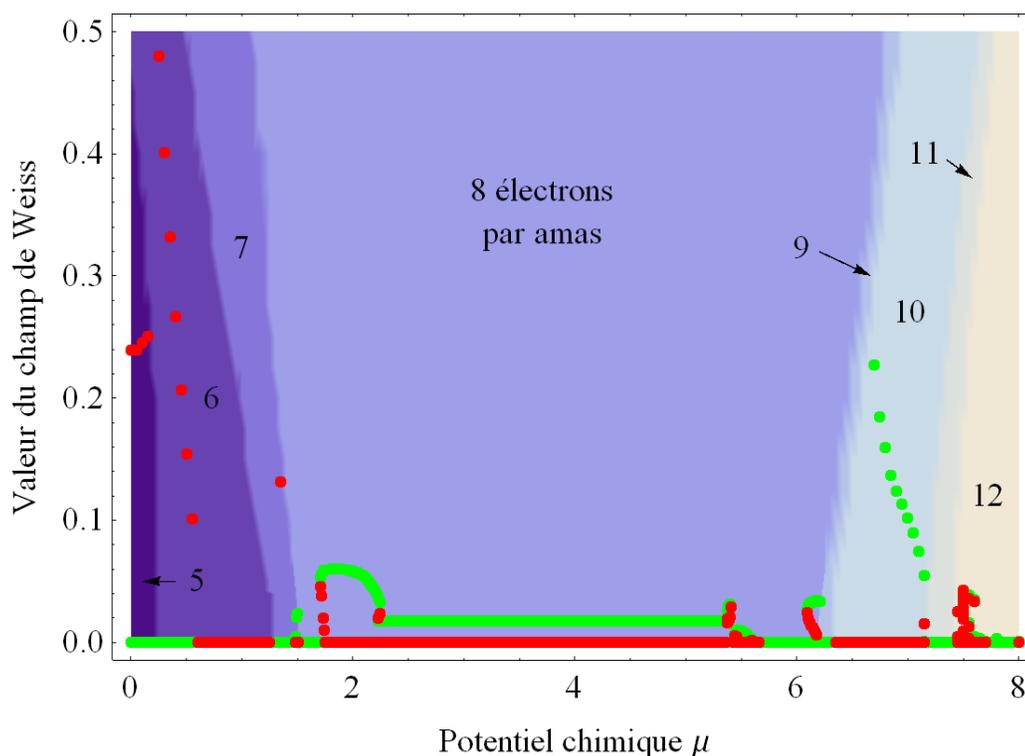


FIGURE 34 Carte étendue des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω en fonction du champ de Weiss de l'ordre de rayure. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres correspondant à l'YBCO du modèle de Hubbard. Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques.

Parmi les solutions détectées, celles qui nous intéresseront le plus sont celles qui minimisent Ω (tracées en vert sur les cartes) conformément à la logique expliquée à la section 2.3. Entre $\mu = 2.25$ et $\mu = 5.35$, les solutions en vert forment un plateau où la valeur du champ de Weiss est constante. Il s'agit en fait de la solution au demi-remplissage où la densité électronique est constante et vaut 1 (1 électron par site). Le fait que cette solution soit non-nulle nous indique que l'ordre de rayure sera présent au demi-remplissage. À gauche de ce plateau, ou autrement dit, pour de plus petites valeurs de μ , nous obtenons des solutions dopées en trous qui nous intéressent, car l'YBCO

est un matériau dopé en trous. Nous avons fait un agrandissement des minimums et maximums trouvés pour cette zone à la figure 35. La principale de ces solutions se situe entre $\mu = 1.7$ et $\mu = 2.25$ dans le secteur à 8 électrons. Elle est suivie d'une solution très étroite dans le secteur à 7 électrons autour à $\mu = 1.5$ qui semble être interrompue par le passage au secteur à 8 électrons. On se serait attendu à ce que la solution du secteur à 7 électrons soit plus importante que celle à 8 électrons étant donné que l'ordre de rayure devrait se produire autour d'une densité électronique de $7/8$ selon la littérature, ce qui correspond à ce secteur. Possiblement que la solution du secteur à 8 électrons est plus avantageée ici, car ce secteur permet des états où le spin total est nul, ce qui est une caractéristique importante de l'ordre de rayure.

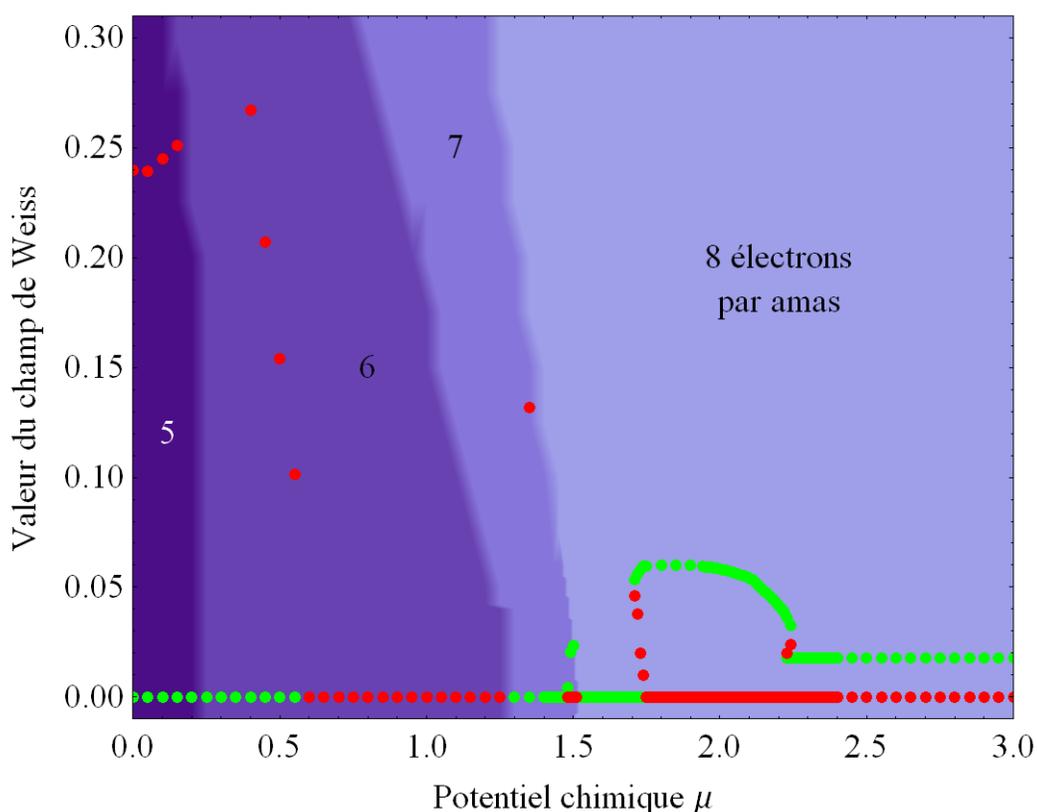


FIGURE 35 Agrandissement de la carte des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω en fonction de l'amplitude du champ de Weiss de l'ordre de rayure pour un dopage en trous. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques.

Au delà de $\mu = 5.35$, nous obtenons des solutions dopées en électrons. Techniquement ces solutions ne sont pas pertinentes, car l'YBCO que nous étudions dans le cadre de ce mémoire est un matériau strictement dopé en trous, mais elles permettront

d'entrevoir quel sera le comportement des supraconducteurs dopés en électrons. Un agrandissement sur les solutions dopées en électrons pour le secteur 8 est donné à la figure 36. On détecte sur cette carte la présence de 3 courbes de solutions qui sont séparées les unes des autres. Comme pour le côté dopé en trous, on retrouve des solutions de l'ordre de rayure pour d'autres secteurs que celui à 8 électrons, notamment dans ce cas-ci dans le secteur à 10 électrons où on détecte une solution qui minimise Ω pour de fortes valeurs du champ de Weiss, ce qui signifie probablement que l'on aura un fort paramètre d'ordre lorsqu'on le calculera.

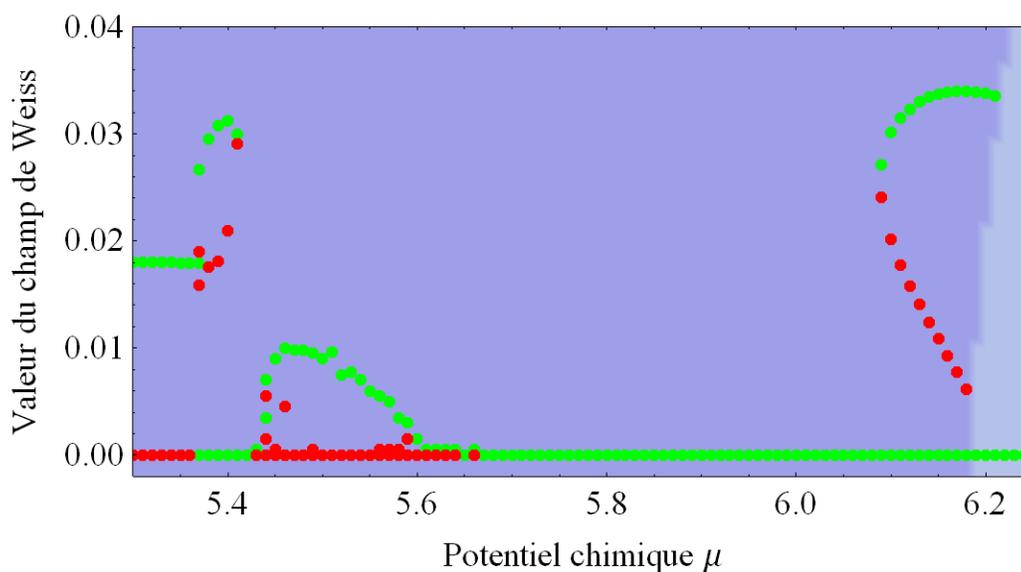


FIGURE 36 Agrandissement de la carte des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω en fonction de l'amplitude du champ de Weiss de l'ordre de rayure pour un dopage en électrons dans le secteur à 8 électrons. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques.

Nous avons aussi effectué une carte pour l'antiferromagnétisme présentée à la figure 37. Comme le champ de Weiss antiferromagnétique en est un de spin, on s'intéressera une fois de plus qu'aux solutions minimisant Ω . Parmi ces solutions, on détecte la présence d'une importante solution qui existe au demi-remplissage et diminuera par la suite autant du côté en dopé en trous qu'en électrons. Puis, on détecte une variété de solutions dans les autres secteurs qui sont généralement très étroites. Ces solutions sont possiblement parasites, car l'antiferromagnétisme devrait survenir que près du demi-remplissage (donc dans le secteur à 8 électrons). Plus tard, on pourra vérifier si elles le sont vraiment en traçant un diagramme de phase du paramètre d'ordre en fonction de la densité électronique.

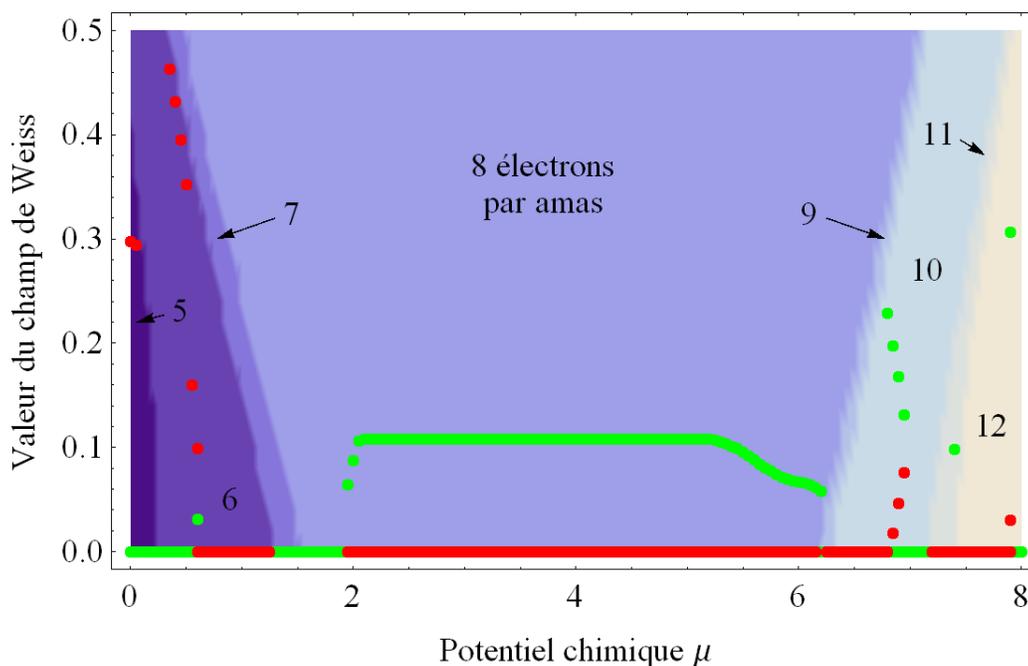


FIGURE 37 Carte des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω en fonction du champ de Weiss de l'ordre de antiferromagnétique. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 32 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques.

Finalement, nous avons réalisé une carte pour le champ de Weiss supraconducteur de type $d_{x^2+y^2}$ (figure 38). Dans ce cas ci, seulement deux secteurs sont accessibles. En fait, il ne s'agit plus de secteurs ici, mais de groupes de secteurs, car en introduisant la supraconductivité, nous devons tenir compte non seulement du secteur lui-même, mais de tous les secteurs possédant le même spin total (vu que l'appariement des paires de Cooper introduit des opérateurs qui lient ces secteurs entre eux). Ce qui apparaît très étrange à première vue est que de chaque côté du demi-remplissage (la ligne de solutions nulles au milieu de la figure) il y aurait deux dômes supraconducteurs. À la figure 39, on y montre un agrandissement des dômes du côté en trous pour mieux apprécier le détail. On s'attend évidemment à en avoir qu'un seul de chaque côté, mais comme on ne connaît pas encore les densités électroniques des solutions, il est possible que les dômes se superposent pour n'en former qu'un seul de chaque côté. Ce sera à vérifier dans la prochaine section. De plus, on observe qu'il y aurait une autre possibilité de solution du côté dopée en électrons qui est très forte en fonction de la valeur du champ de Weiss (soit environ 10 fois la valeur habituelle de la valeur du champ de Weiss) ce qui semble être un peu aberrant. Mais, une fois de plus, en traçant les paramètres d'ordre, on pourra vérifier si cette solution fait du sens physiquement.

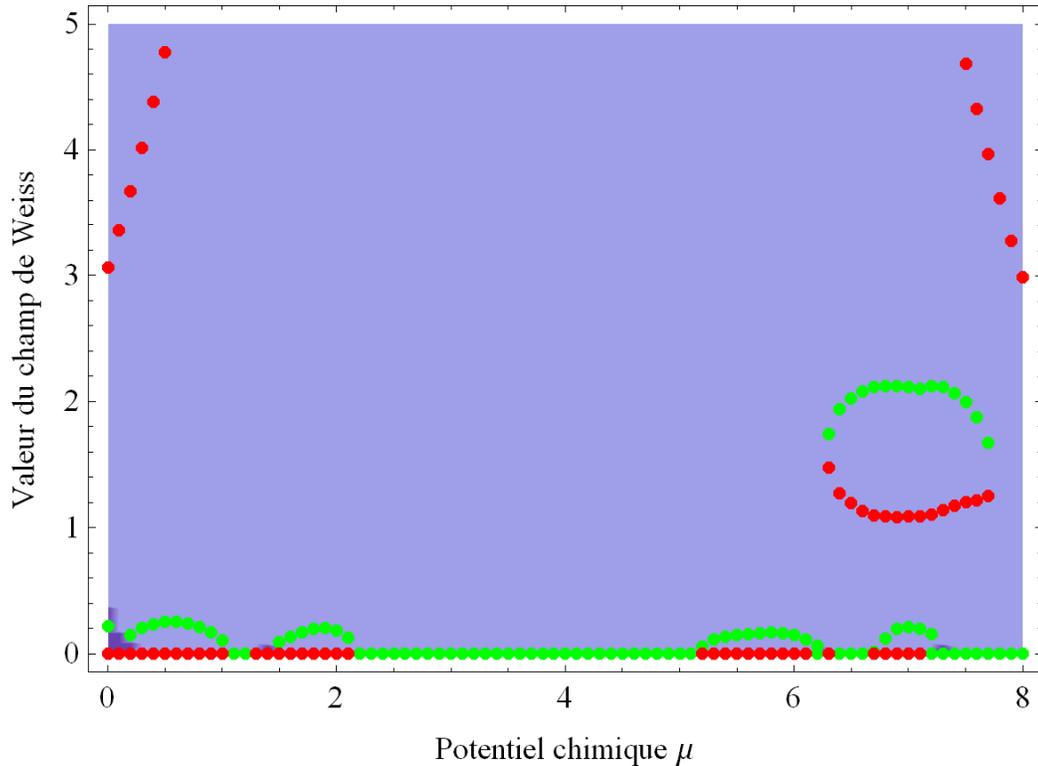


FIGURE 38 Carte des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω en fonction du champ de Weiss supraconducteur de type $d_{x^2+y^2}$. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres correspondant à l'YBCO du modèle de Hubbard. Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques de même spin total.

A.3 Graphiques des paramètres d'ordre

Maintenant que la méthode de cartographie nous a permis de connaître l'endroit où se trouvent les solutions pour les différents ordres, on peut facilement effectuer les calculs de VCA en balayant en fonction du potentiel chimique à l'aide de la position des minimums trouvés. Cela nous permet de produire le diagramme de phase pour les champs de Weiss présenté à la figure 40 à l'aide des mesures des paramètres d'ordre et de la densité électronique.

Concernant le paramètre d'ordre de l'ordre de rayure, on obtient un maximum autour d'une densité de 0.95 pour la solution correspondant au secteur à 8 électrons. Par contre, en se fiant à la littérature, on se serait plutôt attendu à ce que ce maximum se situe autour d'une densité de 7/8. On obtient plutôt la solution correspondante au secteur à 7 électrons qui s'avère être très faible et très étroite en densité électronique. Quant au champ de Weiss antiferromagnétique, on observe le comportement attendu

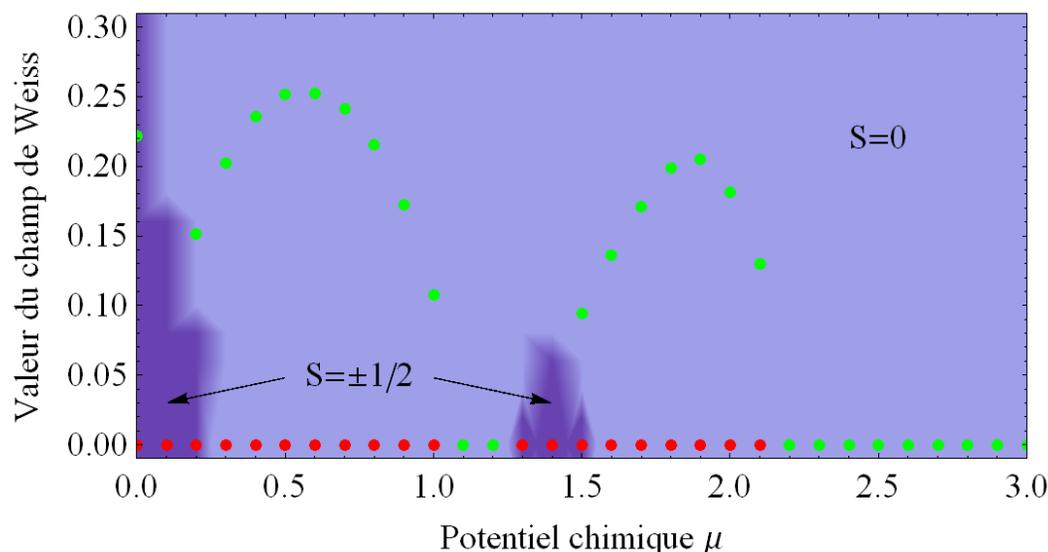


FIGURE 39 Agrandissement de la carte des minimums (points verts) et des maximums (points rouges) de Ω en fonction du champ de Weiss supraconducteur de type $d_{x^2+y^2}$ pour un dopage en trous. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Les couleurs de fond de la carte servent à distinguer les secteurs électroniques de même spin total.

qui est d'être très fort au demi-remplissage pour diminuer graduellement, mais sans devenir nulle. L'interruption de la solution du côté dopé en trous est due au fait que le minimum que la VCA suivait dans son balayage a l'allure d'un creux dans la courbe de Ω en fonction du paramètre du champ de Weiss et ce creux s'est progressivement dissipé jusqu'à devenir un point de selle. Passé ce point, le minimum disparaît, ce qui fait que la VCA ne peut plus converger à cet endroit, ce qui lui laisse comme seule possibilité de convergence la solution nulle où on a une absence d'antiferromagnétisme. Pour le côté dopé en électron, en se fiant à la carte de la figure 37, la solution se termine en même temps que le secteur à 8 électrons dans lequel il se trouve, ce qui ne lui permet pas de tomber graduellement à zéro. Au niveau des solutions qu'on a précédemment qualifiées de parasites pour l'antiferromagnétisme, celles du côté dopé en électrons semblent plus ou moins prolonger la solution du secteur à 8 électrons tandis que le petit segment de solution se trouvant à une densité de 0.75, qui correspond au secteur à 6 électrons ne semble vraiment pas avoir sa place. Dans nos futurs calculs, on évitera donc de calculer ce segment de solution.

Finalement, pour le champ de Weiss supraconducteur, on retrouve les deux paires de dômes supraconducteurs qu'on avait trouvé en effectuant la carte du champ de Weiss (figure 38). Le fait d'avoir cette surabondance de dômes supraconducteurs vient en contradiction avec le diagramme de phase habituel qui est d'avoir un seul dôme

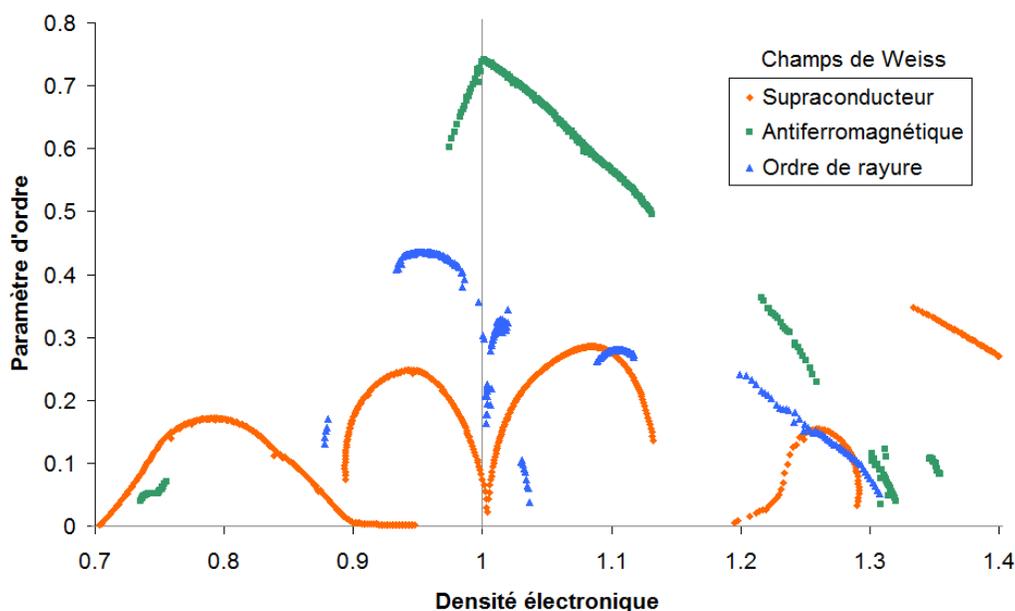


FIGURE 40 Graphique du paramètre d'ordre des différents champs de Weiss testés en VCA avec les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard. Les modèles à un amas ont été utilisés (le modèle de la figure 31 pour l'ordre de rayure et la supraconductivité et le modèle de la figure 32 pour l'antiferromagnétisme). Le demi-remplissage correspond à une densité électronique de 1 (électron par site) et les parties dopées en trous et en électrons se situent respectivement avant et après cette densité.

supraconducteur de chaque côté du demi-remplissage. Une hypothèse pour expliquer cette observation est que, de chaque côté, les deux dômes existent, mais qu'ils devraient être beaucoup plus rapprochés en densité pour se confondre entre eux et n'en former qu'un seul. Cette hypothèse a déjà été émise auparavant pour expliquer l'allure non symétrique des dômes supraconducteurs [8]. Aussi, il se peut que le doublement des dômes soit dû à un artifice provenant des secteurs électroniques. Même si tous les dômes sont dans la même zone où les secteurs ont un spin total nul, il faut tout de même remarquer à la figure 38 que les deux dômes se situent vis-à-vis les anciens secteurs à 6 et à 8 électrons que l'on obtenait avec les champs de Weiss de spin (voir 34 et 37 à titre de comparaison). Probablement que le dôme à 6 électrons tente de reproduire le dôme du secteur à 8 électrons, mais en utilisant principalement des états à 6 électrons, ce qui provoque des différences notables. Quant à la solution supraconductrice à forte valeur de champ de Weiss qu'on avait trouvée précédemment pour le côté dopé en électrons, la solution se situe loin du demi-remplissage autour d'une densité de 1.4 et

à une amplitude modérée en terme de paramètre d'ordre. Nous aurions tendance à considérer ce segment de solution invalide à cause de sa densité électronique éloignée et de ses valeurs inhabituellement fortes du champ de Weiss.

En se fiant uniquement à la grandeur des paramètres d'ordre pour comparer les solutions des différents champs de Weiss, l'ordre de rayure semble être la meilleure solution entre la solution antiferromagnétique et la solution supraconductrice autour d'une densité électronique de 0.95. Ce résultat est fort encourageant, car il suggère que l'ordre de rayure peut vraisemblablement exister dans le matériau. Notons que ce n'est pas une méthode rigoureuse pour déterminer quelle solution est la plus favorable, mais ça nous donne tout de même une idée générale de la situation, ce qui est amplement suffisant pour le moment.

A.4 Conclusion

On obtient des résultats forts intéressants : en particulier, on montre que l'ordre de rayure peut exister et qu'elle est potentiellement la solution dominante à une densité électronique de 0.95. Cependant, la technique utilisée est très (voire trop) simpliste. Par exemple, pour l'ordre de rayure, on néglige l'ordre de charge des colonnes de trous. Logiquement, la prochaine étape sera d'ajouter cet ordre de charge comme champ de Weiss ou du moins de le mesurer (au cas où le champ de Weiss de spin provoque des colonnes de trous sans l'intervention d'un champ de Weiss de charge). Aussi, non seulement pour l'ordre de rayure, mais pour l'antiferromagnétisme et la supraconductivité, il faudrait aussi utiliser un champ de Weiss pour varier la charge globale, ce qui permettra, en l'ajoutant comme paramètre variationnel, d'obtenir des densités électroniques mieux adaptées au potentiel chimique qu'on impose et ainsi améliorer la justesse de nos résultats.

B Résultats de VCA avec champs de Weiss de charge

Dans l'objectif d'améliorer les résultats de la section précédente, nous allons recalculer le diagramme de phase, mais en incluant des champs de Weiss de charge pour ajouter des degrés de liberté de plus et ainsi augmenter la qualité des résultats. Aussi, on tiendra compte des colonnes de trous pour l'ordre de rayure. Ainsi, les résultats seront de meilleure qualité et risquent d'être plus fidèles à la réalité.

B.1 Modèles et champs de Weiss utilisés

On utilisera les mêmes modèles que précédemment, soit le modèle à un amas avec un décalage pour l'ordre de rayure et la supraconductivité (figure 31) et le modèle à un amas non-décalé pour l'antiferromagnétisme (figure 32).

Les champs de Weiss seront aussi les mêmes qu'utilisés précédemment, mais avec l'addition d'un champ de Weiss de charge globale et d'un champ de Weiss qui recréera les colonnes de trous. Le champ de Weiss de la charge globale sera encodé pour modifier la charge des sites de manière égale sur tous les sites de l'amas. Quant au champ de Weiss des colonnes de trous, il sera défini pour enlever des charges sur la troisième colonne (car on a précédemment défini que la colonne de trous se situait à cet endroit dans notre champ de Weiss de spin) et les répartir également sur les autres colonnes. De cette manière, comme ce champ de Weiss ne modifiera pas la charge totale, il n'interférera pas avec le champ de Weiss de la charge globale, ce qui facilitera le travail de la méthode d'optimisation utilisée avec la VCA. La force de ces deux champs de Weiss sur les charges des sites est illustrée à la figure 41.

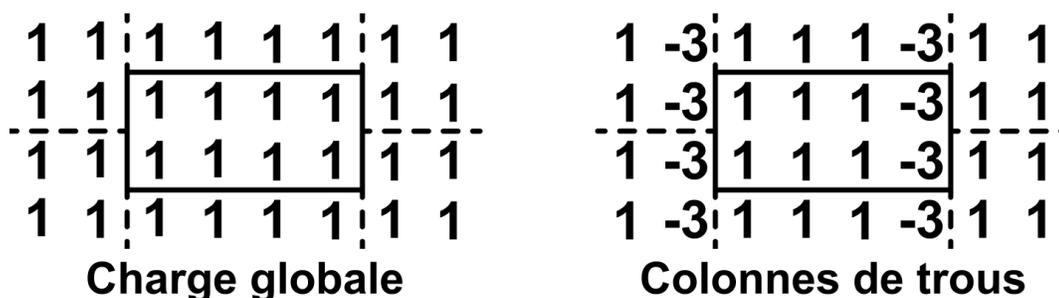


FIGURE 41 Schémas des champs de Weiss de charge utilisés dans le modèle à un amas pour l'ordre de rayure (figure 31). Concernant le champ de Weiss des colonnes de trous, les -3 servent à conserver la quantité de charge sur les amas dans le but d'interférer le moins possible avec le champ de Weiss de charge globale.

Pour le champ de Weiss représentant les colonnes de trous dans l'ordre de rayure, une question se pose : comment le faire varier avec l'ordre de spin ? On pourrait, par exemple, les faire varier simultanément, c'est à dire que lorsqu'on augmente le champ de Weiss de spin, le champ de Weiss de charge augmentera dans la même proportion. Par contre, on ne connaît pas le facteur qui relie les deux champs de Weiss, donc nous allons plutôt faire varier les deux champs de Weiss indépendamment. Si un facteur multiplicatif relie les champs, il apparaîtra très clairement dans nos données et on pourra l'utiliser par la suite pour faire varier les deux champs de Weiss simultanément.

B.2 Résultats des cartes

En incluant le champ de Weiss de charge globale, on obtient les cartes des figures 42, 43 et 44 respectivement pour l'ordre de rayure, l'antiferromagnétisme et le champ supraconducteur. Nous avons réalisé ces cartes pour des valeurs de μ se situant avant le demi-remplissage qui sont devant nous donner des solutions dopées en trous. Comme aux cartes de la section précédente, on trace les solutions trouvées en fonction de μ et du paramètre du champ de Weiss analysé. La valeur du champ de Weiss de charge globale n'y est pas présentée même si on estime tout de même sa valeur qui optimise Ω .

Premièrement, la carte de l'ordre de rayure (figure 42) nous indique que trois secteurs sont possibles pour les valeurs de μ testées dont une large solution avec le secteur à 8 électrons qui part du demi-remplissage jusqu'à de basses valeurs de μ de 0.5. Si on compare avec la carte de la section précédente avec le champ de Weiss de l'ordre de rayure seul (figure 35), on constate que la présence du champ de Weiss de charge globale a un grand impact sur les solutions : elle élargit les solutions sur de plus grandes gammes de μ et elle permet de faire apparaître des solutions qui étaient complètement ou partiellement cachées auparavant. Notons que pour cette carte, nous n'y avons pas inclus le champ de Weiss de charge des colonnes de trous. C'est que nous nous sommes rendu compte, en effectuant quelques balayages simples, que la valeur idéale de ce champ de Weiss se situe près de zéro. Ce faisant, il ne devrait pas avoir un effet énorme sur la solution et la position des autres paramètres variationnels. Cela nous permet de ne pas l'inclure dans la méthode de cartographie et de réduire grandement la quantité de valeur de Ω à calculer.

Pour l'antiferromagnétisme à la figure 43, on a obtenu seulement une solution dans le secteur à 8 électrons. Cette solution est semblable à celle qu'on a obtenue dans la précédente carte effectuée pour l'antiferromagnétisme (figure 37) à l'exception que la chute de l'antiferromagnétisme se fait sur une plus grande plage de valeurs de μ .

Concernant le champ de Weiss supraconducteur dont la carte est présentée à la figure 44, on obtient un dôme dans la partie dopée en trous qui s'étire sur une grande plage de valeurs de μ . Le fait d'incorporer le champ de Weiss de charge globale semble donc régler le problème qu'on obtenait précédemment, qui était d'avoir un doublement des dômes supraconducteur. On remarque aussi qu'il semble y avoir une discontinuité de la solution autour de $\mu = 0.5$. On verra plus tard dans les graphiques des paramètres d'ordre s'il s'agit vraiment d'une discontinuité.

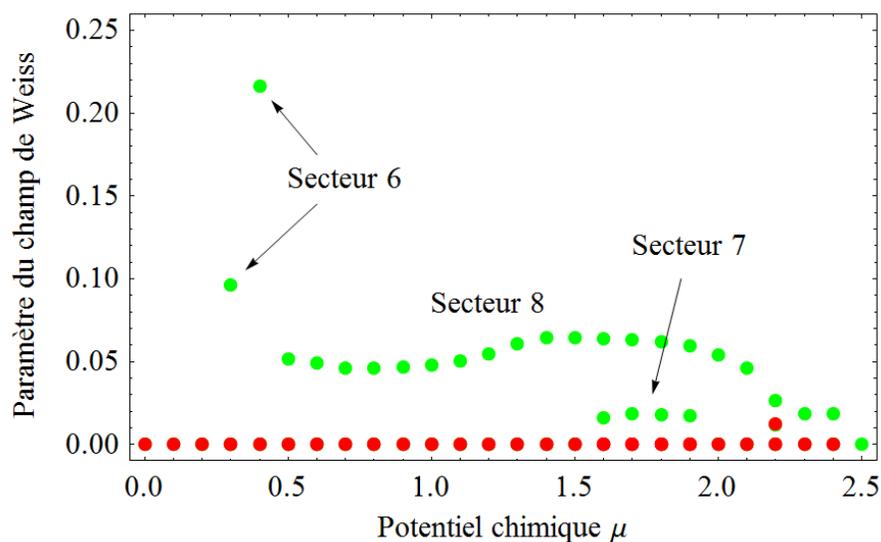


FIGURE 42 Carte des minimums (en vert) et des maximums (en rouge) pour le champ de Weiss de l'ordre de rayure en présence d'un champ de Weiss de charge globale. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO.

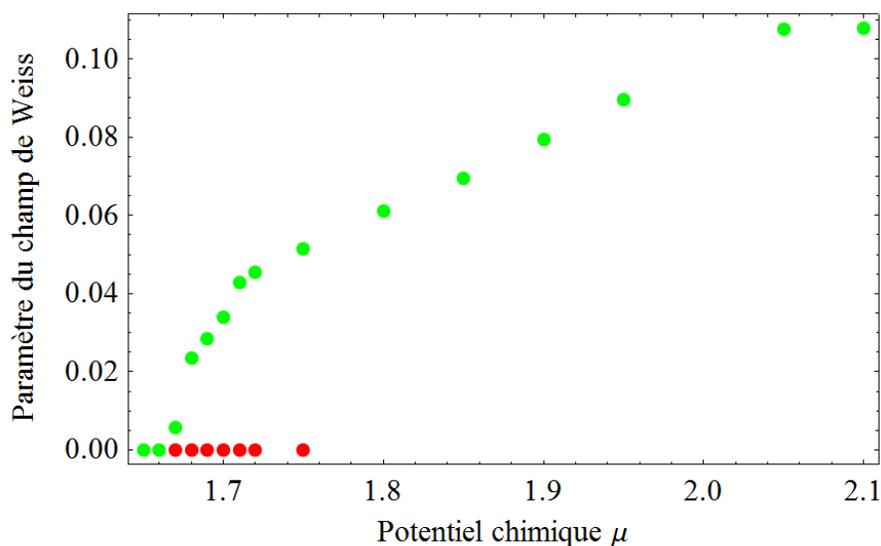


FIGURE 43 Carte des minimums (en vert) et des maximums (en rouge) pour le champ de Weiss de l'antiferromagnétisme en présence d'un champ de Weiss de charge globale. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 32 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO.

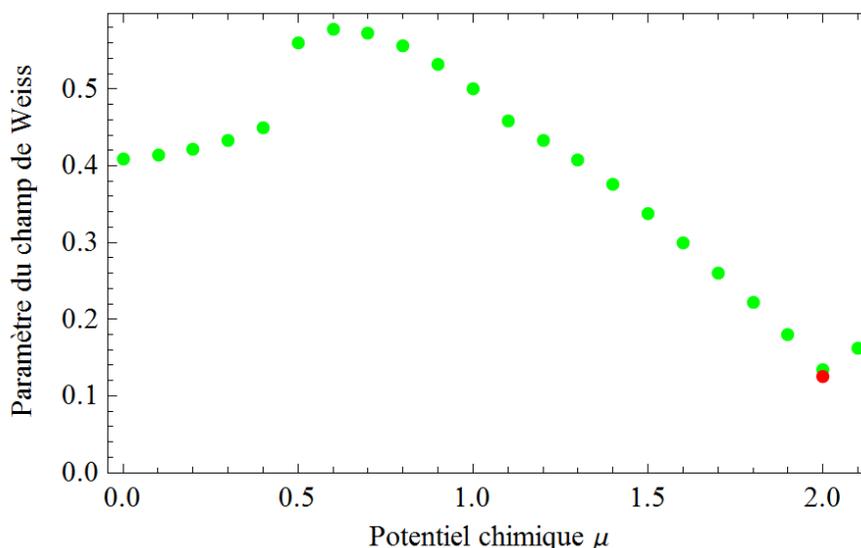


FIGURE 44 Carte des minimums (en vert) et des maximums (en rouge) pour le champ de Weiss supraconducteur en présence d'un champ de Weiss de charge globale. Ces résultats ont été obtenus pour le modèle à un amas de la figure 31 pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO.

B.3 Graphiques du paramètres d'ordre

Pour l'ordre de rayure en présence du champ de Weiss de charge globale, on obtient le graphique de la figure 45 qui contient à la fois les résultats des solutions avec et sans champ de Weiss de charge pour la colonne de trous. La solution pour le secteur à 8 électrons par amas est beaucoup plus étirée que précédemment en densité, ce qui avait été détecté indirectement dans les cartes. Les solutions avec le champ de Weiss de colonnes de trous donnent des résultats très similaires par rapport aux résultats sans le champ de Weiss de colonnes de trous. Cependant, il a été difficile d'obtenir une solution pour le secteur à 7 électrons par amas avec le champ de Weiss de colonnes de trous, les calculs avaient tendance à diverger.

Rappelons une fois de plus qu'on s'attend selon la littérature à obtenir un maximum de l'ordre de rayure autour du remplissage $7/8$ (ou en dopage à 0.125) et ce n'est toujours pas le cas lorsqu'on observe le paramètre d'ordre pour le champ de Weiss de spin. Le maximum se situe plutôt autour de 0.075. Cependant, on observe un léger "kink" ou plutôt une discontinuité de la dérivée première autour du dopage de 0.12. Si, par contre, on trace le paramètre d'ordre du champ de Weiss de charge pour les colonnes des trous, on obtient un maximum à cet endroit tel que montré à la figure 46, ce qui appuierait la théorie du remplissage $7/8$.

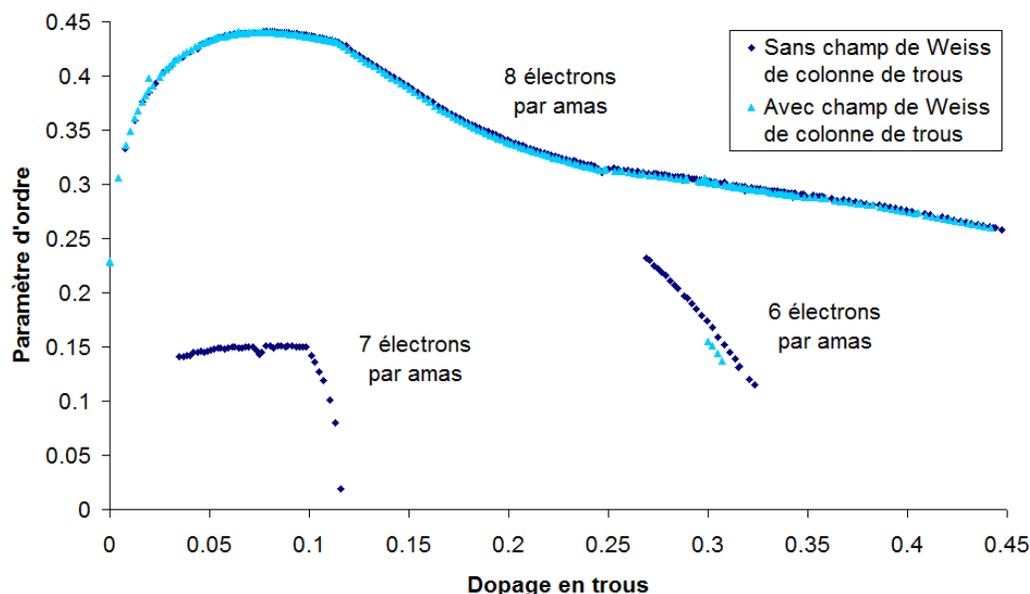


FIGURE 45 Graphique du paramètre d'ordre du champ de Weiss de spin pour l'ordre de rayure avec un champ de Weiss de charge globale avec ou sans la présence du champ de Weiss de charge de la colonne de trous. Les solutions ont été obtenues en VCA avec le modèle à un amas associé à l'ordre de rayure pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO.

On devait aussi vérifier en effectuant les balayages si les paramètres des deux champs de Weiss de l'ordre de rayure étaient reliés un facteur multiplicatif. Le graphique à la figure 47 donne les paramètres des deux champs de Weiss en fonction du dopage en trous et nous montre que les deux paramètres ne sont pas proportionnels. C'est le cas en particulier à faible dopage, zone qui nous intéresse, où le champ de Weiss de spin varie peu tandis que celui de charge descend constamment. Donc, il ne semble pas possible pour les tests suivants de relier les deux champs de Weiss par un facteur multiplicatif, il faudra donc continuer à les faire varier indépendamment.

Pour l'antiferromagnétisme et la supraconductivité, les paramètres d'ordre obtenus sont illustrés à la figure 48. La solution antiferromagnétique possède une solution dans le secteur à 8 électrons où le paramètre d'ordre agit comme on s'y attend, il débute en force au demi-remplissage et tombe progressivement vers 0. En effectuant des tests avec les anciennes solutions situées dans le secteur à 6 électrons par amas, on a pu obtenir des solutions dans ce secteur en y ajoutant le champ de Weiss de charge globale. Nous n'avions pas détecté ces solutions dans la carte de l'antiferromagnétisme (figure 43) car nous avons réduit les fenêtres des valeurs des champs de Weiss et de μ , ce qui n'empêchait de voir les solutions à 6 électrons par amas. Le comportement de la solution pour le secteur à 6 électrons n'est pas compatible avec le comportement attendu,

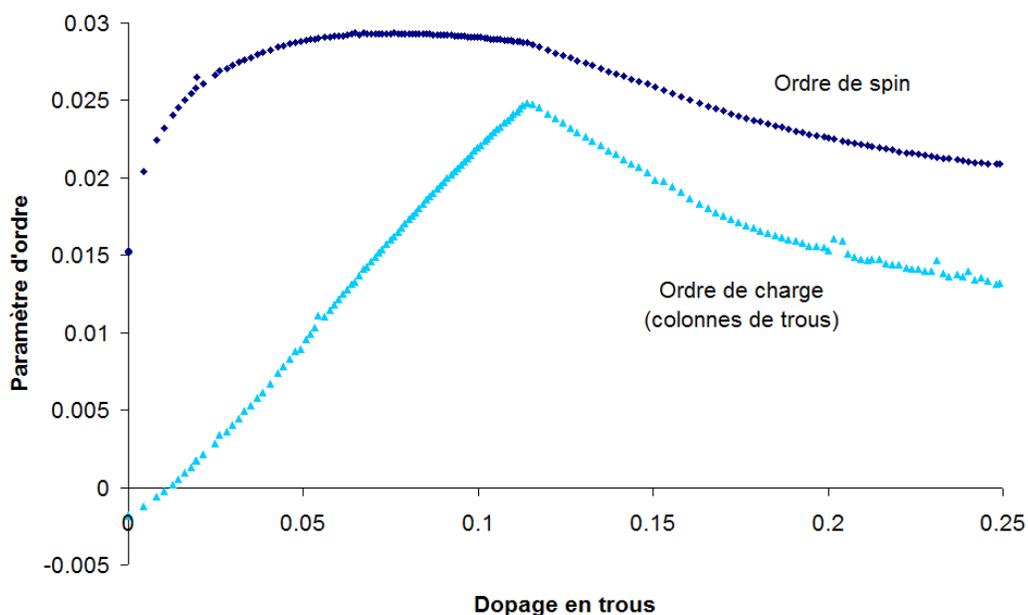


FIGURE 46 Graphique des paramètres d'ordre du champ de Weiss de spin pour l'ordre de rayure et du champ de Weiss de charge de la colonne de trous. Ces paramètres d'ordre sont issus de calculs de VCA utilisant le modèle à un amas associé à l'ordre de rayure pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO.

le paramètre d'ordre va très loin en dopage sans tomber à 0. Aussi, cette solution est présente près du demi-remplissage, ce qui fait peu de sens. On va donc, pour la suite des choses, se concentrer uniquement sur les solutions à 8 électrons par amas pour s'assurer d'avoir des résultats les plus fidèles à la réalité.

Quant au champ de Weiss supraconducteur, on obtient un dôme supraconducteur qui commence dès le demi-remplissage, possède un maximum autour d'un dopage en trous de 0.3 et continue loin en dopage. Le problème qu'on obtenait précédemment où on avait un doublement du dôme supraconducteur des deux côtés du demi-remplissage (figure 38) ne semble plus avoir lieu avec la présence du champ de Weiss de charge globale. Cependant, un autre problème survient, si on compare la solution obtenue au diagramme de phase habituel de l'YBCO (figure 2), on remarque que la solution du champ de Weiss supraconducteur ainsi que la solution antiferromagnétique (pour le secteur à 8 électrons) vont beaucoup plus loin en dopage que prévu par un facteur 2 environ. Ce semble être dû au champ de Weiss de charge globale qui semble avoir comme effet d'étirer les solutions en dopage, car on n'avait pas ce problème sans le champ de Weiss de charge globale (voir figure 40).

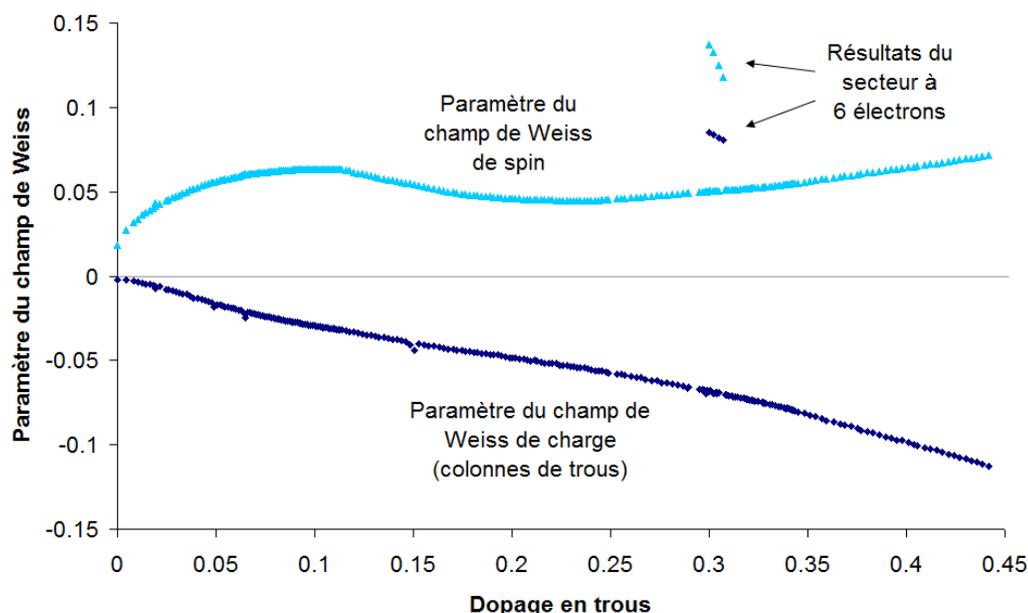


FIGURE 47 Graphique des valeurs des champs de Weiss de spin et de charge pour l'ordre de rayure. Ces valeurs sont celles qui ont fait converger les calculs de VCA utilisant le modèle à un amas associé à l'ordre de rayure pour les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO.

B.4 Comparaison des solutions obtenues

Le graphique des paramètres d'ordre (figure 48) semble confirmer que la solution de l'ordre de rayure est présente entre la phase antiferromagnétique et le dôme supraconducteur (si on néglige la présence de la solution du secteur à 6 électrons de l'antiferromagnétisme). Pour avoir plus de certitude sur cette affirmation, nous allons comparer l'énergie interne des solutions à la figure 49. Ce graphique nous permet de déterminer que le passage de l'antiferromagnétisme à l'ordre de rayure se situe à la fin de l'antiferromagnétisme à un dopage de 0.085 et que le passage de l'ordre de rayure à la supraconductivité se produit à un dopage de 0.114. À partir de ces informations, on peut sélectionner uniquement les solutions les plus favorables dans le graphique des paramètres d'ordre, ce qui donne la figure 50.

On remarque cependant un problème qui survient dans le graphique de l'énergie interne (figure 49). La solution antiferromagnétique est la plus favorable pour toutes les valeurs de dopage, ce qui semble être correct a priori, mais démontre en fait une faille de logique. C'est que lorsque qu'un champ de Weiss est faible comme c'est le cas à la fin de la solution antiferromagnétique, la valeur de Ω , de son énergie interne et de sa densité électronique seront très semblable à une situation où le champ de Weiss est

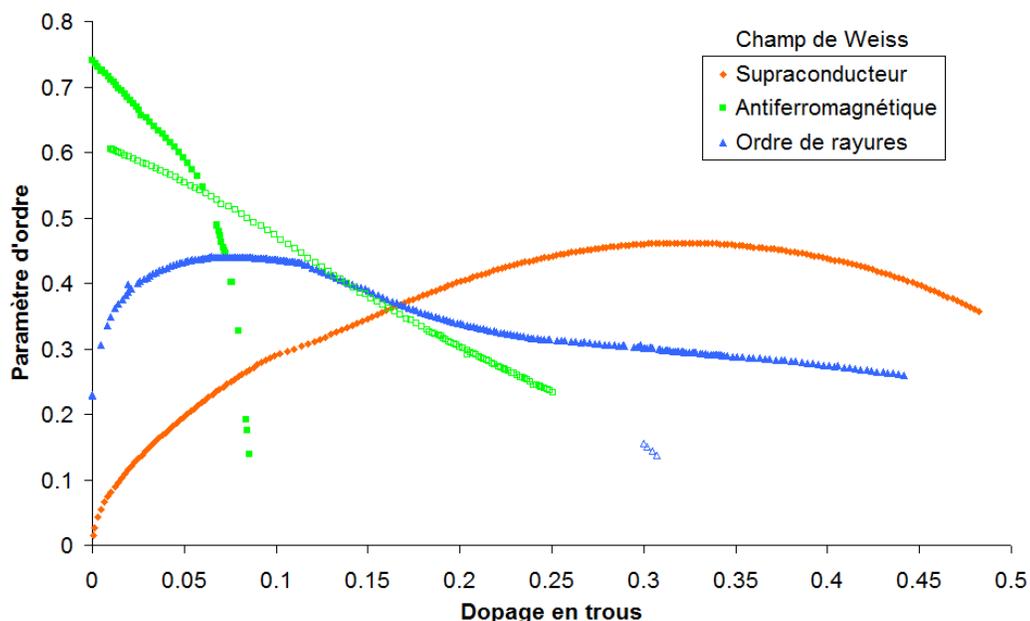


FIGURE 48 Graphique du paramètre d'ordre des champs de Weiss testés en VCA avec un champ de Weiss de charge globale. Ces résultats ont été obtenus en VCA avec les modèles à un amas (figures 31 et 32) avec les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Les symboles pleins correspondent au secteur à 8 électrons par amas tandis que les symboles vides correspondent au secteur à 6 électrons par amas (les deux à spin total nul). La solution utilisée pour l'ordre de rayure est celle en présence du champ de Weiss de colonne de trous.

nul. La fin de l'antiferromagnétisme devrait donc se situer au dessus des solutions de l'ordre de rayure et de la supraconductivité. Ce qui cause ce problème est en fait très simple : pour l'antiferromagnétisme nous utilisons un modèle légèrement différent de celui utilisé pour l'ordre de rayure et la supraconductivité (les vecteurs de périodicité sont différents), ce qui occasionne des différences dans les valeurs obtenues de l'énergie interne. Pour bien comparer les solutions, il faudra donc utiliser le même modèle pour toutes les solutions.

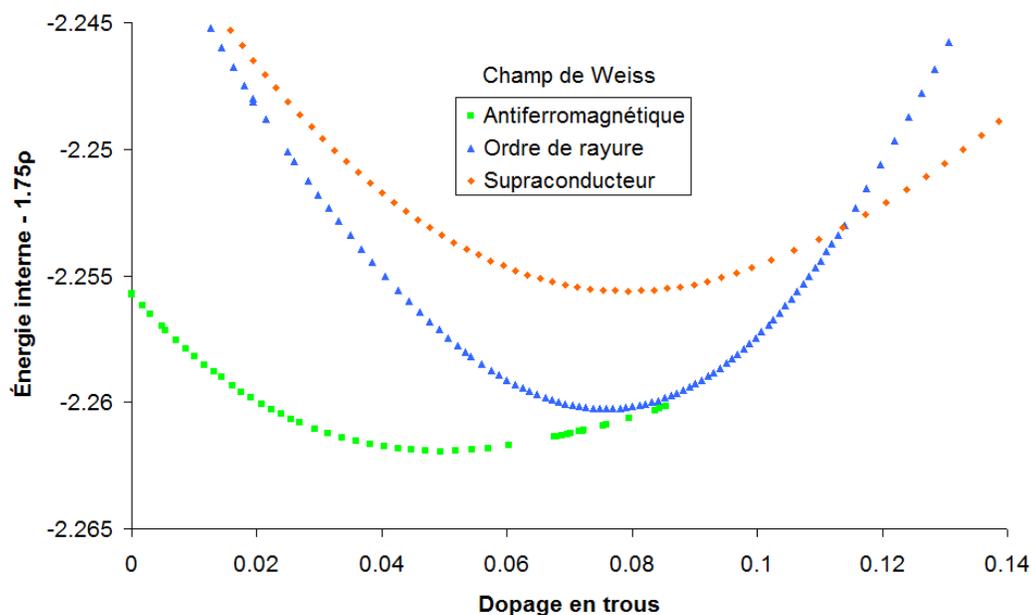


FIGURE 49 Graphique des énergies internes pour les différentes solutions en fonction du dopage en trous. Les solutions ont été obtenues en utilisant la VCA pour les modèles à un amas des figures 31 (pour l'ordre de rayure et la supraconductivité) et 32 (pour l'antiferromagnétisme) avec les paramètres du modèle de Hubbard correspondant à l'YBCO. Nous avons redressé les courbes avec un terme dépendant linéairement de la densité électronique.

B.5 Conclusion

Nous avons observé que le champ de Weiss de charge globale a un impact important sur les solutions obtenues sans nécessairement changer la forme générale des solutions. Quant au champ de Weiss de charge des colonnes de trous pour l'ordre de rayure, son impact est moins prononcé et il doit être varié indépendamment du champ de spin. À priori, ces deux champs de Weiss sont nécessaires pour avoir les résultats les plus fiables possible et c'est pourquoi on les utilisera par la suite. Cependant, on pourrait émettre des doutes sur la capacité de la VCA à bien traiter ces champs de Weiss, car on voit certains défauts apparaître tels que l'étirement exagéré des solutions ainsi que la surestimation des dopages.

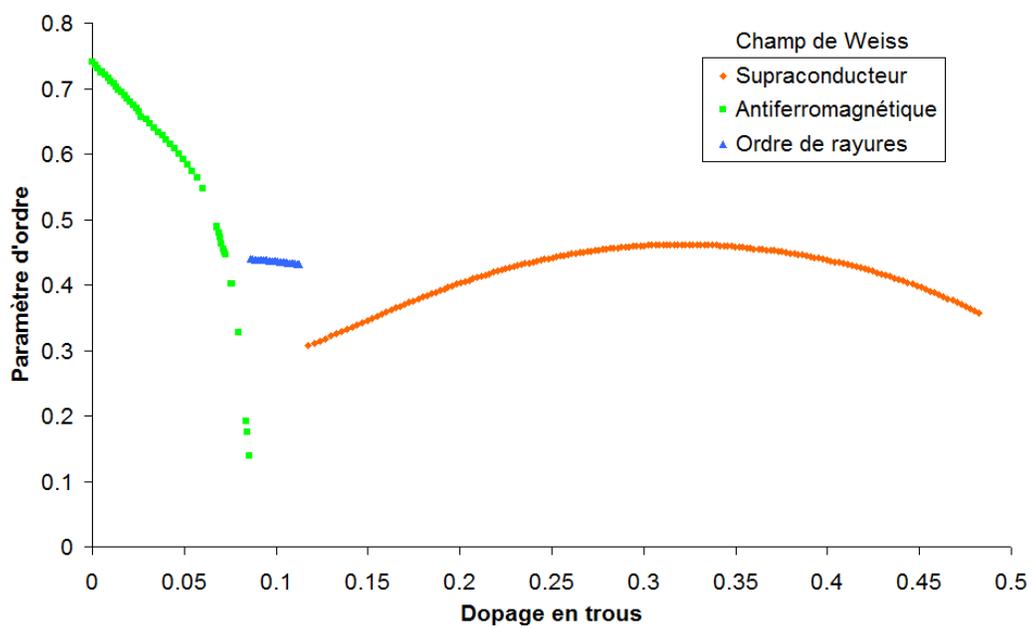


FIGURE 50 Graphique du paramètre d'ordre des solutions en présence du champ de Weiss de charge globale où on a sélectionné sur le graphique 48 les solutions les plus favorables selon la méthode de comparaison par l'énergie interne.

C Résultats de VCA avec une coexistence des champs de Weiss

Dans cette section, nous allons définir un modèle unique capable de traiter autant l'antiferromagnétisme que l'ordre de rayure, ce qui permettra de mieux comparer ces deux solutions. De plus, étant donné que ce modèle nous le permettra désormais, nous vérifierons s'il y a une coexistence entre les champs de Weiss de l'ordre de rayure, de la supraconductivité et de l'antiferromagnétisme ou, autrement dit, si l'ordre de rayure peut survenir en même temps que l'antiferromagnétisme et la supraconductivité en faisant intervenir tous les champs de Weiss simultanément.

C.1 Modèle à deux amas

Pour que l'antiferromagnétisme et l'ordre de rayure puissent être testés sur le même modèle, il faut que les sites du super-amas puissent reproduire les deux ordres avec la même périodicité. Pour ce faire, on peut simplement prendre deux amas de 2 sites par 4 sites qu'on avait précédemment et les disposer côte-à-côte dans un super-amas comme présenté à la figure 51.

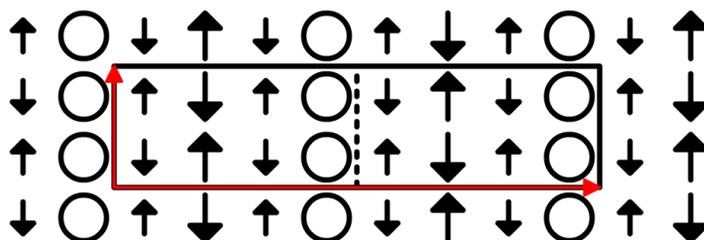


FIGURE 51 Schéma du modèle à deux amas compatible avec l'ordre de rayure (tel que présenté sur les sites du modèle) et l'antiferromagnétisme. Le super-amas est entouré d'un trait plein et se répète avec les vecteurs de base représentés par les flèches rouges.

En ce qui concerne les champs de Weiss, ce seront les mêmes que précédemment. On utilisera le champ de Weiss de charge globale en tout temps et pour le champ de Weiss de colonne de trous, on ne l'utilisera pas pour l'instant dans le but d'avoir le moins de paramètres variationnels possible, car son effet est relativement négligeable sur les résultats.

C.2 Solutions obtenues

On a pu obtenir les solutions antiferromagnétique, supraconductrice et de l'ordre de rayure à partir des résultats obtenus dans la section précédente, car les solutions devraient être très semblables. Aussi, à partir des solutions antiferromagnétique et de l'ordre de rayure nous avons ajouté la présence du champ de Weiss supraconducteur à ces deux solutions et l'avons fait varier, ce qui nous a permis de converger vers des solutions de coexistence avec la supraconductivité. Nous avons tenté de faire coexister l'ordre de rayure et l'antiferromagnétisme par la même procédure avec ou sans supraconductivité, mais sans succès. Les seules solutions qu'on obtenait, peu importe le point départ, donnaient soit un antiferromagnétisme nul ou un ordre de rayure nul. L'impossibilité d'avoir ces deux ordres en coexistence s'explique par le fait que si on superpose les deux ordres dans le super-amas, on obtient que la moitié de celui-ci aura un fort antiferromagnétisme tandis que l'autre moitié aura un antiferromagnétisme plus faible comme illustré à la figure 52, ce qui semble improbable à obtenir dans le réseau.

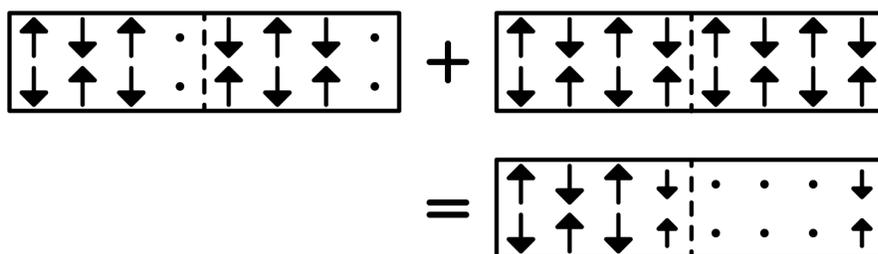


FIGURE 52 Exemple d'addition des spins des champs de Weiss de l'ordre de rayure et de l'antiferromagnétisme sur les sites du modèle à deux amas dans le cas extrême où les spins ont la même grandeur. Les points représentent les sites possédant un spin nul.

À partir des balayages obtenus pour ces solutions, on obtient le graphique des paramètres d'ordre de la figure 53. Pour les solutions sans coexistence, on obtient sensiblement les mêmes résultats que précédemment à l'exception de l'antiferromagnétisme qui ne semble pas parvenir à descendre jusqu'à 0. On avait obtenu un comportement semblable lorsqu'on effectuait des calculs sans le champ de Weiss de charge (voir figure 40). Aussi, notons que pour l'ordre de rayure, près du demi-remplissage, on obtient maintenant un plateau et non une montée comme on avait précédemment (voir figure 45).

Concernant les solutions de coexistence, pour celle de l'antiferromagnétisme et de la supraconductivité, on observe tout d'abord que près du demi-remplissage, l'antiferromagnétisme semble faire tendre la supraconductivité à 0 jusqu'au dopage de 0.016.

Puis, il semble y avoir une compétition entre les deux phases, car leurs paramètres d'ordre sont diminués par rapport à leurs solutions respectives sans coexistence. Par la suite, l'antiferromagnétisme tombe graduellement à zéro sans discontinuité et, lorsqu'il devient nul, le paramètre d'ordre supraconducteur se met à suivre la courbe supraconductrice sans coexistence. Notons que les points entre le demi-remplissage et le dopage de 0.016 ont été ajoutés manuellement à partir de la solution antiferromagnétique sans coexistence, car nous n'avons pas pu obtenir ces points par le programme utilisé (QCM) qui a beaucoup de difficulté à traiter une situation où la supraconductivité est très faible ou nulle lorsqu'on lui demande de tenir compte de celle-ci.

Finalement pour la solution de coexistence entre l'ordre de rayure et la supraconductivité, on remarque immédiatement que la présence de la supraconductivité change le comportement de l'ordre de rayure en la faisant terminer à un dopage de 0.105 au lieu qu'elle s'étire loin en dopage. Il y a visiblement une compétition entre les deux phases sur la majorité de la courbe, mais étrangement il semble aussi que les deux phases s'entraident près du demi-remplissage. Cependant, cette partie de la solution où il y a une entraide devrait être amplement surpassée par l'antiferromagnétisme.

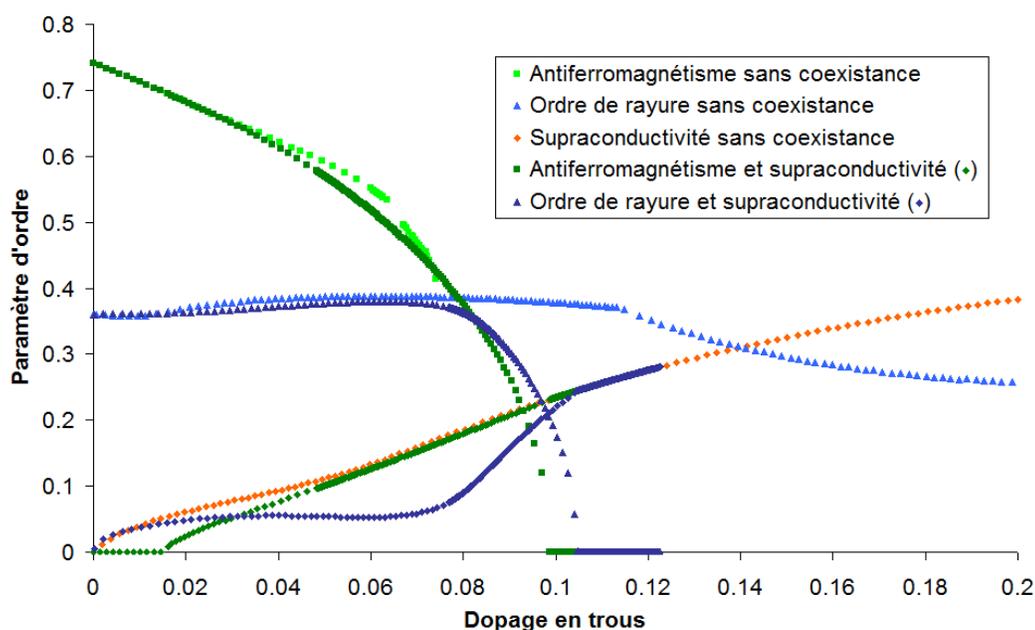


FIGURE 53 Graphique des paramètres d'ordre pour les solutions antiferromagnétique, supraconductrice et de l'ordre de rayure en VCA pour le modèle à deux amas avec et sans coexistence en utilisant les paramètres correspondant à l'YBCO pour le modèle de Hubbard. Les symboles carrés, triangles et losanges servent respectivement à indiquer les paramètres d'ordre antiferromagnétique, de l'ordre de rayure et de la supraconductivité.

C.3 Comparaison des solutions

Maintenant que notre modèle est le même pour toutes les solutions, on peut les comparer sans risque de voir des erreurs apparaître. Le graphique situé à la figure 54 permet de comparer les énergies internes des solutions. Au niveau des solutions sans coexistence, l'antiferromagnétisme est la solution la plus favorable jusqu'à un dopage de 0.062. Puis la solution de l'ordre de rayure apparaît jusqu'à un dopage de 0.089 pour laisser place à la solution supraconductrice. On voit clairement ici que le problème qu'on avait précédemment, où toute la solution antiferromagnétique était la plus favorable, est réglé. Sa courbe croise maintenant les autres avant la fin de l'antiferromagnétisme. Pour ce qui est des solutions avec coexistence, on observe que ces solutions rejoignent leurs solutions respectives sans coexistence des deux côtés de la courbe en diminuant l'énergie interne entre les deux solutions. Donc, ces deux solutions avec coexistence seront plus favorables que les solutions sans coexistence.

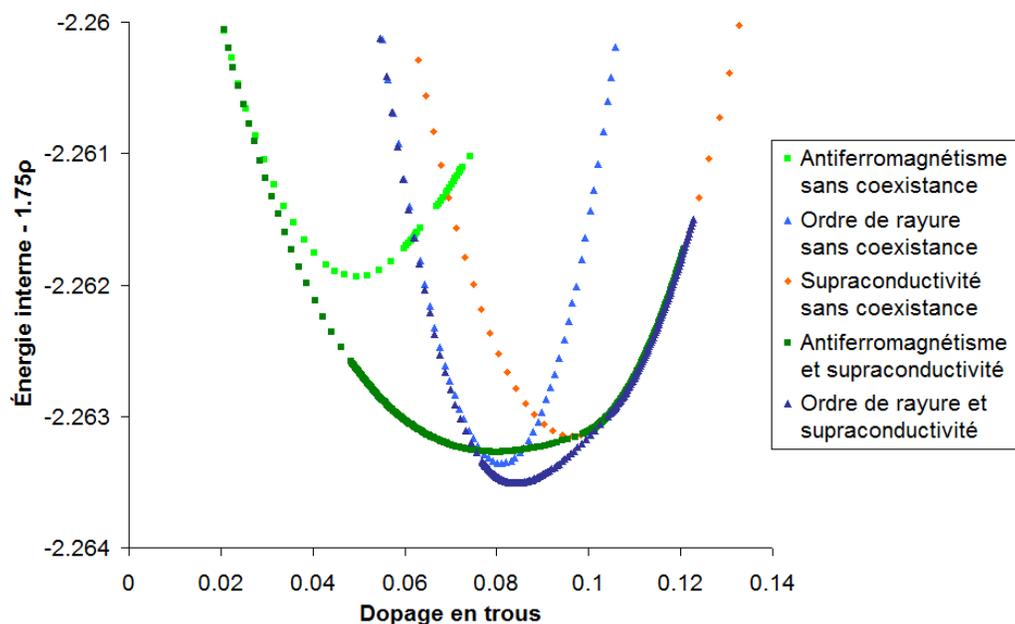


FIGURE 54 Graphique des énergies internes des solutions trouvées avec et sans coexistence dans le modèle à deux amas. Les solutions ont été obtenues en utilisant la VCA pour le modèle à deux amas de la figure 51 avec les paramètres correspondant à l'YBCO pour le modèle de Hubbard. Nous avons redressé les courbes avec un terme dépendant de la densité électronique, ce qui ne change pas l'ordre des solutions, mais facilite la visualisation de celles-ci.

En retraçant le graphique des paramètres d'ordre avec ces solutions au moment où elles sont le plus favorables, on obtient la figure 55. Ce graphique nous montre que nous avons quatre types de solutions en fonction du dopage, à commencer par un antiferromagnétisme pur (avec une supraconductivité nulle) jusqu'à un dopage de 0.015. La coexistence de l'antiferromagnétisme de la supraconductivité suit jusqu'à un dopage de 0.075. S'ensuit de la coexistence entre l'ordre de rayure et la supraconductivité où l'antiferromagnétisme devient nul. Finalement, l'ordre de rayure se termine sous l'effet de la supraconductivité à un dopage de 0.105 où, passé ce dopage, on obtient une supraconductivité sans ordre de spin. On remarque un saut dans le paramètre d'ordre supraconducteur lorsqu'on passe de l'antiferromagnétisme à l'ordre de rayure, ce qui semble a priori erroné, mais qui est simplement dû au fait qu'on considère que la transition entre ces deux solutions ne se fait pas graduellement, mais d'un seul coup. Il s'agit en fait d'une transition du premier ordre qui est caractérisée par ce type de discontinuité.

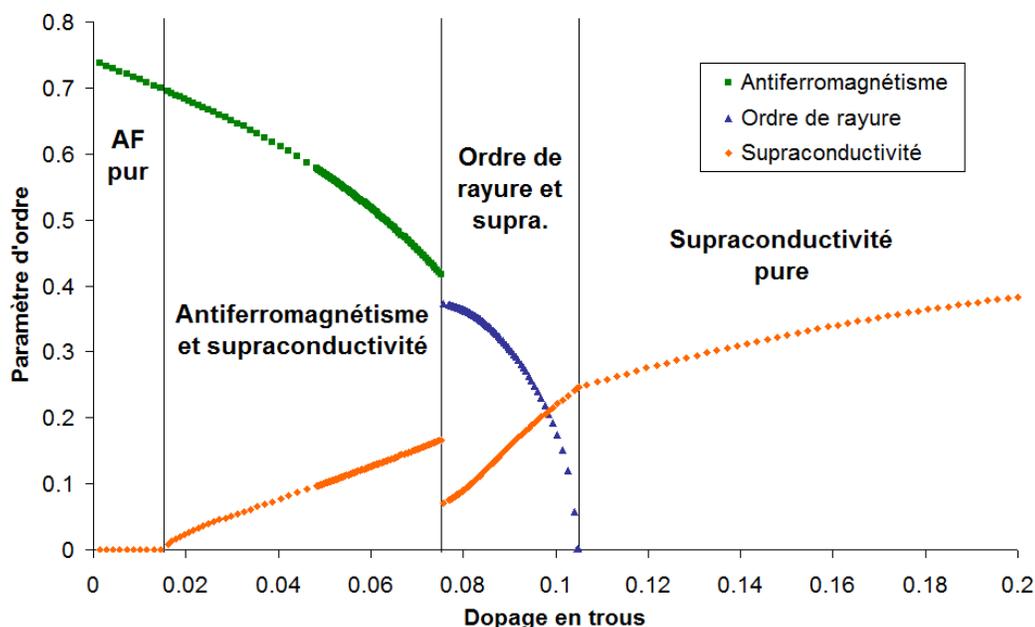


FIGURE 55 Graphique des paramètres d'ordre des solutions les plus favorables en VCA en fonction de l'énergie interne pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard sur un modèle a deux amas. Les lignes verticales représentent le passage d'un type de solution à un autre.

C.4 Conclusion

Le modèle à deux amas nous a permis de bien comparer les solutions entre elles et de vérifier la coexistence entre les champs de Weiss d'ordre de rayure, d'antiferromagnétisme et de supraconductivité. Il semble d'ailleurs impossible de faire coexister les solutions antiferromagnétique et d'ordre de rayure entre elles, les coexistences n'étaient possibles qu'avec le champ de Weiss supraconducteur. Maintenant que nous avons obtenu des résultats potables en utilisant la VCA, il serait intéressant de vérifier ce qu'on peut réaliser avec d'autres méthodes telles que la CDMFT.

D Essais en CDMFT avec amas de 4 sites

Nous allons maintenant effectuer des essais en CDMFT où on devra utiliser des sites de bain reliés aux sites des amas pour imiter l'effet de la contribution du reste du réseau sur l'amas en question. Cependant, le fait d'ajouter des sites augmente du même fait le temps de calcul de la fonction de Green de manière exponentielle. Donc le fait d'ajouter une multitude de sites de bains aux amas de 8 sites qu'on avait précédemment ne semble pas être un moyen réaliste pour effectuer la CDMFT. Nous nous sommes donc concentré sur des amas plus petits de 4 sites sur lesquels nous pourrions ajouter une quantité raisonnable de sites de bains.

D.1 Modèles à amas de 4 sites

Nous avons élaboré deux modèles différents utilisant des amas à quatre sites qui sont illustrés à la figure 56. Le premier utilise des amas carrés qui sont par ailleurs des amas standards utilisés pour effectuer des calculs sur l'antiferromagnétisme et la supraconductivité. Cependant, ce modèle risque, par sa forme, de favoriser la solution antiferromagnétique et c'est pourquoi nous avons produit un deuxième modèle possédant quant à lui des amas dont les sites sont disposés à l'horizontale dans le but espéré de favoriser l'ordre de rayure plutôt que l'antiferromagnétisme. Ces deux modèles ont les mêmes vecteurs de périodicité que le modèle à deux amas (figure 3.1) utilisé en VCA.

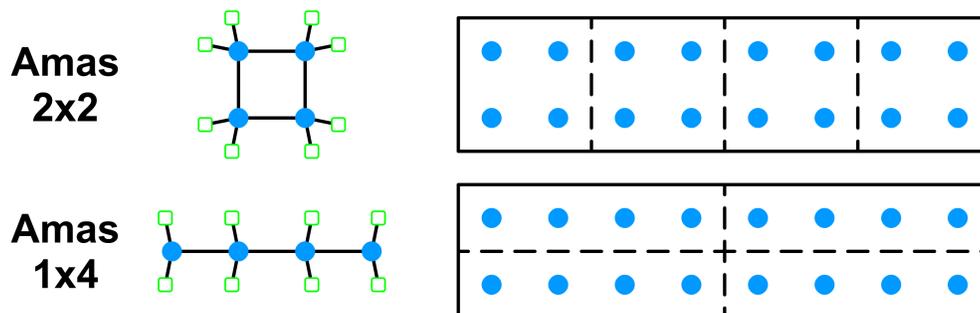


FIGURE 56 Schéma des deux modèles à amas de 4 sites utilisés pour effectuer des calculs en CDMFT.

D.2 Paramètres variationnels utilisés

Nous utiliserons la méthode expliquée à la section 2.7 consistant à faire varier un maximum de paramètres variationnels pour permettre tous les ordres possibles sur les amas. Cette méthode a le désavantage de nécessiter un grand nombre de paramètres qui totaliseront 128 (dans une situation sans supraconductivité). Ce grand nombre s'explique par le fait que pour chaque site de bain, on a deux paramètres d'énergie (un pour les électrons de spin up et un pour les électrons de spin down) et deux paramètres de saut avec leur site auquel le site de bain est relié (spins up et down). Nous avons donc 4 paramètres par site de bain et si on multiplie par le nombre de sites de bain par amas (x8) et par le nombre d'amas (x4), on obtient ce chiffre. Heureusement, ce grand nombre de paramètres ne ralentit que très peu le calcul, car la grande partie de celui-ci provient plutôt du calcul de la fonction de Green qui est effectué à chaque itération et dont le temps de calcul ne dépend pas du nombre de paramètres variationnels utilisés.

Pour chaque solution trouvée par cette méthode, notre objectif final est de tracer les paramètres d'ordre des solutions en fonction du dopage. Nous allons donc devoir définir des champs de Weiss correspondant aux ordres trouvés et pour ce faire nous allons nous inspirer de mesures de densité de spin et de charge relative à chaque site du super-amas (qu'il est possible de faire facilement à l'aide du programme QCM).

D.3 Résultats obtenus avec amas carrés

Dans le cas où on utilise le modèle avec les amas carrés, on obtient deux types d'ordre de spin qui sont illustrés à la figure 57. Nous avons, tel que prévu, l'antiferromagnétisme qui commence au demi-remplissage et diminue à partir de ce point sans cependant tomber à zéro. La deuxième solution n'est pas l'ordre de rayure, mais plutôt un ordre de spin semblable à l'antiferromagnétisme, mais dont les spins se voient inversés à chaque amas à l'horizontale. Cet ordre forme un dôme dans le graphique des paramètres d'ordre entre les dopages 0.06 et 0.12.

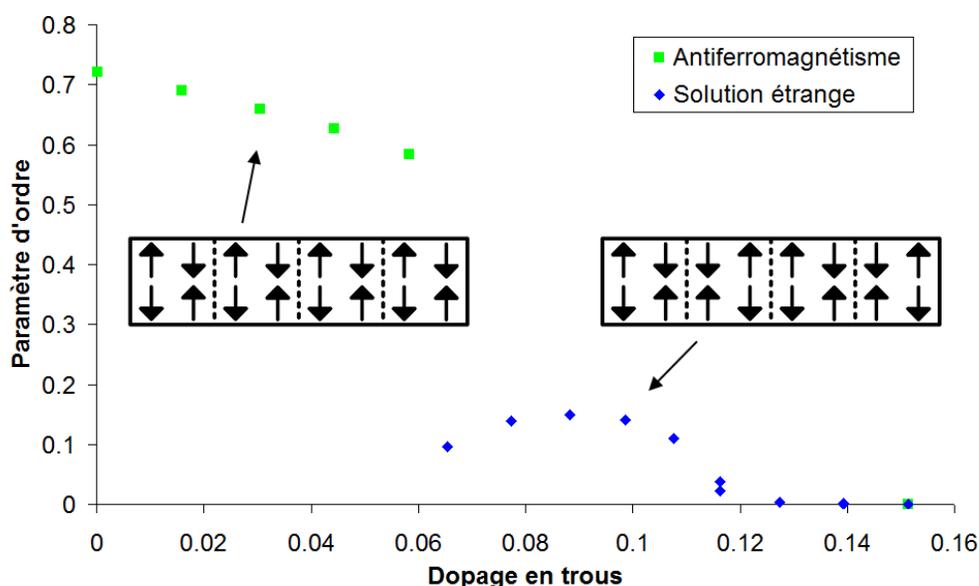


FIGURE 57 Graphique des paramètres d'ordre des solutions trouvées en CDMFT avec le modèle possédant des amas carrés de 4 sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

L'ordre antiferromagnétique qui est inversé sur chaque amas semble être dû à priori à la forme des amas qui favorise grandement l'antiferromagnétisme au sein de l'amas. Mais avec un peu de réflexion et d'imagination, on se rend compte qu'il s'agit en fait d'un ordre de rayure, mais dont la période horizontale est de 4 sites au lieu d'être de 8 sites et qui est centré sur les liens et non sur les sites. La modulation de la densité de spin qui caractérise l'ordre de rayure est présente, car l'antiferromagnétisme est ici inversé à chaque deux sites à l'horizontale. Donc, ça nous indique que l'ordre de rayure peut se présenter sous plusieurs formes et que cet ordre particulier est possiblement une solution qui était existante, mais qu'on a ignorée dans nos précédents calculs en VCA. Il faudra cependant vérifier si cet ordre apparaît uniquement à l'aide de la forme des amas actuels, ce qui nécessitera de retourner à des amas de 2 sites par 4 sites.

D.4 Résultats obtenus avec amas horizontaux

Avec le modèle utilisant les amas horizontaux, on obtient encore une fois deux types de solution. La première est, une fois de plus, l'antiferromagnétisme, mais la seconde nous laisse perplexes, car il s'agit d'une solution où il y a un comportement antiferromagnétique dans une direction (horizontalement) et ferromagnétique dans l'autre (voir figure 58). Pourtant, on avait espoir que ce modèle nous permette de voir l'ordre de rayure apparaître. Dans cette optique, par la suite on a tenté de forcer les amas à avoir un comportement antiferromagnétique à la verticale en reliant les paramètres appropriés des amas du bas aux amas du haut, mais nous n'avons jamais réussi à obtenir l'ordre de rayure.

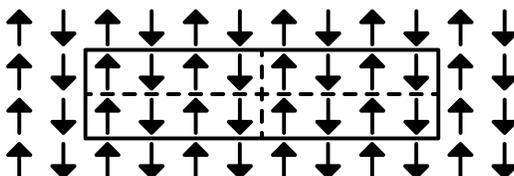


FIGURE 58 Solution étrange obtenue en CDMFT avec le modèle à amas horizontaux de 4 sites pour les paramètres correspondant à l'YBCO dans le modèle de Hubbard.

D.5 Conclusion

Ces deux modèles nous montrent qu'il est impossible d'obtenir l'ordre de rayure conventionnel avec des amas de quatre sites. Il semble qu'il faille absolument respecter la règle que les amas doivent être commensurables avec la maille élémentaire de l'ordre étudié sans quoi on ne pourra pas l'observer convenablement. Donc, si on veut continuer les tests en CDMFT en désirant voir l'ordre de rayure apparaître, il faut absolument utiliser des amas de 8 sites, comme ce l'est fait à la section 3.2 du chapitre des résultats.

Bibliographie

- [1] Michel CAFFAREL et Werner KRAUTH : Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions : Mott transition and superconductivity. *Physical Review Letters*, 72(10) :1545–1548, mars 1994.
- [2] J. CHANG, E. BLACKBURN, a. T. HOLMES, N. B. CHRISTENSEN, J. LARSEN, J. MESOT, Ruixing LIANG, D. a. BONN, W. N. HARDY, a. WATENPHUL, M. V. ZIMMERMANN, E. M. FORGAN et S. M. HAYDEN : Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$. *Nature Physics*, 8(12) :871–876, octobre 2012.
- [3] Philippe CORBOZ, M. RICE, T. et Matthias TROYER : Competing states in the t - j model : Uniform d -wave state versus stripe state. *Phys. Rev. Lett.*, 113 :046402, Jul 2014.
- [4] Philippe CORBOZ, Steven WHITE, Guifré VIDAL et Matthias TROYER : Stripes in the two-dimensional t - J model with infinite projected entangled-pair states. *Physical Review B*, 84(4) :041108, juillet 2011.
- [5] Elbio DAGOTTO : Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 66 :763–840, Jul 1994.
- [6] V. EMERY : Theory of high- T_c superconductivity in oxides. *Physical Review Letters*, 58(26) :2794–2797, juin 1987.
- [7] VJ EMERY, SA KIVELSON et JM TRANQUADA : Stripe phases in high-temperature superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 96(16) :8814–8817, 1999.
- [8] G GRISSONNANCHE, O CYR-CHOINIÈRE, F LALIBERTÉ, S RENÉ DE COTRET, A JUNEAU-FECTEAU, S DUFOUR-BEAUSÉJOUR, M-È DELAGE, D LEBOEUF, J CHANG, B J RAMSHAW, D A BONN, W N HARDY, R LIANG, S ADACHI, N E HUSSEY, B VIGNOLLE, C PROUST, M SUTHERLAND, S KRÄMER, J-H PARK, D GRAF, N DOIRON-LEYRAUD et Louis TAILLEFER : Direct measurement of the upper critical field in cuprate superconductors. *Nature communications*, 5 :3280, janvier 2014.
- [9] Claudius GROS et Roser VALENTÍ : Cluster expansion for the self-energy : A simple many-body method for interpreting the photoemission spectra of correlated Fermi systems. *Phys. Rev. B*, 48 :418–425, juillet 1993.

- [10] D HAUG, V HINKOV, Y SIDIS, P BOURGES, N B CHRISTENSEN, a IVANOV, T KELLER, C T LIN et B KEIMER : Neutron scattering study of the magnetic phase diagram of underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. *New Journal of Physics*, 12(10) :105006, octobre 2010.
- [11] C. HELLBERG et E. MANOUSAKIS : Stripes and the t-J Model. *Physical Review Letters*, 83(1) :132–135, juillet 1999.
- [12] Gabriel KOTLIAR, Sergej Y. SAVRASOV, Gunnar PÁLSSON et Giulio BIROLI : Cellular dynamical mean field approach to strongly correlated systems. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :186401, octobre 2001.
- [13] A. I. LICHTENSTEIN et M. I. KATSNELSON : Antiferromagnetism and d-wave superconductivity in cuprates : A cluster dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*, 62 :R9283–R9286, octobre 2000.
- [14] Ansgar LIEBSCH et Ning-Hua TONG : Finite-temperature exact diagonalization cluster dynamical mean-field study of the two-dimensional Hubbard model : Pseudogap, non-Fermi-liquid behavior, and particle-hole asymmetry. *Physical Review B*, 80(16) :165126, octobre 2009.
- [15] J. LUTTINGER et J. WARD : Ground-state energy of a many-fermion system. ii. *Phys. Rev.*, 118 :1417–1427, Jun 1960.
- [16] A. MACRIDIN, M. JARRELL, Th. MAIER et G. SAWATZKY : Physics of cuprates with the two-band Hubbard model : The validity of the one-band Hubbard model. *Physical Review B*, 71(13) :134527, avril 2005.
- [17] M. MATSUDA, M. FUJITA, K. YAMADA, R. J. BIRGENEAU, M. A. KASTNER, H. HIRAKA, Y. ENDOH, S. WAKIMOTO et G. SHIRANE : Static and dynamic spin correlations in the spin-glass phase of slightly doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 62 :9148–9154, octobre 2000.
- [18] Michael POTTHOFF : *Strongly Correlated Systems*, volume 171 de *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [19] Axel RUHE : Implementation aspects of band Lanczos algorithms for computation of eigenvalues of large sparse symmetric matrices. *Mathematics of Computation*, 33(146) :680–680, mai 1979.
- [20] D SENECHAL, D PEREZ et M PIORO-LADRIERE : Spectral weight of the Hubbard model through cluster perturbation theory. *Physical review letters*, 84(3) :522–5, janvier 2000.
- [21] David SÉNÉCHAL : Cluster dynamical mean field theory. In Adolfo AVELLA et Ferdinando MANCINI, éditeurs : *Strongly Correlated Systems*, volume 171 de *Springer Series in Solid-State Sciences*, pages 341–371. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [22] David SÉNÉCHAL, Danny PEREZ et Dany PLOUFFE : Cluster perturbation theory for Hubbard models. *Physical Review B*, 66(7) :075129, août 2002.

- [23] Steven WHITE et D. SCALAPINO : Density Matrix Renormalization Group Study of the Striped Phase in the 2D t-J Model. *Physical Review Letters*, 80(6) :1272–1275, février 1998.
- [24] Steven WHITE et D. SCALAPINO : Competition between stripes and pairing in a t-t'-J model. *Physical Review B*, 60(2) :R753–R756, juillet 1999.
- [25] Steven WHITE et D. SCALAPINO : Stripes on a 6-Leg Hubbard Ladder. *Physical Review Letters*, 91(13) :1–4, septembre 2003.
- [26] Tao WU, Hadrien MAYAFFRE, Steffen KRÄMER, Mladen HORVATIĆ, Claude BERTHIER, Philip L KUHN, Arneil P REYES, Ruixing LIANG, W N HARDY, D a BONN et Marc-Henri JULIEN : Emergence of charge order from the vortex state of a high-temperature superconductor. *Nature communications*, 4 :2113, juillet 2013.