

Le modèle de Hubbard bidimensionnel à faible  
couplage : thermodynamique et phénomènes critiques

par

Sébastien Roy

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

FACULTÉ DES SCIENCES  
UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada, 2 octobre 2007

# Composition du jury

*Le \_\_\_\_\_, le jury a accepté la thèse de M. Roy dans sa version finale.*

Prof. David Sénéchal  
Département de physique  
Président-rapporteur

Prof. Louis Taillefer  
Département de physique

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

Prof. Anne-Marie Daré  
Université de Provence  
Examineur Externe

# Sommaire

Une étude systématique du modèle de Hubbard en deux dimensions à faible couplage à l'aide de la théorie Auto-Cohérente à Deux Particules (ACDP) dans le diagramme température-dopage-interaction-sauts permet de mettre en évidence l'influence des fluctuations magnétiques sur les propriétés thermodynamiques du système électronique sur réseau. Le régime classique renormalisé à température finie près du dopage nul est marqué par la grandeur de la longueur de corrélation de spin comparée à la longueur thermique de de Broglie et est caractérisée par un accroissement drastique de la longueur de corrélation de spin. Cette croissance exponentielle à dopage nul marque la présence d'un pic de chaleur spécifique en fonction de la température à basse température. Une température de *crossover* est alors associée à la température à laquelle la longueur de corrélation de spin est égale à la longueur thermique de de Broglie. C'est à cette température caractéristique, où est observée l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral, que se situe le maximum du pic de chaleur spécifique.

La présence de ce pic a des conséquences sur l'évolution du potentiel chimique avec le dopage lorsque l'uniformité thermodynamique est respectée. Les contraintes imposées par les lois de la thermodynamique font en sorte que l'évolution du potentiel chimique avec le dopage est non triviale. On démontre entre autres que le potentiel chimique est proportionnel à la double occupation qui est reliée au moment local.

Par ailleurs, une dérivation de la fonction de mise à l'échelle de la susceptibilité de spin à fréquence nulle au voisinage d'un point critique marque sans équivoque la présence d'un point critique quantique en dopage pour une valeur donnée de l'interaction. Ce point critique, associé à une transition de phase magnétique en fonction du dopage à température nulle, induit un comportement non trivial sur les propriétés physiques du système à température finie. L'approche quantitative ACDP permet de calculer une échelle de température concrète pour laquelle ce point critique a des répercussions. Dans le régime critique, la longueur de corrélation enregistre plutôt une dépendance en  $\frac{1}{\sqrt{T}}$ .

Finalemment, une synthèse de ces résultats permet d'aborder une mise en application pratique de ces méthodes d'analyse pour les supraconducteurs à haute température critique dopés aux électrons tel que le  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ . Une comparaison entre les résultats théoriques et les mesures expérimentales pour ce matériau est effectuée.

# Remerciements

Pour ce qui est du travail en soi, je tiens à remercier mon directeur, le professeur André-Marie Tremblay. Je voudrais aussi remercier le professeur Patrick Fournier pour les nombreuses discussions concernant les matériaux qu’il maîtrise si bien. Il en va de même de Pierre Richard. Un remerciement spécial à David Fournier qui a aussi alimenté mes réflexions. Je tiens à remercier aussi particulièrement mes collègues Charles Brillon et Dominic Bergeron pour leurs oreilles d’une profondeur proportionnelle au volume de mes discours ainsi que pour leur regard critique sur mes résultats et conclusions.

Pour ce qui est de l’accomplissement de ce travail, cela n’aurait pu être possible sans la compréhension et la patience de ma conjointe Doris et de mes trois enfants Angélie, Jean-Nicolas et Renaud. Il en va de même pour ma famille, tous mes amis du bureau, de la forêt, des salles de spectacles et des studios avec qui j’ai eu le plaisir de penser à *autre chose* pendant ces années. Un remerciement spécial pour Pierre et Nicole pour les corrections grammaticales.

Je remercie aussi le Conseil de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG) et le Regroupement Québécois sur les Matériaux de Pointe (RQMP) pour leur appui financier, ainsi que le Réseau Québécois de Calcul de Haute Performance (RQCHP) et le programme de Chaires de recherche du Canada pour les heures de calcul sur les ordinateurs parallèles (Mammouth et Elix) achetés avec les fonds de la Fondation Canadienne pour l’Innovation (FCI) et du Ministère de l’Éducation, du loisir et du sport du Québec (MEQ).

# Table des matières

Sommaire	iii
Table des matières	vi
Liste des figures	ix
Introduction	1
<b>1 Fluctuations dans un système d'électrons sur réseau</b>	<b>4</b>
1.1 Le modèle de Hubbard pour les cuprates . . . . .	5
1.2 Le choix d'une approche théorique . . . . .	7
1.3 Thermodynamique et chaleur spécifique . . . . .	10
1.4 Thermodynamique et potentiel chimique . . . . .	12
1.5 Phénomènes critiques . . . . .	13
<b>2 Cadre théorique</b>	<b>14</b>
2.1 Modèle de Hubbard et approche théorique . . . . .	14
2.2 Fonction de Green à une particule et self-énergie . . . . .	16
2.2.1 Interprétation . . . . .	16
2.3 Fonction de Green à deux particules pour le spin et la charge . . . . .	18
2.4 Approche autocohérente à deux particules . . . . .	19
2.4.1 Premier et second ordre pour ACDP . . . . .	23
2.5 Sommaire de chapitre . . . . .	24
<b>3 Fonction de Green à deux particules et longueur de corrélation</b>	<b>25</b>
3.1 Régime classique renormalisé . . . . .	26
3.2 Analyse de la fonction de Lindhard . . . . .	29

3.2.1	$t'$ nul, susceptibilité commensurable . . . . .	32
3.2.2	$t'$ nul, susceptibilité incommensurable . . . . .	36
3.2.3	$t'$ non nul . . . . .	44
3.3	Sommaire de chapitre . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Longueur de corrélation au voisinage d'un point critique quantique</b>	<b>51</b>
4.1	Transition de phase quantique et point critique quantique . . . . .	52
4.1.1	Longueur de corrélation ACDP au voisinage d'un point critique quantique . . . . .	53
4.2	Sommaire de chapitre . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Thermodynamique</b>	<b>60</b>
5.1	Grand potentiel thermodynamique . . . . .	60
5.2	Uniformité thermodynamique pour l'approche autocohérente à deux par- ticules; suite et fin . . . . .	61
5.3	Thermodynamique pour ACDP . . . . .	63
5.4	Uniformité thermodynamique au premier ordre ACDP . . . . .	65
5.5	Sommaire de chapitre . . . . .	68
<b>6</b>	<b>Régime classique renormalisé du modèle de Hubbard à faible couplage</b>	<b>70</b>
6.1	Considérations numériques face à la précision des calculs . . . . .	70
6.2	Température de passage vers le régime classique renormalisé et calcul de longueur de corrélation . . . . .	72
6.3	Diagramme de phase . . . . .	74
6.3.1	Double occupation et chaleur spécifique . . . . .	86
6.3.2	Potentiel chimique . . . . .	94
6.4	Discussion et interprétation . . . . .	112
6.5	Sommaire de chapitre . . . . .	114
<b>7</b>	<b>Points critiques et régime critique quantiques</b>	<b>118</b>
7.1	Retour sur l'invariance d'échelle . . . . .	120
7.2	Vérification de la mise à l'échelle avec $T$ et $n$ . . . . .	122
7.3	Vecteur d'onde . . . . .	131
7.4	Nature du régime critique au voisinage du point critique . . . . .	133
7.5	Discussion et interprétation . . . . .	134

7.6	Sommaire de chapitre . . . . .	137
<b>8</b>	<b>Application à un cas particulier, comparaisons avec le NCCO</b>	<b>138</b>
8.1	Choix des paramètres . . . . .	138
8.2	Longueur de corrélation et diagramme de phase . . . . .	144
8.3	Point critique quantique . . . . .	152
8.4	Chaleur spécifique et potentiel chimique . . . . .	153
8.5	Discussion . . . . .	154
8.6	Sommaire de chapitre . . . . .	157
	<b>Conclusion</b>	<b>158</b>
<b>A</b>	<b>Calculs thermodynamiques pour une self-énergie quelconque</b>	<b>161</b>
A.1	Potentiel chimique . . . . .	161
A.2	Chaleur spécifique et entropie . . . . .	162
<b>B</b>	<b>Calcul de <math>U_{sp}</math> et de la longueur de corrélation</b>	<b>165</b>
B.1	Corrections en fréquences de Matsubara . . . . .	165
B.1.1	Règle de somme sans interaction . . . . .	165
B.1.2	Règle de somme avec interaction pour ACDP . . . . .	167
B.2	Intégrale sur les vecteurs d'ondes . . . . .	174
B.2.1	Choix d'une méthode d'intégration . . . . .	174
B.3	Incommensurabilité de la susceptibilité et de la surface de Fermi . . . . .	175
<b>C</b>	<b>Calcul de la self-énergie avec des systèmes de taille finie</b>	<b>176</b>
<b>D</b>	<b>Récents développements</b>	<b>179</b>
D.1	Retour sur l'invariance d'échelle . . . . .	179
	<b>Bibliographie</b>	<b>185</b>



# Liste des figures

1.1	Structure atomique des composés 2-1-4 . . . . .	6
1.2	Diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique	7
1.3	Schéma d'un plan de Cu-O <sub>2</sub> . . . . .	8
3.1	Comparaison de deux définitions de la longueur de corrélation à $n = 1$ . . .	28
3.2	Fonction de Lindhard pour $t' = -0.6t$ . . . . .	30
3.3	Schéma de la position des pics de susceptibilité. . . . .	31
3.4	Surface de Fermi sans interaction pour $t' = 0$ . . . . .	33
3.5	Évolution de la susceptibilité sans interaction à $t' = 0$ en fonction du vecteur d'onde avec le dopage . . . . .	34
3.6	Comparaison de l'évolution de la fonction de Lindhard commensurable selon l'angle . . . . .	35
3.7	Comparaison de l'évolution de la susceptibilité avec interaction selon l'angle	35
3.8	Comparaison de $\chi_{sp}$ avec le développement asymptotique pour deux longueurs de corrélations différentes. . . . .	37
3.9	Comparaison de l'évolution de la fonction de Lindhard quasi incommensurable selon l'angle . . . . .	38
3.10	Comparaison de l'évolution de la susceptibilité de spin quasi incommensurable selon l'angle . . . . .	39
3.11	Comparaison de $\chi_{sp}$ avec le développement asymptotique pour deux longueurs de corrélations différentes. . . . .	39
3.12	Comparaison de l'évolution de la fonction de Lindhard incommensurable selon l'angle . . . . .	40
3.13	Comparaison de l'évolution de la susceptibilité avec interaction incommensurable selon l'angle . . . . .	40
3.14	Asymétrie du pic incommensurable de la fonction de Lindhard . . . . .	41

3.15	Diagramme d'incommensurabilité pour $t' = 0$ . . . . .	42
3.16	Surfaces de Fermi sans interaction pour deux températures à dopage fixe	43
3.17	Surface de Fermi sans interaction pour $t' = -0.1t$ à $n = 1$ . . . . .	45
3.18	Surface de Fermi sans interaction pour $t' = -0.1t$ pour divers potentiels chimiques . . . . .	46
3.19	Diagramme d'incommensurabilité pour $t' = -0.1t$ . . . . .	47
3.20	Évolution de la susceptibilité sans interaction à $t' = -0.1t$ en fonction du vecteur d'onde avec le dopage aux trous . . . . .	48
3.21	Évolution de la susceptibilité sans interaction à $t' = -0.1t$ en fonction du vecteur d'onde avec le dopage aux électrons . . . . .	49
5.1	Uniformité thermodynamique ACDP avec la double occupation . . . . .	62
5.2	Uniformité thermodynamique ACDP versus le régime classique renormalisé	63
6.1	Comparaison de la limite thermodynamique avec le système de taille finie pour ACDP . . . . .	73
6.2	Diagramme de phase pour $t' = 0$ pour quelques valeurs de $U$ en fonction de $n$ et $T$ . . . . .	75
6.3	Évolution de la longueur de corrélation de spin au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable pour $t' = 0$ et $U = 4t$ . . . . .	77
6.4	Diagramme de phase pour $t' = -0.05t$ pour quelques valeurs de $U$ en fonction de $n$ et $T$ . . . . .	80
6.5	Diagramme de phase pour $t' = -0.1t$ pour quelques valeurs de $U$ en fonc- tion de $n$ et $T$ . . . . .	80
6.6	Évolution de la longueur de corrélation de spin au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable pour $t' = -0.1t$ . . . . .	83
6.7	Diagramme de phase pour $t' = -0.2t$ pour quelques valeurs de $U$ en fonc- tion de $n$ et $T$ . . . . .	84
6.8	Diagramme de phase à basse température en fonction de $U$ et $t'$ . . . . .	84
6.9	Diagramme de phase température-dopage pour $U = 5t$ pour quelques va- leurs de $t'$ en fonction de $n$ et $T$ . . . . .	85
6.10	$U\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ en fonction de la température pour 4 dopages différents . . . . .	87
6.11	Chaleur spécifique pour $n = 1$ et $U = 4t$ en fonction de la température . . . . .	88
6.12	Chaleur spécifique pour $n = 1$ et $U = 4t$ en fonction de la température pour une gamme de température plus grande. . . . .	90

6.13	Chaleur spécifique pour $n = 0.94$ et $U = 4t$ en fonction de la température	91
6.14	Chaleur spécifique pour $n = 0.88$ et $U = 4t$ en fonction de la température	92
6.15	Chaleur spécifique pour $n = 0.80$ et $U = 4t$ en fonction de la température	93
6.16	$U\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ en fonction de $n^2$	95
6.17	Chaleur spécifique pour $n = 1$ et $U = 2t$ en fonction de la température pour une gamme de température plus grande.	97
6.18	Comparaison de calculs du potentiel chimique en fonction du dopage à $T = 0.1t$	99
6.19	Comparaison de calculs du potentiel chimique en fonction du dopage à $T = 0.1t$ .	101
6.20	Comparaison de calculs du potentiel chimique en fonction du dopage à $T = 0.05t$ et $T = 0.01t$	102
6.21	Diagrammes de phase possible selon l'approche ACDP pour les ondes de densité de spin	105
6.22	$\mu(n)$ à $T = 0.08t$ pour $t' = -0.05t$ .	106
6.23	Comparaison de la susceptibilité sans interaction et avec interaction pour $t' = -0.05t$ , $U = 4t$ pour les trous et les électrons	107
6.24	Comparaison de $\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T$ calculée avec $TrG^{(2)}$ avec la susceptibilité de charge statique à vecteur d'onde nul en fonction de $n$	110
7.1	Mise à l'échelle de la susceptibilité de spin pour $n > n_c$	125
7.2	Maximum de susceptibilité de spin en fonction de $T$ et $n$ à $U = 2t$ et $t' = 0$	126
7.3	Mise à l'échelle de la susceptibilité de spin $\forall n$	126
7.4	Mise à l'échelle de la susceptibilité de spin pour deux valeurs de $U$ en échelle logarithmique.	127
7.5	Illustration de la limite haute température du régime critique.	129
7.6	Comparaison de la mise à l'échelle en vecteurs d'onde	132
7.7	Diagramme de phase pour le modèle de Hubbard à faible couplage	136
8.1	Comparaison du niveau de Fermi sans interaction avec le poids spectral à $U = 5.75t$ .	140
8.2	Comparaison des niveaux de Fermi sans interaction avec les résultats expérimentaux pour divers paramètres de bande.	141
8.3	Comparaison du niveau de Fermi sans interaction avec le poids spectral à $U = 6.5t$ .	143

8.4	Diagramme de phase pour le NCCO/PCCO . . . . .	145
8.5	Longueur de corrélation en fonction de la température pour divers dopages. Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux . . . . .	147
8.6	Longueur de corrélation en fonction de la température pour divers dopages. Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux . . . . .	148
8.7	Diagramme de passage vers le régime classique renormalisé ACDP pour le NCCO . . . . .	150
8.8	Longueur de corrélation à $T_x$ en fonction du dopage . . . . .	151
8.9	Chaleur spécifique ACDP pour le NCCO . . . . .	154

# Introduction

Depuis de nombreuses années, les chercheurs tentent de trouver une explication satisfaisante aux phénomènes observés dans divers matériaux reconnus pour comporter de grandes corrélations électroniques, notamment les supraconducteurs à haute température critique. Après plus de deux décennies, très peu d’approches ou de théories microscopiques parviennent à obtenir des résultats quantitatifs qui se comparent de manière satisfaisante avec les résultats expérimentaux.

L’approche autocohérente à deux particules (ACDP) est l’une de ces approches. Avec cette approche non perturbative, il fut possible de calculer le poids spectral et de le comparer de façon remarquable avec des résultats de spectroscopie par photoémission résolue en angle (ARPES) [1] pour les supraconducteurs à haute température critique dopés aux électrons. De plus, une prédiction théorique vieille de près de dix ans [2] a récemment connu un bon succès [3]. C’est dans cette conjoncture que s’insère ce projet de Doctorat.

À l’aide de la théorie ACDP, une exploration du diagramme de phase  $U - t' - n - T$  est faite. Cette exploration se concentre surtout sur les propriétés thermodynamiques et leurs relations avec la prédiction mentionnée plus tôt, soit que le système entre dans le régime classique renormalisé lorsque la longueur de corrélation de spin est environ égale à la longueur thermique de de Broglie. Lors de cette exploration, une fascinante découverte survint : l’influence du point critique quantique marquant la transition entre un métal paramagnétique et un état magnétique ordonné se manifeste dans une très grande région du diagramme de phase, jusqu’à des températures remarquablement élevées. Ce point critique impose la présence d’un régime critique quantique qui se distingue du régime classique renormalisé. Finalement, suite à ces analyses, des calculs sont comparés à un matériau soit le  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ .

Dans le premier chapitre, il sera question de considérations générales et de la problématique reliée à l’utilisation du modèle de Hubbard à une bande par rapport aux matériaux

étudiés. Il sera question de la pertinence de ce modèle et de la pertinence du choix d'une méthode pour résoudre ce modèle. Une revue de littérature sera accomplie en lien avec les aspects traités dans les chapitres subséquents.

Hormis la mise en contexte mentionnée, cette thèse se divise en deux volets principaux. Le premier consiste à énoncer et décrire les outils théoriques nécessaires à l'exploration des propriétés physiques choisies pour le modèle de Hubbard bi-dimensionnel. Le second consiste à exploiter ces outils pour obtenir des résultats quantitatifs pour ces quantités dans le but d'approfondir la compréhension du modèle de Hubbard et d'établir une base de comparaison avec l'expérience.

Ainsi, dans le second chapitre, le modèle du Hubbard et son lien avec les principes premiers seront abordés. Ensuite, il sera question de certains outils essentiels aux calculs dans un contexte de problème à N-corps. Un des objectifs consistera à proposer au lecteur des outils afin de mieux interpréter la physique que représentent les fonctions de Green à une particule. Puis la dérivation de l'approche autocohérente à deux particules sera revue.

Dans le troisième chapitre, on s'intéresse à la fonction de Green à deux particules, plus spécifiquement à la susceptibilité de spin et de charge de même qu'à la longueur de corrélation. La nature de la théorie ACDP est telle que la position du maximum de susceptibilité de spin dépend directement de la position du maximum de la fonction de Lindhard. Étant donnée l'exploration proposée du diagramme de phase, il faudra se pencher en détail sur la forme de la fonction de Lindhard afin de prévoir les répercussions que cette fonction aura sur la susceptibilité de spin ACDP et sur une détermination précise de l'évolution de la longueur de corrélation. Il sera démontré qu'une région particulière du diagramme de phase, soit la frontière commensurable-incommensurable, remettra en question la définition de la longueur de corrélation qui devra être utilisée pour la suite dans le régime classique renormalisé.

Le chapitre quatre, pour sa part, traitera la dérivation du comportement en température et dopage de la longueur de corrélation au voisinage d'un point critique. Il s'agira de la première étape nécessaire à la preuve de son existence dans le diagramme  $T - n$ . Le comportement en fonction de la température et du remplissage sera dérivé. Ces propriétés ont des caractéristiques différentes de celles qu'on observe dans le régime classique renormalisé.

Dans le cinquième chapitre, il sera question de thermodynamique. Les outils seront appliqués à l'approche ACDP. Son uniformité thermodynamique sera revue afin

de compléter certains aspect d'une étude précédente [4].

Au chapitre suivant, il sera question des premiers résultats obtenus avec la théorie pour le diagramme de phase dans le régime classique renormalisé. Une température de passage (*crossover*)  $T_x$  vers le régime classique renormalisé pour plusieurs paramètres sera exposée. Suivra le lien entre la longueur de corrélation et cette température de passage, la chaleur spécifique, le potentiel chimique et une autre particularité qu'implique le dopage : un changement dans la commensurabilité de la susceptibilité de spin. Une anomalie de potentiel chimique est observée et sera analysée.

Dans le chapitre sept, on explore les points critiques quantiques et le régime critique quantique. Une loi de mise à l'échelle générale en fonction de la température, du dopage et du vecteur d'onde est dérivée pour la susceptibilité de spin, ce qui permettra de s'affranchir des ambiguïtés soulevées dans le chapitre 3 à propos de l'évaluation de la longueur de corrélation. En variant les paramètres  $T$ ,  $n$ ,  $t'$  et  $U$ , on démontre clairement l'universalité de la fonction d'échelle. Pour diverses valeurs de  $U$  et  $t'$ , la valeur du remplissage critique  $n_c$  à température nulle est trouvée.

Dans le dernier chapitre, les outils utilisés dans les chapitres précédents seront appliqués à un matériau véritable soit le  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ . Le point critique quantique sera caractérisé. Les calculs de la chaleur spécifique et du potentiel chimique seront exécutés. De plus, un diagramme de phase sera extrait. Finalement, des comparaisons de calculs de longueur de corrélation avec des résultats expérimentaux seront faites. S'ensuivra une discussion des résultats.

# Chapitre 1

## Fluctuations dans un système d'électrons sur réseau

Les supraconducteurs à haute température critique, notamment ceux de la classe des cuprates, ont la particularité d'être des systèmes quasi bidimensionnels. Par ailleurs, l'échec de la théorie des bandes face au comportement de cette classe de matériaux en absence de dopage et la présence d'un état isolant antiferromagnétique suggèrent que les corrélations électroniques jouent un rôle majeur dans leurs propriétés. Le modèle de Hubbard [5] à une bande constitue le modèle le plus simple qui inclut l'effet de la répulsion coulombienne entre électrons. Par contre, en dimension plus petite que l'infini et plus grande que une, la solution de ce modèle échappe toujours aux chercheurs. Un des défis pour les théoriciens dans ce domaine consiste à résoudre ce modèle et à en établir la pertinence dans le but de comprendre les propriétés de ces matériaux. Pour ce faire, il est impératif d'avoir recours à des théories qui permettent d'extraire les propriétés de ce modèle de façon fiable.

La particularité des systèmes à dimensionnalité réduite provient du fait que les fluctuations quantiques sont de plus en plus importantes. Notamment, en une dimension, on note la présence de la séparation spin-charge telle que décrite par la théorie du liquide de Luttinger [6]. Le théorème de Mermin-Wagner impose aux systèmes en dimensions inférieures à trois une absence de transition de phase qui brise une symétrie continue à température finie [7]. Par conséquent, ces transitions de phase ne peuvent que se présenter à température strictement nulle. C'est le cas des transitions magnétiques de type Heisenberg.

En trois dimensions, la présence d'une transition de phase à température finie est per-



mise. Le cas bidimensionnel favorise donc la présence d'un régime de passage (*crossover*) au régime classique renormalisé sur une large gamme de températures entre une certaine température  $T_x$  et la température zéro. Le régime classique renormalisé se définit comme un régime pour lequel l'énergie caractéristique des excitations du système  $\omega$  est telle que  $k_B T \ll \hbar\omega$ . Ceci se réalise à des températures beaucoup plus petites que l'énergie de Fermi. C'est donc un régime classique distinct de celui qu'on retrouve à très haute température [8]. Tel que mentionné précédemment, en une dimension, le système est confronté à la physique du liquide de Luttinger. L'objectif de cette thèse consiste à mettre en valeur les particularités des propriétés du modèle de Hubbard bidimensionnel et de les relier à une classe de supraconducteurs à haute température critique, soit les matériaux dopés aux électrons comme par exemple le  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{2-\delta}$  ou le  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ , où le  $x$  représente la concentration du dopant Cérium et où le  $\delta$  représente la réduction en oxygène par recuit. Il semblerait, au moins au voisinage du dopage optimal, que l'amplitude du paramètre  $U$  du modèle de Hubbard pour ces matériaux soit relativement inférieure à l'amplitude de ce même paramètre pour les matériaux dopés aux trous tels que le  $\text{Y}_2\text{BaCuO}_5$ .

Les sections suivantes se distribuent comme suit : Tout d'abord une justification de la pertinence d'avoir recours au modèle de Hubbard bidimensionnel à une bande est établi. Par la suite, la justification du choix de l'approche autocohérente à deux particules (ACDP) est abordée. Pour poursuivre, un rappel de certains résultats intéressants reliés aux aspects traités dans cette thèse seront revus. Il sera alors question de la chaleur spécifique, du potentiel chimique et des phénomènes critiques, toujours dans le contexte énoncé, c'est-à-dire pour des théories pertinentes à l'étude des supraconducteurs à haute température critique de la famille des cuprates.

## 1.1 Le modèle de Hubbard pour les cuprates

Les supraconducteurs à haute température critique ont comme caractéristique commune la présence de plans de cuivre oxygène. La conductivité entre les plans est typiquement quelques ordres de grandeur plus petite que celle dans le plan, ce qui fait en sorte que ces matériaux sont fortement anisotropes. Les structures atomiques de certains de ces matériaux sont présentées à la figure 1.1 [9]. Un calcul de la structure de bande fait avec l'approximation de densité locale (LDA) montre que ces matériaux devraient être décrits par un comportement métallique. Dans les faits, il s'agit d'isolants antifer-

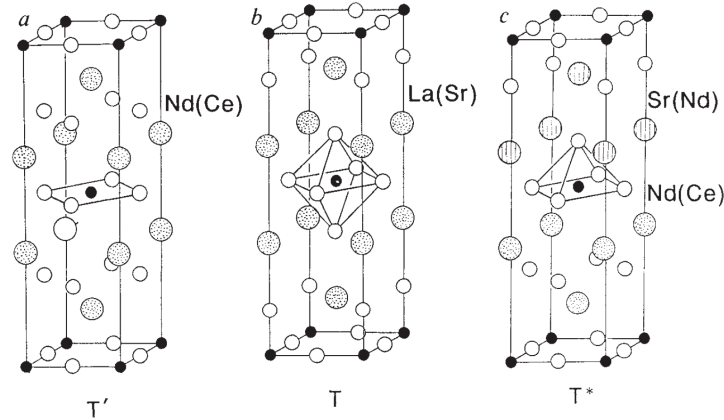


FIGURE 1.1 – Structure atomique des composés 2-1-4

romagnétiques. Ceci indique que les corrélations électroniques ne peuvent être négligées pour ces matériaux. En dopant ces matériaux, ils deviennent supraconducteurs.

Une autre particularité de ces matériaux est la présence d'un pseudogap observable notamment par la spectroscopie par photoémission résolue en angle [10–13]. Un diagramme de phase générique en fonction du dopage se trouve à la figure 1.2 [14]. Plusieurs hypothèses ont été émises dans le but d'expliquer ce phénomène. Les deux principales conjectures proposent d'un côté que ce pseudogap serait causé par des fluctuations supraconductrices ; de l'autre côté, on suggère plutôt qu'il s'agirait de fluctuations antiferromagnétiques. Dans les deux cas, les deux phases sont présentes dans le diagramme de phase.

Il fut suggéré par Philip Anderson [15], peu de temps après la découverte des supraconducteurs à haute température critique, que le modèle de Hubbard à une bande en deux dimensions [5] pourrait expliquer les propriétés de ces matériaux. En observant la structure de ces matériaux, soit les plans de cuivre oxygène, on constate que le réseau est constitué d'un agencement d'atomes de cuivre et d'oxygène selon le schéma de la figure 1.3. Les atomes de cuivre voient leur orbitale  $d$  s'hybrider avec les orbitales  $p$  des atomes d'oxygène pour former la structure électronique. Dans le cas des dopés aux trous, ceux-ci vont préférentiellement sur les oxygènes. Cependant, la présence des interactions et de cette hybridation mène à la formation d'un singulet entre l'ion cuivre et le trou des oxygènes l'entourant [16]. Ce sont les singulets de Zhang et Rice. Ceux-ci se déplacent ensuite dans la structure comme un trou centré sur le cuivre. Cet effet permet d'utiliser le modèle de Hubbard à une bande comme modèle effectif pour un modèle plus complet.

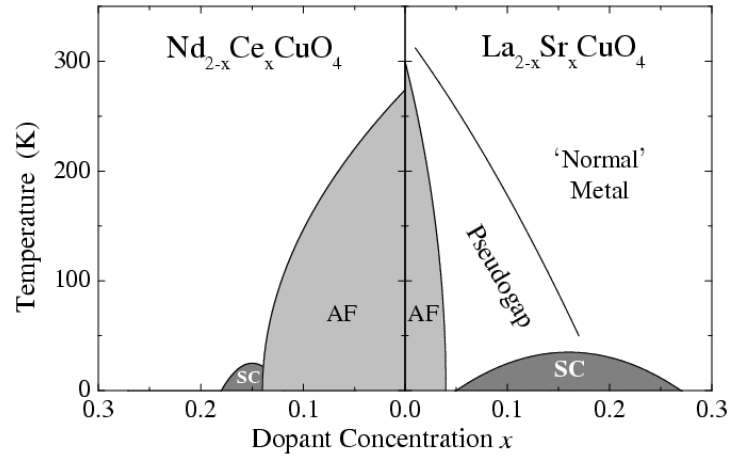


FIGURE 1.2 – Diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique [14]. Les zones en gris pâle représentent les régions où existe l'ordre antiferromagnétique. Celles en gris foncées les zone supraconductives (pour le NCCO, la réduction en oxygène est nécessaire pour faire apparaître la supraconductivité). On y trouve aussi la ligne de pseudogap qui est aussi présente pour les matériaux dopés aux électrons (NCCO). Les régions blanches sont désignées comme étant un métal "normal" qui présente des différences avec un véritable métal selon la théorie du liquide de Fermi.

Par contre, cette dérivation suggère que le modèle à une bande doit se trouver dans la limite fort couplage, comme c'est le cas pour les dopés aux trous. Dans le cas des dopés aux électrons, le dopant se retrouve directement sur le cuivre et l'utilisation d'un modèle à une bande est moins problématique, même lorsque les interactions sont un peu moins fortes.

## 1.2 Le choix d'une approche théorique

L'intérêt de résoudre le modèle de Hubbard bidimensionnel à une bande est grand. Pour atteindre ce but, les théoriciens ont développé de nombreuses méthodes approximatives ou numériques. Bien qu'à ce jour plusieurs propriétés de ce modèle sont relativement bien comprises, il n'existe toujours pas de solution exacte ou générale pour ce modèle.

Pour cette thèse, les méthodes purement numériques tels que le Monte Carlo Quantique [17] ne seront pas privilégiées sauf comme base de comparaison pour le choix de la méthode approximative puisque ces méthodes numériques ne fournissent pas toujours de l'information physique concrète sur les processus microscopiques importants qui entrent en jeu dans le modèle. Par ailleurs, leur domaine d'application pratique est parfois res-

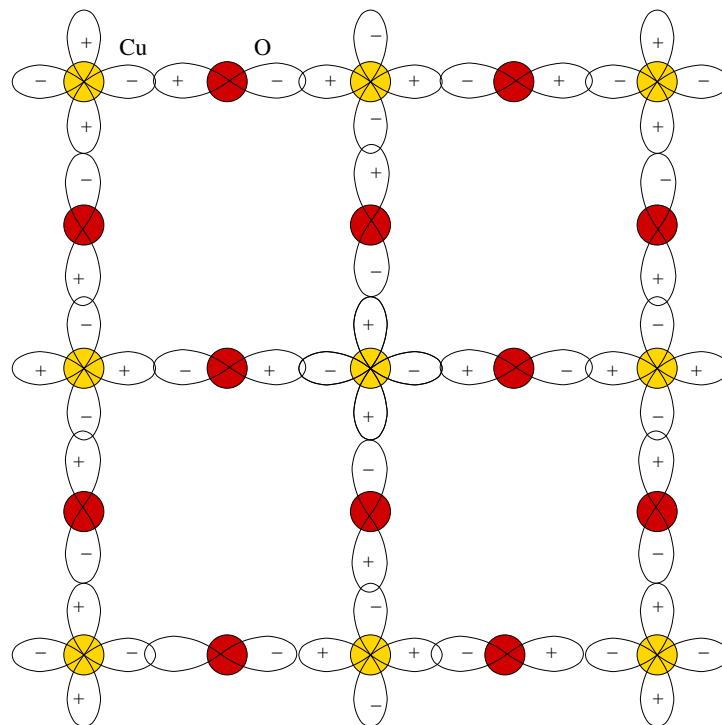


FIGURE 1.3 – Schéma de la structure cristalline d'un plan de cuivre oxygène. Les signes  $+/-$  désignent la phase des fonctions d'onde. Les atomes de cuivre sont en jaune et les atomes d'oxygène en rouge.

treint. Pour ce qui est des méthodes approximatives ou analytiques, le choix est vaste.

Tout porte à croire qu'une description des supraconducteurs à haute température critique à l'aide du modèle de Hubbard nécessiterait des valeurs de couplages intermédiaires ( $U \sim W \sim 8t$ ). Cette limite peut être approchée d'un côté par des approches à couplages forts et de l'autre par des approches à couplages faibles. Il semble souhaitable de comparer les résultats pour les couplages intermédiaires provenant d'approches tirées de ces deux limites. Dans la mesure où les résultats pour une approche à couplage faible donnée concordent avec les résultats d'une approche à couplage fort donnée, il y a fort à croire que les résultats en question sont valides. Pour cette étude, le choix s'arrêtera sur les méthodes à couplage intermédiaire obtenus à partir de la limite du couplage faible.

Parmi les méthodes à faible couplage, on peut penser à l'approximation Hartree-Fock ou champ moyen. On peut aussi penser à l'approximation de la phase aléatoire (*Random Phase Approximation* ou RPA). Ces méthodes violent le théorème de Mermin-Wagner et la température de Néel trouvée avec ces méthodes est relativement élevée. Puisque le but de ce travail est d'étudier les propriétés du modèle aux plus basses températures possibles, ces méthodes devront être rejetées.

Il serait aussi possible d'avoir recours à la méthode d'échange de fluctuations (FLEX) [18]. Mais cette approche viole le principe de Pauli [4] et ne parvient pas à obtenir l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral [2]. Certaines améliorations peuvent être apportées à la RPA. C'est le but visé de la théorie de renormalisation autocohérente (*self-consistent renormalization* SCR). Par contre, cette théorie est phénoménologique. On y voit apparaître une constante de couplage de mode et une interaction effective écrantée qui ne sont pas calculables à partir du modèle de Hubbard [19].

Le choix va donc s'arrêter sur l'approche non perturbative autocohérente à deux particules (ACDP). Cette méthode donne des indications sur la physique du système puisque la nature des approximations utilisées par cette approche implique une certaine intuition physique quant à la nature de l'état du système. Comme on est parvenu à démontrer que cette méthode donne des résultats précis, cela implique que le choix d'effets physiques importants au niveau des approximations est approprié. Les succès de cette approche incluent une bonne correspondance avec les résultats de simulations Monte Carlo Quantique [2, 4, 20, 21], un respect du théorème de Mermin-Wagner, un respect des règles de somme sur le spin et la charge ainsi qu'un respect du principe de Pauli [2]. De plus, bien que l'uniformité thermodynamique ne soit pas incluse dans la dérivation de la méthode, contrairement aux approches perturbatives à la Kadanoff-Baym [22, 23] comme

la FLEX, il fut démontré numériquement qu'elle la respecte avec une précision de l'ordre du pourcent, dans le domaine de paramètres où on sait déjà qu'elle est valide [4].

Le domaine d'applicabilité de l'approche auto-cohérente à deux particules peut se décrire ainsi. Avec cette approche, on obtient une température caractéristique : la température de passage de l'état normal vers le régime classique renormalisé. Sous cette température, l'approche ACDP cesse de donner des résultats acceptables étant donné la nature du système dans cette région du diagramme de phase comparativement aux effets inclus dans la théorie. Puisque, pour le cas bidimensionnel, le théorème de Mermin-Wagner pros- crit l'établissement d'ordre à longue portée à température finie d'une part et puisque les matériaux qu'on cherche à modéliser présentent des transitions de phase à température finie (magnétique ou supraconductrice) d'autre part, ce désavantage n'est en pratique pas si considérable. La présence de températures critiques différentes de zéro pour les matériaux indiquent que des effets tridimensionnels se font sentir à basse température. Par conséquent, une description complète de ces matériaux nécessitera une analyse du passage 2D-3D sous la température de passage 2D. Seul l'aspect purement bidimensionnel sera traité dans ce travail. L'approche ACDP ne subit pas les mêmes contraintes dans le cas tridimensionnel car il existe une température de Néel qu'elle peut détecter. Par contre elle n'est plus valable sous la température de Néel, tout comme elle n'est plus valable sous la température de passage au régime classique renormalisé en deux dimensions.

### 1.3 Thermodynamique et chaleur spécifique

À la fin du précédent millénaire, Thereza Paiva et *al.* [24] ont publié une vaste étude Monte Carlo Quantique (MCQ) sur la chaleur spécifique pour le modèle de Hubbard bidimensionnel au demi-remplissage pour plusieurs valeurs de  $U$ . Dans cette étude, il est question de la présence de deux énergies caractéristiques dans le moment local  $\langle S_z S_z \rangle = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  alors qu'intuitivement on s'attendrait à une seule énergie à une température  $T \sim U$ . Ces deux énergies caractéristiques se manifestent différemment selon que le couplage est faible ( $U < W$ ) ou fort ( $U > W$ ). À fort couplage, la chaleur spécifique présente un *pic de charge* à  $T \sim U$  de façon analogue à la limite atomique et un *pic de spin* à  $T \sim J$  de façon analogue au modèle d'Heisenberg. Cet effet provient du fait que, pour les températures très grandes, la double occupation prend la valeur Hartree-Fock  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle = \frac{n^2}{4}$  de sorte que le moment local à  $n = 1$  prend la valeur  $\langle S_z S_z \rangle = 0.5$ . Lorsque la température est de l'ordre de  $U$ , cette double occupation diminue, ce qui induit un pic

dans la chaleur spécifique puisque cette diminution affecte la pente de l'énergie potentielle. Aussitôt que ces moments locaux se forment, le modèle de Hubbard correspond alors au modèle d'Heisenberg et un second pic d'énergie caractéristique  $J = \frac{4t^2}{U}$  apparaît dû à la formation d'un ordre magnétique à courte portée. Une comparaison avec la limite atomique et le modèle d'Heisenberg montre bien que le pic à haute température correspond à la forme de la chaleur spécifique pour la limite atomique ( $t = 0$ ) et celui à basse température correspond au pic de chaleur spécifique pour le modèle d'Heisenberg comme le montre la figure 6 de la référence [24].

Par ailleurs, leur étude montre qu'à faible couplage, la chaleur spécifique présente aussi une structure à deux pics pour la chaleur spécifique, contrairement aux cas pour  $d = 1$  et  $d = \infty$  [25–32]. Par contre, lorsque  $d = 3$ , à faible couplage, on trouve un pic à basse température qui correspond à la transition de phase antiferromagnétique et la position de ce pic coïncide bien avec l'évolution en  $U$  de la température de Néel [33, 34]. Bien que certains affirment que la transition de phase à faible couplage soit du premier ordre [33] l'étude plus récente [34] suggère plutôt que ce ne soit pas le cas. La différence entre leurs conclusions pourrait être due à des effets de taille finie. Lorsque le système est trop petit, les résultats MCQ suggèrent la présence d'une transition de premier ordre alors que, suite à l'extrapolation à la limite thermodynamique, le modèle de Hubbard tridimensionnel appartiendrait à la classe d'universalité du modèle d'Heisenberg.

Si on compare l'évolution selon  $U$  de la position du pic de chaleur spécifique à basse température avec la température de Néel bidimensionnelle<sup>1</sup> déterminée par le critère de Stoner (comme à la figure 10 de la référence [24]), il semble y avoir correspondance. Cela suggère donc que ce pic serait dû à des fluctuations de spin à courte portée. C'est ce qui sera déterminé avec plus de détails dans le chapitre 6.

Un autre aspect sur lequel cette thèse ne s'attardera pas est la présence d'un point de croisement universel dans la chaleur spécifique (indépendant de  $U$ ). Il semblerait que ce point de croisement soit présent pour toutes les dimensionnalités [24–27, 32, 35–37]. De plus, pour le réseau hypercubique, la valeur de la chaleur spécifique au point de croisement semble être indépendante de la dimensionnalité, de  $U$  et de la relation de dispersion [27]. Cette valeur est d'environ  $0.34k_B$ . La raison de la présence de ce point de croisement universel tient au fait que la valeur de chaleur spécifique où  $\left(\frac{\partial C_n(T,n,U)}{\partial U}\right)_{T,n} = 0$  dépend

---

<sup>1</sup>En 2D, il ne doit pas y avoir de température de Néel à cause du théorème de Mermin-Wagner. De plus, la température de Néel est surestimée par rapport à la position des pics de chaleur spécifique alors une constante doit être utilisée devant l'expression de la température de Néel pour faire les comparaisons.

surtout de la largeur de bande [27]. Un tel point de croisement universel fut observé expérimentalement pour le  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{2-\delta}$  [38]. Ce point de croisement apparaît dans le pic à haute température. Dans cette présente étude, on se concentre sur le pic à basse température pour le faible couplage. Cet effet n'intervient donc pas ici.

L'objectif de cette thèse quant à la chaleur spécifique consiste à mettre en évidence le fait qu'à faible couplage, en deux dimensions, le modèle de Hubbard possède une caractéristique unique comparativement aux autres dimensionnalités. Pour  $d = 1$  et  $d > 3$ , la chaleur spécifique à faible couplage ne comporte qu'un seul pic de chaleur spécifique avec une énergie caractéristique  $T \sim U$ . En  $d = 3$ , à faible couplage, on trouve une transition de phase qui induit un pic à basse température. Il faut remarquer que ce pic ne comporte pas de divergence contrairement à la transition supraconductrice puisque la classe d'universalité du modèle de Hubbard possède un exposant critique négatif;  $C \sim (T - T_c)^{-\alpha}$  avec  $\alpha < 0$  ( $\alpha \approx -0.11$  [34]). En  $d = 2$ , les fluctuations empêchent la formation d'ordre à longue portée conformément au théorème de Mermin-Wagner, mais la présence de ces fluctuations modifie le moment local qui est relié à l'énergie potentielle de manière à induire un pic de chaleur spécifique. Le maximum de ce pic marque la température de passage, température à laquelle la longueur de corrélation de spin  $\xi_{sp}$  est de l'ordre de la longueur thermique de de Broglie  $\xi_{th}$ , ce qui marque le passage entre l'état normal et le régime classique renormalisé.

## 1.4 Thermodynamique et potentiel chimique

Le calcul du potentiel chimique est susceptible de donner des indices sur l'état du système. Entre autres, l'étude de l'existence d'une séparation de phase dans le modèle de Hubbard [39–44] ou dans le modèle  $t - J$  [45–50] est largement étudiée. Lorsque  $J$  est très grand, il semble y avoir consensus à propos de la présence d'une séparation de phase entre un antiferroaimant non dopé et des régions riches en trous. Par contre, dans le cas où  $J/t < 1$  et pour le modèle de Hubbard, il s'agit toujours d'un sujet de controverse.

Cette séparation de phase est mise en évidence par la présence d'une divergence de compressibilité électronique  $\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T = \chi_{charge}$  [51]. Ainsi, les calculs théoriques se concentrent donc sur l'évolution du potentiel chimique avec le dopage dans l'ensemble microcanonique, définit selon :



$$\mu = \left( \frac{\partial F(T, n, U)}{\partial n} \right)_{T, U}, \quad (1.1)$$

et par sa réciproque dans l'ensemble grand canonique. La présence d'un saut de densité à potentiel chimique constant implique une divergence de compressibilité et marque la présence d'une transition de premier ordre reliée à une séparation de phase.

L'ambiguïté qui existe autour de cette séparation de phase se lie à la limite inférieure en  $U$  pour laquelle cette séparation de phase existe. Cette transition étant attribuée à la transition de Mott induite par le dopage interprétée comme étant la séparation entre une phase liquide de Mott et gaz de Mott [40], cela suggère que cette séparation de phase ne devrait pas être présente lorsque  $U$  est trop faible. En effet, dans ce cas, il ne semble pas y avoir présence d'un isolant de Mott à température nulle [52].

## 1.5 Phénomènes critiques

Il y a près de trente ans maintenant, John A. Hertz proposait une approche pour étudier les phénomènes critiques d'un système quantique lorsque la température est nulle [53]. Il s'agit là d'une généralisation des fonctionnelles d'énergie libre classique du type Ginzburg-Landau-Wilson. De manière effective, le système peut être considéré comme possédant une dimension supplémentaire. Dans le contexte du modèle de Hubbard, cela implique que pour une certaine valeur de  $U \rightarrow U_c$ , les exposants critiques des fonctions physiques se voient modifiés par la proximité d'un *point critique quantique*. L'existence de ce point implique des modifications sur les propriétés physiques à température finie. Ainsi même si la température strictement nulle ne peut être atteinte expérimentalement, la mise en évidence de l'existence d'un tel point peut être faite par la mesure de ces modifications imposées aux exposants critiques au voisinage de la transition.

La présence d'un point critique quantique nécessite aussi la présence de fortes fluctuations quantiques, ce qui est plus facilement possible lorsque la dimensionnalité est réduite. Une revue plus détaillée de la théorie des phénomènes critiques sera élaborée dans le chapitre 4.

# Chapitre 2

## Cadre théorique

Lorsqu'il s'agit de traiter un système électronique sur réseau en tenant compte des corrélations électroniques, le modèle le plus général est l'hamiltonien coulombien qui considère les interactions entre les électrons et les noyaux atomiques, les interactions entre noyaux ainsi que les interactions électron-électron. De plus, les interactions spin-orbitales peuvent être considérées. Un tel modèle ne peut être résolu facilement. Il s'agit donc d'extraire de ce modèle les contributions les plus importantes pour le matériau considéré afin de simplifier le problème de sorte qu'on puisse en extraire de l'information physique pertinente. Dans ce chapitre, l'approche théorique sera présentée à partir du choix de l'hamiltonien jusqu'à la dérivation des quantités physiques analysées. D'abord, le modèle de Hubbard sera présenté. Ensuite, il sera question de la dérivation de l'approche autocohérente à deux particules (ACDP).

Le choix d'unités pour les chapitres suivants, à l'exception de l'analyse du cas physique au chapitre 8, sera le suivant.  $\hbar = 1$ ,  $k_B = 1$  et le pas du réseau  $a = 1$ . Les échelles d'énergie (incluant le potentiel chimique) et de température sont exprimées en unité d'intégrale de saut  $t$ . Afin de convertir ces données en unités physiques concrètes, il s'agit simplement de fixer la valeur de  $t$  en eV et de fixer la valeur du pas du réseau à celle du paramètre de maille du matériau considéré tout en introduisant là où c'est nécessaire les valeurs de  $\hbar$  et de  $k_B$ .

### 2.1 Modèle de Hubbard et approche théorique

L'hamiltonien électronique s'écrit :

$$H = \sum_{\sigma} \int d^d r \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

$$+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int \frac{d^d r d^d r'}{2} U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

où  $d$  désigne la dimensionnalité du système, les  $\psi^{(\dagger)}$  sont les opérateurs de création/annihilation,  $V(\mathbf{r})$  est le potentiel coulombien noyau-électron et  $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  le potentiel coulombien électron-électron. Le premier terme, en utilisant les fonctions de Bloch devient :

$$H_0 = \sum_{n, \sigma} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \epsilon_n(\mathbf{q}) c_{n, \sigma}^{\dagger}(\mathbf{q}) c_{n, \sigma}(\mathbf{q}), \quad (2.3)$$

où l'intégrale est faite sur la première zone de Brillouin ( $ZB$ ),  $n$  est l'indice de bande et où  $\epsilon_n(\mathbf{q})$  est la relation de dispersion de bande de liaisons fortes (*tight-binding*). Le second terme implique un opérateur à deux corps. Dans la base de Wannier, il prend la forme :

$$H_1 = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i, j, k, l \\ \sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l}} \langle i \sigma_i j \sigma_j | U | k \sigma_k l \sigma_l \rangle c_{i, \sigma_i}^{\dagger} c_{j, \sigma_j}^{\dagger} c_{l, \sigma_l} c_{k, \sigma_k}, \quad (2.4)$$

où les  $i, j, k, l$  désignent les indices de site sur le réseau et l'indice de bande et les  $\sigma_{\alpha}$  sont les indices de spins correspondants. Si on suppose que l'interaction ne dépend pas du spin, qu'on ne considère qu'une bande et que l'interaction est locale, c'est-à-dire que l'on néglige les éléments de matrices associés à des sites différents (en ne conservant que les sites  $i = j = k = l$ ), alors on obtient l'Hamiltonien de Hubbard :

$$H_{\text{Hubbard}} = H_0 + H_1 = \sum_{\sigma, i \neq j} t_{i, j} c_{i, \sigma}^{\dagger} c_{j, \sigma} + U \sum_i n_{i, \uparrow} n_{i, \downarrow}, \quad (2.5)$$

où les  $t_{ij}$  prennent une certaine valeur pour les premiers, seconds, troisièmes, etc., voisins. L'amplitude de ces  $t_{ij}$  peut varier selon la direction (cas anisotrope quasi unidimensionnel, par exemple). Les  $i$  et  $j$  désignent les indices de site en deux dimensions. Jusqu'à ce jour, il n'existe pas de solution exacte pour le cas bidimensionnel. Par contre, de nombreuses approches approximatives ou numériques existent. On pense entre autres choses au Monte Carlo Quantique [17] à l'approximation du champ moyen dynamique

(DMFT) ou au champ moyen dynamique sur amas (C-DMFT) [52, 54, 55] à l'approximation de l'amas dynamique (DCA) [56, 57] ou encore à la théorie de perturbation interamas ou sa version variationnelle (CPT,V-CPT) [58–61], etc., pour les méthodes numériques. Pour les approches analytiques, on pense à l'approximation Hartree-Fock, à la méthode d'approximation de phase aléatoire (RPA), à la méthode d'échange de fluctuations (FLEX) [18], etc.

Dans cette thèse, on utilisera principalement l'approche non perturbative autocohérente à deux particules (ACDP). Quelques simulations Monte Carlo Quantique (MCQ) seront utilisées.

## 2.2 Fonction de Green à une particule et self-énergie

En temps imaginaire et dans l'espace réel, la fonction de Green à une particule se définit comme :

$$G_\sigma(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = -\langle T_\tau c_{\sigma,j}(\tau) c_{\sigma,i}^\dagger(0) \rangle, \quad (2.6)$$

où  $T_\tau$  est l'opérateur de mise en ordre chronologique. Par l'intermédiaire de la transformée de Fourier, la fonction de Green retardée s'écrit :

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) = -\int d^d r d\tau e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - k_n\tau)} \langle T_\tau c_{\sigma,j}(\tau) c_{\sigma,i}^\dagger(0) \rangle. \quad (2.7)$$

L'équation de Dyson permet de définir la self-énergie :

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) = G_0(\mathbf{k}, ik_n) + G_0(\mathbf{k}, ik_n) \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n), \quad (2.8)$$

qui conduit à la forme :

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu - \Sigma^R(\mathbf{k}, ik_n)} \quad (2.9)$$

pour la fonction de Green de Matsubara.

### 2.2.1 Interprétation

Afin de se doter d'une intuition physique sur l'implication de la forme d'une fonction de Green, voici un résultat bien connu pour le cas sans interaction :

$$f(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_0) = T \sum_{ik_n} \frac{e^{ik_n 0^+}}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu_0}, \quad (2.10)$$

où  $f(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_0)$  est la distribution de Fermi-Dirac, ou encore formellement :

$$\langle c^\dagger(\mathbf{k})c(-\mathbf{k}) \rangle \equiv n(\mathbf{k}) = T \sum_{ik_n} \frac{e^{ik_n 0^+}}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu_0} \quad (2.11)$$

$$= f(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_0). \quad (2.12)$$

Cette fonction s'interprète comme étant la probabilité d'avoir un électron au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . Une autre façon d'illustrer cette interprétation est de faire intervenir le poids spectral  $A(\mathbf{k}, \omega)$  :

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \sum_\sigma \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_\sigma(\mathbf{k}, \omega)}{ik_n - \omega}. \quad (2.13)$$

Le poids spectral est la probabilité d'avoir un électron de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  et d'énergie  $\omega$ . Maintenant, pour le cas avec interactions, on écrit :

$$\langle c^\dagger(\mathbf{k})c(\mathbf{k}) \rangle = n(\mathbf{k}) = T \sum_{ik_n} \frac{1}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu_0 - \Sigma(\mathbf{k}, ik_n)}, \quad (2.14)$$

qui constituerait la probabilité d'avoir un électron au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ , en fonction du poids spectral, on trouverait :

$$n(\mathbf{k}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} A(\mathbf{k}, \omega) f(\omega). \quad (2.15)$$

Ainsi, le nombre de particules s'exprime aussi comme :

$$n = 2T \sum_n \int_{ZB} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} n(\mathbf{k}), \quad (2.16)$$

où le facteur deux provient de la somme sur le spin.

## 2.3 Fonction de Green à deux particules pour le spin et la charge

L'approche autocohérente à deux particules fait intervenir des règles de somme lors de sa résolution. Il est donc nécessaire de définir les fonctions de corrélation spin-spin et charge-charge. Soit :

$$\rho_i(\tau) = n_{i,\uparrow}(\tau) + n_{i,\downarrow}(\tau) \quad \text{et} \quad (2.17)$$

$$S_i^z(\tau) = n_{i,\uparrow}(\tau) - n_{i,\downarrow}(\tau), \quad (2.18)$$

les opérateurs pour la densité de charge et la projection du spin selon  $\hat{z}$ . En réponse linéaire, le spin se couple au champ source de la façon suivante :

$$e^{-\beta H} \rightarrow T_\tau e^{-\beta H - \int d\tau' S_i^z(\tau') \phi_i^S(\tau')}, \quad (2.19)$$

où l'opérateur de spin est couplé à un champ externe  $\phi_i^S(\tau')$  infinitésimal. La fonction de réponse est alors :

$$\chi_{sp}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau_i - \tau_j) = -\frac{\delta \langle S_j^z(\tau_j) \rangle}{\delta \phi_i^S(\tau_i)} = \langle T_\tau S_i^z(\tau_i) S_j^z(\tau_j) \rangle. \quad (2.20)$$

Et de façon tout à fait similaire, pour la susceptibilité de charge, cette fonction de réponse s'écrit :

$$\chi_{ch}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau_i - \tau_j) = -\frac{\delta \langle \rho_j^z(\tau_j) \rangle}{\delta \phi_i^\rho(\tau_i)} = \langle T_\tau \rho_i^z(\tau_i) \rho_j^z(\tau_j) \rangle - n^2. \quad (2.21)$$

Pour le cas sans interaction, ces deux fonctions sont proportionnelles à la fonction de Lindhard. Dans l'espace  $\mathbf{k} - ik_n$ , cette fonction se calcule de la façon suivante :

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{f(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_0) - f(\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \mu_0)}{iq_n + (\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}. \quad (2.22)$$

Comme stipulé précédemment, la distribution de Fermi-Dirac représente la probabilité de trouver un électron au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . Alors la fonction de Lindhard évaluée à fréquence nulle s'interprète comme étant l'intégrale de la différence de la probabilité de trouver un électron au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  et de la probabilité de trouver un électron au vecteur d'onde  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  divisé par la différence d'énergies de ces deux électrons. Le cas avec

interaction sera traité dans la section suivante.

## 2.4 Approche autocohérente à deux particules

Il s'agit d'une approche à couplage faible et intermédiaire qui a pour principe le respect des règles de somme pour le spin et la charge ainsi que le principe de Pauli [2, 20, 62].

La fonction génératrice de la fonction de Green peut s'écrire à partir de la fonction de partition en introduisant un champ source :

$$\ln Z[\phi] = \ln \langle T_\tau e^{-c_\sigma^\dagger(\bar{1})c_\sigma(\bar{2})\phi_\sigma(\bar{1},\bar{2})} \rangle, \quad (2.23)$$

où la notation de Kadanoff-Baym est utilisée ; un symbole surmonté d'une barre indique une somme implicite sur cette variable et  $\phi_\sigma(i, j)$  est le champ source externe infinitésimal. La fonction de Green à une particule se déduit de cette fonction de partition par la dérivée fonctionnelle :

$$G_\sigma(1, 2; [\phi]) = -\frac{\delta \ln Z[\phi]}{\delta \phi_\sigma(2, 1)} \quad (2.24)$$

$$\Sigma_\sigma(1, 2; [G]) = \frac{\delta \Phi[G]}{\delta G_\sigma(2, 1)}, \quad (2.25)$$

où  $\Phi[G]$  est la fonctionnelle de Luttinger-Ward [63]. Voici l'expression de l'équation de Bethe-Salpeter pour la susceptibilité à trois points dans le canal particule-trou :

$$\chi_{\sigma,\sigma'}(1, 3; 2) = -G_\sigma(1, 2)G_{\sigma'}(2, 3)\delta_{\sigma\sigma'} + G_\sigma(1, \bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}^{ir}(\bar{2}, \bar{3}; \bar{4}, \bar{5})\chi_{\bar{\sigma}\sigma'}(\bar{4}, \bar{5}; 2)G_\sigma(\bar{3}, 3), \quad (2.26)$$

où  $\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}^{ir}(\bar{2}, \bar{3}; \bar{4}, \bar{5})$  est le vertex irréductible provenant de la dérivée fonctionnelle :

$$\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}^{ir}(1, 2; 3, 4) \equiv \frac{\delta \Sigma_\sigma(1, 2; [G])}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)}, \quad (2.27)$$

avec :

$$\Sigma_\sigma(1, 2) = Un_{-\sigma}\delta(1-2) + UG_\sigma(1, \bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}^{ir}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5})\chi_{\sigma'-\sigma}(\bar{4}, \bar{5}; 1). \quad (2.28)$$

L'équation précédente est invariante sous rotation du spin. Il est alors possible de découpler cette expression en parties symétrique et antisymétrique qui correspondent

respectivement à la partie charge et spin du système. Ainsi, soit les vertex irréductibles de charge et de spin :

$$\Gamma_{ch} \equiv \Gamma_{\uparrow\downarrow}^{ir} + \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{ir} \quad (2.29)$$

$$\Gamma_{sp} \equiv \Gamma_{\uparrow\downarrow}^{ir} - \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{ir} \quad (2.30)$$

et leur susceptibilité correspondante :

$$\chi_{ch} \equiv 2(\chi_{\uparrow\downarrow} + \chi_{\uparrow\uparrow}) \quad (2.31)$$

$$\chi_{sp} \equiv 2(\chi_{\uparrow\downarrow} - \chi_{\uparrow\uparrow}) \quad (2.32)$$

Alors les expressions de ces susceptibilités en fonction de leurs vertex irréductibles correspondants peuvent être déduites :

$$\chi_{sp}(1, 2; 3) = -2G(1, 2)G(2, 3) - \Gamma_{sp}(\bar{2}, \bar{3}; \bar{4}, \bar{5})G(1, \bar{2})G(\bar{3}, 3)\chi_{sp}(\bar{4}, \bar{5}; 2) \quad (2.33)$$

et

$$\chi_{ch}(1, 2; 3) = -2G(1, 2)G(2, 3) + \Gamma_{ch}(\bar{2}, \bar{3}; \bar{4}, \bar{5})G(1, \bar{2})G(\bar{3}, 3)\chi_{ch}(\bar{4}, \bar{5}; 2). \quad (2.34)$$

Maintenant, en remplaçant ces deux dernières expressions dans l'équation (2.28), l'expression exacte pour la self apparaît :

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}(1, 2) = & U n_{-\sigma} \delta(1 - 2) \\ & + \frac{U}{4} [\Gamma_{sp}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5})\chi_{sp}(\bar{4}, \bar{5}, 1) + \Gamma_{ch}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5})\chi_{ch}(\bar{4}, \bar{5}, 1)] G_{\sigma}(1, \bar{2}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

Bien que toutes les expressions précédentes soient exactes, il n'est pas possible de les solutionner. L'approximation ACDP consiste à d'abord prendre une expression indépendante de la fréquence et du vecteur d'onde pour la self-énergie, ce qui correspond à des vertex irréductibles qui ont la même propriété. Cette approximation implique nécessairement que les résultats ne seront valables qu'à couplage faible à intermédiaire puis qu'à fort cou-



plage la dépendance en fréquence de la self-énergie est singulière. Dans l'approximation ACDP, l'approximation pour la self-énergie est améliorée dans un deuxième temps en substituant dans (2.35) les vertex irréductibles qui seront décrit ci-dessous et les fonctions de Green avec self-énergie constante (comme si elles étaient sans interaction).

L'approximation de vertex irréductibles constants est équivalente à postuler pour la fonctionnelle de Luttinger-Ward :

$$\Phi [G] = \frac{1}{2}G_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{1}^+) \Gamma_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{ir} G_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{1}^+) + \frac{1}{2}G_{\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{1}^+) \Gamma_{\bar{\sigma}-\bar{\sigma}}^{ir} G_{-\bar{\sigma}}(\bar{1}, \bar{1}^+). \quad (2.36)$$

En exécutant la dérivée fonctionnelle seconde par rapport à la fonction de Green de l'expression précédente, la dérivée fonctionnelle de la self-énergie par rapport à  $G$  est obtenue :

$$\Gamma_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{ir}(2, 3; 4, 5) \equiv \frac{\delta \Sigma_{\bar{\sigma}}(2, 3)}{\delta G_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(4, 5)} = \delta(2-5)\delta(3-4)\delta(4^+-5)\Gamma_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{ir}, \quad (2.37)$$

où il est utile d'introduire les interactions effectives  $U_{sp} \equiv \Gamma_{\bar{\sigma}-\bar{\sigma}}^{ir} - \Gamma_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{ir}$  et  $U_{ch} \equiv \Gamma_{\bar{\sigma}-\bar{\sigma}}^{ir} + \Gamma_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}^{ir}$ .

Notons qu'il y a deux fonctions de corrélation locales entre les nombres d'occupation, c'est-à-dire que à temps égaux et à positions égales on a la double occupation  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  et  $\langle n_{\uparrow}^2 \rangle = \langle n_{\downarrow}^2 \rangle = \langle n_{\uparrow} \rangle = \frac{n}{2}$ . Cette dernière est déterminée par le principe de Pauli ainsi que par le choix de remplissage. Il reste alors à déterminer la double occupation. Supposons qu'elle est connue. En utilisant le théorème de fluctuation-dissipation (écrit sous la forme de règles de somme dans l'espace réciproque) on peut alors déterminer la valeur des deux vertex irréductibles,  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$ . Ceci nécessite la forme des susceptibilités avec interaction qu'on peut déduire à partir des équations (2.33) et (2.34). On obtient,

$$n + 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2 = T \sum_n \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) \quad (2.38)$$

$$n - 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = T \sum_n \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n), \quad (2.39)$$

où  $\tilde{q} = (\mathbf{q}, iq_n)$ , avec :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (2.40)$$

et

$$\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{U_{ch}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (2.41)$$

La règle de somme pour la susceptibilité de spin permet d'extraire la valeur de la double occupation en supposant que  $U_{sp}\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle = U\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ . Ce choix est justifié par une généralisation de celle utilisée par Singwi et Tosi [64]. De cette façon, il est possible de remplacer la valeur de double occupation dans la règle de somme pour le spin et de résoudre l'équation (2.39). Ce choix pour l'expression de la double occupation constitue avec l'approximation du vertex local l'approche autocohérente à deux particules proprement dite. Afin de préserver la symétrie particule-trou à demi-rempli, il faut résoudre la règle de somme à  $n > 1$  avec la transformation  $n_\sigma \rightarrow 1 - n_\sigma$ . On reconnaît la transformation particule-trou lorsque le changement de dopage  $n \rightarrow 2 - n$ , pour  $n < 1$ , donne les mêmes résultats qu'un changement du signe de  $t'$  à dopage constant. Par exemple, à  $n = 0.9$ ,  $t' = -0.1t$ , on doit obtenir les mêmes résultats que pour  $n = 1.1$ ,  $t' = 0.1t$ . Des variantes pourraient être réalisées en utilisant une méthode différente pour évaluer la double occupation afin de résoudre la règle de somme et trouver les interactions effectives. Il serait possible d'utiliser un résultat Monte Carlo Quantique par exemple. Il semble que le choix ACDP pour la double occupation soit suffisamment précis dans le domaine de validité de la méthode. Ce domaine sera plus détaillé dans les prochains chapitres. Il faut noter aussi qu'à cette étape, la fonction de Green  $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)$  qui intervient dans la résolution de l'équation de Bethe-Salpeter peut être remplacée par  $G_0(\mathbf{k}, ik_n)$ , la fonction de Green sans interaction, ce qui fait intervenir la fonction de Lindhard dans les règles de somme. En effet, à cette ordre, la self est une constante.

Avec les expressions pour les susceptibilités, lorsqu'on symétrise le canal longitudinal et les canaux transverses pour satisfaire la symétrie de croisement [20, 65] effectuant une moyenne sur les trois canaux, la self-énergie se calcule comme suit :

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{Un_{-\sigma}}{2} + \frac{UT}{8} \sum_{iq_m} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} 3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_m)G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, iq_m + ik_n) \quad (2.42)$$

$$+ \frac{UT}{8} \sum_{iq_m} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_m)G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, iq_m + ik_n) \quad (2.43)$$

où les  $q_m = 2m\pi T$  sont les fréquences de Matsubara bosoniques et les  $k_n = 2(n+1)\pi T$  sont les fréquences de Matsubara fermioniques.

Plusieurs vérifications de la justesse de l'approche ACDP ont été faites par le passé. Entre autres, des comparaisons avec le poids spectral calculé par des simulations Monte Carlo Quantique ainsi que des comparaisons pour différentes quantités telles que la double occupation et l'énergie totale [2, 4]. Ensuite, des comparaisons avec les résultats expérimentaux d'ARPES et de mesure de longueur de corrélation montrent à quel point le modèle de Hubbard et l'approximation ACDP sont pertinents pour l'étude des supraconducteurs à haute température critique [66, 67]. Il faut noter aussi que dans la limite  $U \rightarrow 0$  le résultat RPA est retrouvé puisque dans cette limite  $U_{sp} \rightarrow U$ . La différence majeure qui représente un avantage considérable dans le choix de l'approche ACDP est que cette dernière ne viole pas le théorème de Mermin-Wagner.

### 2.4.1 Premier et second ordre pour ACDP

La première étape consiste à calculer les interactions effectives  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  avec les règles de somme. À cette étape, les susceptibilités avec interaction sont connues. Avec la valeur de  $U_{sp}$ , la double occupation est connue ;  $U_{sp} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle \equiv \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(0)}$ <sup>1</sup>. Sachant que l'énergie libre s'obtient de  $F(U, T, n) = F(U = 0, T, n) + \int dU \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ , il est possible de calculer toutes les fonctions thermodynamiques. N'ayant pas la self-énergie, il n'est pas possible, à cette étape, de calculer le poids spectral ou la surface de Fermi.

Avec les expressions de  $U_{sp}$ ,  $U_{ch}$  et leur susceptibilité correspondante, il est alors possible de calculer la self-énergie. Dans ce cas, une nouvelle expression pour la double occupation est :

$$U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(1)} = Tr \Sigma_{\sigma}^{(2)} G_{\sigma}^{(1)}, \quad (2.44)$$

où  $\left(G_{\sigma}^{(1)}\right)^{-1} = \left(G_{\sigma}^{(0)}\right)^{-1} + \delta\mu - \Sigma_{\sigma}^{(1)}$  est la fonction de Green premier ordre pour ACDP, auquel cas  $\Sigma_{\sigma}^{(1)}$  est une constante. Elle peut être remplacée en pratique par  $\left(G^{(0)}\right)^{-1}$ . La self-énergie est une fonction qui introduit un potentiel chimique effectif. En pratique, il est possible d'utiliser la fonction de Green sans interaction pour obtenir les mêmes résultats. Dans ce cas, il est possible de démontrer que l'expression (2.44) est identiquement égale à  $U_{sp} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$  [2]. C'est *l'ordre un* pour ACDP. À cet ordre, l'énergie cinétique est identiquement égale à l'énergie totale pour  $U = 0$ .

<sup>1</sup>Bien que techniquement cette définition de la double occupation soit celle pour le premier ordre, on la désigne *ordre zéro* afin de la distinguer de celle calculée avec la self énergie. Analytiquement, le résultats est le même mais numériquement, la double occupation à l'ordre zéro est plus précise.

Connaissant maintenant  $\Sigma_\sigma^{(2)}$ , il serait alors possible d'écrire :

$$G_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu - \Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}, \quad (2.45)$$

mais le potentiel chimique avec interaction  $\mu$  est toujours inconnu. Avec l'expression pour le calcul du remplissage,

$$n = Tr G_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n), \quad (2.46)$$

ayant fixé le remplissage, le potentiel chimique s'obtient numériquement. Il est alors possible de calculer n'importe quelle quantité impliquant la fonction de Green à une particule comme la double occupation  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)} = Tr \Sigma_\sigma^{(2)} G_\sigma^{(2)}$  et l'énergie interne  $E(T, n) = Tr \left[ \left( \epsilon(\mathbf{k}) + \frac{\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} \right) G_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right]$ . Le calcul de la double occupation permet de vérifier si l'approche est juste en comparant  $Tr \Sigma_\sigma^{(2)} G_\sigma^{(2)}$  avec  $Tr \Sigma_\sigma^{(2)} G_\sigma^{(1)}$ . Il semble que ces quantités sont égales à la précision numérique près lorsque  $\xi_{sp} < \xi_{th}$ . Les définitions de ces deux grandeurs seront fournies dans le chapitre suivant.

## 2.5 Sommaire de chapitre

- À partir de l'hamiltonien coulombien, en supposant que l'interaction entre les électrons locale, on obtient l'hamiltonien de Hubbard.
- Le poids spectral est la représentation mathématique de la probabilité d'avoir un électron au vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  d'énergie  $\omega$ . Lorsqu'il n'y a pas d'interaction, cette information se réduit à la distribution de Fermi ou à la densité d'état.
- La fonction de Green à deux particules contient la susceptibilité. Celle-ci constitue la réponse linéaire à un champ externe infinitésimal. En absence d'interaction, la susceptibilité est la fonction de Lindhard.
- L'approche autocohérente à deux particules (ACDP) consiste à extraire des interactions effectives de spin ( $U_{sp}$ ) et de charge ( $U_{ch}$ ). Cela permet d'écrire les susceptibilités avec interaction afin de résoudre l'équation de Bethe-Salpeter, ce qui permet alors de calculer la self-énergie.
- Les propriétés thermodynamiques peuvent être dérivées de diverses façons avec certaines quantités ACDP. Selon le choix de cette quantité, le calcul sera qualifié de *premier* ou *second* ordre.

# Chapitre 3

## Fonction de Green à deux particules et longueur de corrélation

Le calcul des susceptibilités est d'une importance considérable. D'abord, ces quantités donnent des indices manifestes sur les effets physiques importants dans le système. De plus, puisqu'il s'agit d'une quantité mesurable, elle constitue une bonne balise de comparaison avec l'expérience. Finalement, dans le contexte de la théorie autocohérente à deux particules, elle se situe au coeur de sa dérivation. D'abord par l'intermédiaire de la résolution des règles de somme et ensuite par son implication dans le calcul de la self-énergie.

La forme de la susceptibilité avec interaction ACDP implique la susceptibilité sans interaction. L'intervention de la relation de dispersion liaisons fortes (*tight-binding*) en faible dimensionnalité donne lieu à une dépendance particulière de la fonction de Lindhard avec les divers paramètres physiques. Afin de parfaire notre compréhension de ces systèmes et de la théorie ACDP, une étude de la fonction de Lindhard sera incluse dans ce chapitre.

Ce chapitre cherche à utiliser une analyse détaillée de la fonction de Lindhard afin de clarifier l'évaluation de la longueur de corrélation dans le voisinage du régime classique renormalisé qui apparaît lorsque  $\xi_{sp} > \xi_{th}$ , où  $\xi_{sp}$  est la longueur de corrélation de spin et où  $\xi_{th}$  est la longueur thermique de de Broglie :

$$\xi_{th} = \frac{\hbar v_f}{\pi k_B T}, \quad (3.1)$$

avec  $v_f$ , la vitesse de Fermi moyenne. On définit alors la température de passage au

régime classique renormalisé  $T_x$  par la température pour laquelle  $\xi_{sp} = \xi_{th}$ . Dans cette région, il est possible d'effectuer un développement asymptotique de la susceptibilité de spin de manière à faire apparaître une définition explicite de la longueur de corrélation. Il est nécessaire d'avoir une bonne évaluation de cette quantité afin de tracer les diagrammes de phase et d'extraire de façon précise les valeurs de température de passage au régime classique renormalisé  $T_x(n)$ . Dans ce régime, le passage d'une susceptibilité sans interaction  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  qui possède un maximum à  $iq_n = 0$  et  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi)$  vers une où le maximum se situe plutôt aux quatre vecteurs  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi \pm \delta), (\pi \pm \delta, \pi)$  génère des problèmes quant à l'évaluation de la longueur de corrélation.

### 3.1 Régime classique renormalisé

Pour le modèle de Hubbard quasi bidimensionnel, le *crossover* 2D-3D du comportement critique, à dopage nul, fut étudié [68]. Dans le régime classique renormalisé pour  $n = 1$ , la longueur de corrélation est :

$$\xi_{sp}^2 = \xi_0^2 \frac{U_{sp}}{\delta U}, \quad (3.2)$$

où

$$\xi_0^2 = \frac{-1}{2\chi_0^{max}} \left[ \frac{\partial^2 \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{\partial q_x^2} \right]_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{max}, iq_n=0} \quad (3.3)$$

et

$$\delta U = \frac{2}{\chi_0^{max}} - U_{sp}, \quad (3.4)$$

avec

$$\chi_0^{max} = \chi_0(\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{max}, iq_n = 0). \quad (3.5)$$

Cette définition de la longueur de corrélation (3.2) sera désignée *longueur développée* puisqu'elle provient du développement asymptotique de la susceptibilité de spin au voisinage du maximum. Le développement complet est présenté à l'annexe B. Le résultat du développement est :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \approx \frac{2\xi_{sp}^2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{1 + (\xi_{sp}q)^2}, \quad (3.6)$$

où l'origine est située sur le maximum de susceptibilité  $\mathbf{Q}_{max}$ .

Cette forme conduit à un comportement exponentiel, pour la longueur de corrélation, lorsque la température est faible ( $\xi_{sp} \sim \xi_{th}$  pour  $n = 1$ ). Cela peut être démontré en utilisant l'expression (3.6) et la règle de somme 2.39, telles que démontrées par Daré et al. [68] dans le régime classique renormalisé pour le dopage nul :

$$\xi_{sp} \sim \Lambda^{-1} \exp\left(\pi \tilde{\sigma}^2 \xi_0^2 \frac{U_{sp}}{T}\right), \quad (3.7)$$

où  $\Lambda \sim \pi$  et

$$\tilde{\sigma}^2 = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - C, \quad (3.8)$$

où  $C$  comprend les contributions à fréquence de Matsubara non nulle de la règle de somme. Or cette expression repose entre autres sur l'approximation que le pic de susceptibilité possède une symétrie de révolution. Cela semble être en contradiction avec le fait que ce pic possède les mêmes propriétés de symétrie que le réseau. Une analyse de la susceptibilité avec interaction permet de conclure que cette approximation est valide dans le régime classique renormalisé.

Dans le présent contexte, le régime classique renormalisé est la région du diagramme de phase pour laquelle  $\xi_{sp} > \xi_{th}$ . Cette région s'étend entre une température de passage vers le régime classique renormalisé  $T_x$  et la température critique  $T_c = 0$ . Le comportement exponentiel en température de la longueur de corrélation, conformément à l'expression de l'équation (3.7), constitue l'une des caractéristiques de ce régime.

Dans le chapitre précédent, les règles de somme sur le spin et la charge furent présentées. Un des défis de cette méthode consiste à extraire numériquement les valeurs de  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$ . Dans le cas de la règle de somme pour le spin, si  $U_{sp} \rightarrow \frac{2}{\chi_0^{max}}$ , le dénominateur tend vers zéro. Telle que mentionnée, l'approche ACDP respecte le théorème de Mermin-Wagner, de sorte que  $U_{sp} < \frac{2}{\chi_0^{max}}$ . Par contre, lorsque la température diminue, ces valeurs sont si près l'une de l'autre qu'il devient numériquement difficile d'extraire ce paramètre. Soit la quantité définie par :

$$V \equiv \sqrt{\frac{\chi_{sp}^{max}}{\chi_0^{max}}}, \quad (3.9)$$

qui est égale à la longueur de corrélation dans certaines régions du diagramme de phase, notamment à dopage nul dans le régime classique renormalisé. Cette définition pour la longueur de corrélation sera nommée *longueur pondérée*. Si, pour une longueur de

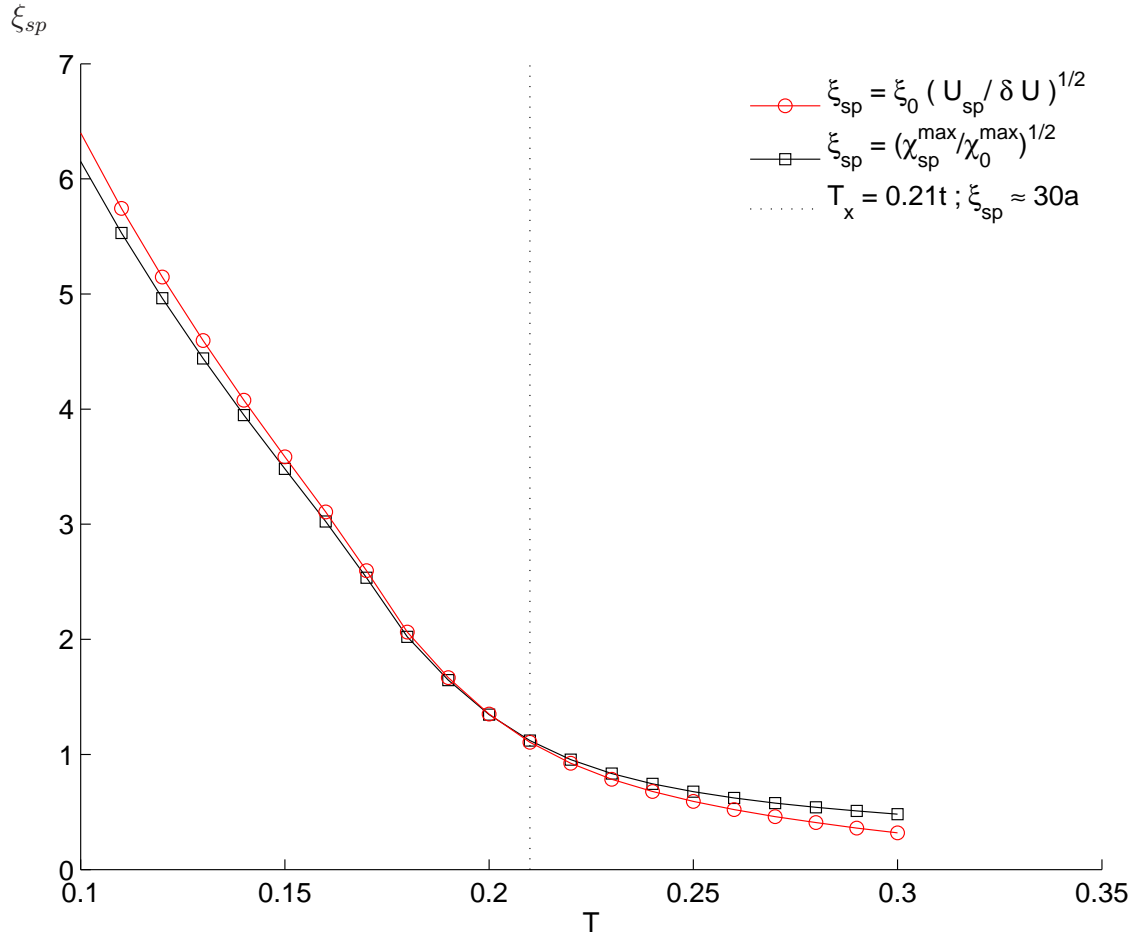


FIGURE 3.1 – Pour  $n = 1$ ,  $U = 4t$  à  $t' = 0$ , ce graphique compare les deux définitions de la longueur de corrélation. Il s'agit d'un graphique du logarithme en base 10 de  $\xi$  en fonction de la température.

corrélation de l'ordre de  $10^6$ , des résultats fiables sont voulus, il faut une précision de l'ordre de  $10^{-6}$  sur la détermination de  $U_{sp}$ . Plusieurs astuces ont été développées afin de maximiser la précision des calculs. Les détails se trouvent dans l'annexe B. La seule région du régime classique renormalisé où la longueur pondérée n'est pas numériquement égale à la longueur développée se trouve au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable. L'analyse qui suit tentera de déterminer laquelle des deux définitions donne une bonne évaluation de  $\xi_{sp}$  afin de la comparer à  $\xi_{th}$  pour obtenir les diagrammes du chapitre 6. Pour le demi remplissage, à  $U = 4t$ , une comparaison des résultats pour les deux définitions est tracée à la figure 3.1.

Dans le régime classique renormalisé, la susceptibilité tend vers une Lorentzienne



(ou quatre en présence d'incommensurabilité). Cette Lorentzienne à une grandeur caractéristique  $\xi$  qui correspond à la largeur à mi-hauteur de la Lorentzienne. C'est en comparant la susceptibilité de spin calculée par l'expression :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n = 0) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n = 0)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n = 0)} \quad (3.10)$$

avec la forme Lorentzienne que le choix d'une estimation pour la longueur de corrélation se fera. Formellement, la longueur de corrélation est la quantité qui permet d'écrire :

$$\chi_{sp}^R(\mathbf{q}, \omega) = \xi^{\gamma/\nu} X(\xi q, \xi^z \omega). \quad (3.11)$$

En pratique, il n'est pas toujours évident d'écrire une forme explicite pour  $\xi$ . Dans le régime classique renormalisé, il est possible d'en écrire une comme celle de la longueur développée provenant du développement asymptotique. Le choix de la longueur pondérée est motivé par l'idée que la susceptibilité de spin est normalisée à la valeur de  $n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  par l'intermédiaire de la règle de somme. Ainsi, la largeur à mi-hauteur est reliée à l'amplitude de la fonction par cette normalisation. Il s'agit là en fait d'une conséquence du théorème de Mermin-Wagner.

## 3.2 Analyse de la fonction de Lindhard

Puisque la forme de la susceptibilité avec interaction ACDP dépend explicitement de la fonction de Lindhard et que la longueur de corrélation est obtenue par une analyse du ou des pics principaux de  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n)$ , il est important de bien comprendre et connaître le comportement  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  en fonction des divers paramètres étudiés qui sont la température, le remplissage et les intégrales de saut. D'abord, la susceptibilité ACDP avec interaction possède des extremums aux mêmes valeurs de  $\mathbf{q}$  et  $iq_n$  que celle sans interaction. En effet, puisque les interactions effectives sont des constantes, il ne peut en être autrement. La forme de la surface de Fermi sans interaction donne un indice sur la position potentielle du maximum de susceptibilité. Pour cette raison, une analyse de la forme de la surface de Fermi sans interaction est incluse avec l'analyse de l'évolution de la fonction de Lindhard avec les divers paramètres ( $T$ ,  $n$  et les intégrales de saut).

Deux catégories de cas peuvent être distingués. Le premier cas est celui pour lequel le vecteur d'onde où la susceptibilité est maximale se situe à  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi)$ . Le second est celui pour lequel ce n'est pas le cas. Seront qualifiés *d'incommensurables* les cas où le

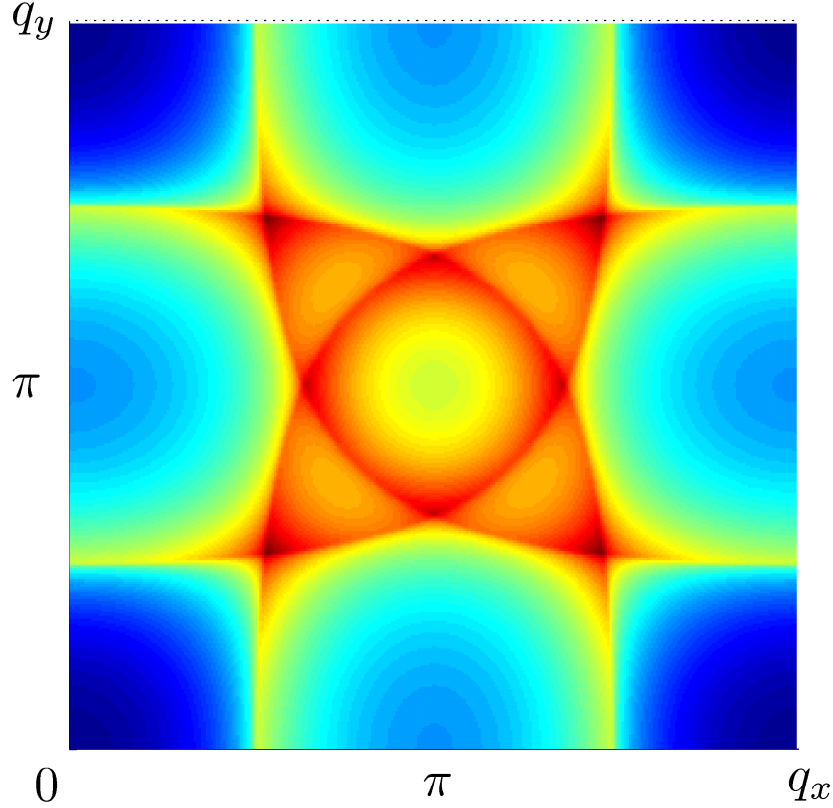


FIGURE 3.2 – Fonction de Lindhard tracée entre 0 et  $2\pi$  à demi remplie pour  $t' = -0.6t$  et  $T = 0.01t$ . On voit deux séries de pics incommensurables. Une sur les lignes situées à  $q_i = \pi$  et un autre pic autour de  $\frac{\pi}{2}$  (la position exacte est  $q_x = q_y \approx 1.7$ ). Le bleu correspond aux régions où la fonction est petite et le rouge où elle est grande. Les triangles bruns sont les maximums.

maximum n'est pas à  $(\pi, \pi)$ . Un article de Schulz [69] démontre qu'en deux dimensions pour  $t' = 0$ , ce maximum se situe à  $(\pi, \pi \pm \delta)$  et par symétrie à  $(\pi \pm \delta, \pi)$  plutôt qu'à  $\pm q_x^{max} = \pm q_y^{max} = \pi \pm \delta$  comme à la figure 3.3. Dans la présente analyse, cette preuve n'est pas importante en soi puisque  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  est calculée directement et son maximum est identifiable. Tout de même, il semble que ce maximum se déplace de façon continue de  $\mathbf{Q}^{max} = (\pi, \pi)$  vers  $\mathbf{Q}^{max} = (0, 0)$  entre  $n = 1$  et  $n = 0$  en passant par les lignes  $(\pi, q_y^{max})$  jusqu'à  $(\pi, 0)$  pour ensuite se déplacer selon  $\mathbf{q} = (q_x^{max}, 0)$ . On constate en pratique que l'argument énoncé par Schulz demeure valable lorsque  $t' \neq 0$  pourvu qu'il ne soit pas trop grand. Si  $t'$  est trop grand,  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  possède d'autres maximums locaux selon la diagonale comme le montre la figure 3.2. Cette limite ( $|t'| \gtrsim t/2$ ) ne sera pas considérée dans ce travail [70].

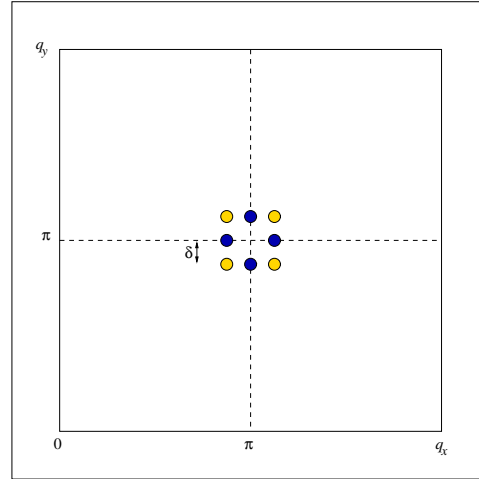


FIGURE 3.3 – Illustration de la position des pics de susceptibilité. Les points bleus sont les bonnes positions des pics telles que démontrées [69]. Les jaunes sont celles qui auraient pu être prédites intuitivement.

Ensuite le fait de qualifier les cas  $\mathbf{Q}^{max} \neq (\pi, \pi)$  comme étant *incommensurables* constitue légèrement un abus de langage. Effectivement, puisque ce déplacement de pic est continu, il passera nécessairement par des fractions valeurs entières de  $\pi$  comme par exemple  $\frac{\pi}{2}$ ,  $\frac{\pi}{3}$  ou encore  $\frac{3\pi}{4}$ , etc., qui sont commensurables pour un multiple de la zone de Brillouin irréductible. Par contre, puisque ce déplacement est continu, il existe une infinité de positions de maximums incommensurables ainsi que des fractions entières démesurées telles que  $\frac{1934751\pi}{1934752}$ . Les vecteurs d'une commensurabilité différente de un ne semblent pas induire de propriétés particulières pour la gamme de paramètres considérée.

Un effet important de la commensurabilité de la fonction de Lindhard vient du fait que lorsque le pic se situe à  $(\pi, \pi)$ , ce pic de susceptibilité possède la même symétrie que le réseau. Ce n'est pas le cas lorsque le vecteur d'onde maximum est incommensurable. En effet, le pic incommensurable n'est symétrique que dans une seule direction soit celle perpendiculaire à la frontière de la zone de Brillouin où se situe le pic. Pour retrouver la symétrie du réseau, il faut considérer les quatre pics comme un tout. La symétrie du réseau impliquant des axes de réflexion le long des frontières  $q_x = \pi$ ,  $q_y = \pi$  et  $q_x = q_y$ , on s'attend à ce que le ou les pics de susceptibilité possèdent aussi ces axes de symétrie.

Avant de poursuivre l'analyse, voici un rappel de la définition de la susceptibilité de Lindhard :

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{f(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_0) - f(\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \mu_0)}{iq_n + (\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}. \quad (3.12)$$

L'intégrand de cette fonction sera maximal si le dénominateur tend vers zéro, c'est-à-dire que  $\epsilon(\mathbf{k}) \approx \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ . Par contre, si le numérateur est nul, c'est-à-dire que  $f(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_0) - f(\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \mu_0) \equiv 0$ , alors le maximum de l'intégrand sera ailleurs. Lorsque  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , le dénominateur sera nul automatiquement sur un, deux ou tous les points de la frontière de la zone de Brillouin magnétique (ZBM) à condition que les valeurs de  $t'$  et de  $t''$  le permettent. Maintenant, il s'agit de savoir comment cette intégrale varie avec  $\mathbf{q}$  pour une paire de valeurs de  $T$  et  $\mu_0$  (et par conséquent de  $n$ ) donnée.

### 3.2.1 $t'$ nul, susceptibilité commensurable

D'abord le cas commensurable à  $t' = 0$  est traité. Au demi-remplissage, le potentiel chimique ne varie pas avec la température et est égal à zéro. La surface de Fermi est alors carrée et parfaitement emboîtée. Elle coïncide avec la zone de Brillouin magnétique comme l'indique la figure 3.4. Lorsque le potentiel chimique est égal à zéro, peu importe la température, les excitations thermiques impliquent des états qui coïncident toujours avec toute la frontière de la zone de Brillouin magnétique. Dans ce cas, le maximum de susceptibilité se situe toujours à  $(\pi, \pi)$ . En variant la température, la forme du pic de susceptibilité change progressivement bien qu'il demeure à  $(\pi, \pi)$ .

Afin de revenir sur l'idée énoncée plus haut à propos de la symétrie de révolution et l'évolution de la longueur de corrélation en fonction de la température,  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  pour trois directions en fonction de  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$  sont tracées à la figure 3.6. On place l'origine à  $(\pi, \pi)$ . D'abord, les trois premiers graphiques de la figure 3.5 montrent que le pic semble avoir une forme carrée plutôt que circulaire. Ensuite, la figure 3.6 suggère que la fonction possède une symétrie de révolution lorsque son amplitude est de l'ordre de 90% de l'amplitude maximale. Lorsque les interactions sont ajoutées, cette symétrie est préservée sur une plus grande proportion du pic en terme de l'amplitude de la fonction. Autrement dit, la largeur à mi-hauteur est plus près du point où la symétrie circulaire existe, malgré que la distance  $q_{1/2} - \pi$  soit approximativement la même pour les deux cas. Ceci est illustré à la figure 3.7 qui montre que dans le cas avec interaction, le pic dans la direction  $\theta = \frac{\pi}{8}$  correspond à la moyenne de la fonction pour les deux directions  $\theta = 0$  et  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . En fait, la véritable longueur de corrélation correspond à la moyenne sur toutes les directions des longueurs de corrélations directionnelles. Ainsi, la première correction qui

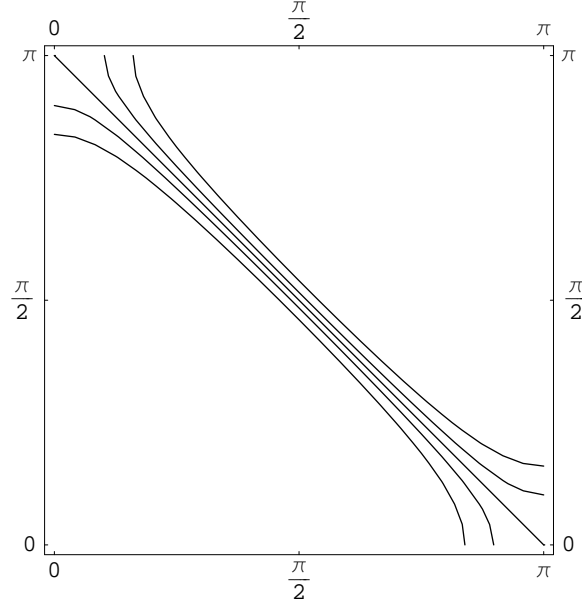


FIGURE 3.4 – Niveau de Fermi à  $n = 1$  pour  $t' = 0$  (droite au centre qui coïncide avec la ZBM) dans le premier quadrant de la zone de Brillouin. Les courbes à l'extérieur sont des excitations à  $\pm T$  pour  $T = 0.25t$  et celles à l'intérieur pour  $T = 0.1t$ .

peut être apportée à l'expression (3.2) consiste à imposer la symétrie carrée à la dérivée.

Lorsque  $\mathbf{q} \rightarrow \pi$ , la dérivée prend la même valeur pour toutes les directions. Mais si on regarde l'évolution de cette fonction en fonction de l'angle, les courbes de niveau adoptent une forme carrée comme le montre le premier graphique de la figure 3.5. Si on suppose que la fonction prend la même valeur le long des lignes allant de  $(\pi, \pi - \delta q)$  à  $(\pi - \delta q, \pi - \delta q)$  et allant de  $(\pi - \delta q, \pi - \delta q)$  à  $(\pi - \delta q, \pi)$ , on peut imiter le résultat numérique en corrigeant la dérivée selon  $\theta = \frac{\pi}{4}$  de la façon suivante afin d'imposer la symétrie carrée :

$$\frac{\partial^2 \chi_0}{\partial q^2}_{\theta=\frac{\pi}{4}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial^2 \chi_0}{\partial q_x^2} + \frac{\partial^2 \chi_0}{\partial q_y^2} \right) = \sqrt{2} \frac{\partial^2 \chi_0}{\partial q_x^2}, \quad (3.13)$$

où la dérivée croisée au maximum est nulle et donc, pour  $\theta = \frac{\pi}{8}$  :

$$\frac{\partial^2 \chi_0}{\partial q^2}_{\theta=\frac{\pi}{8}} = \frac{3}{\sqrt{5}} \frac{\partial^2 \chi_0}{\partial q_x^2}. \quad (3.14)$$

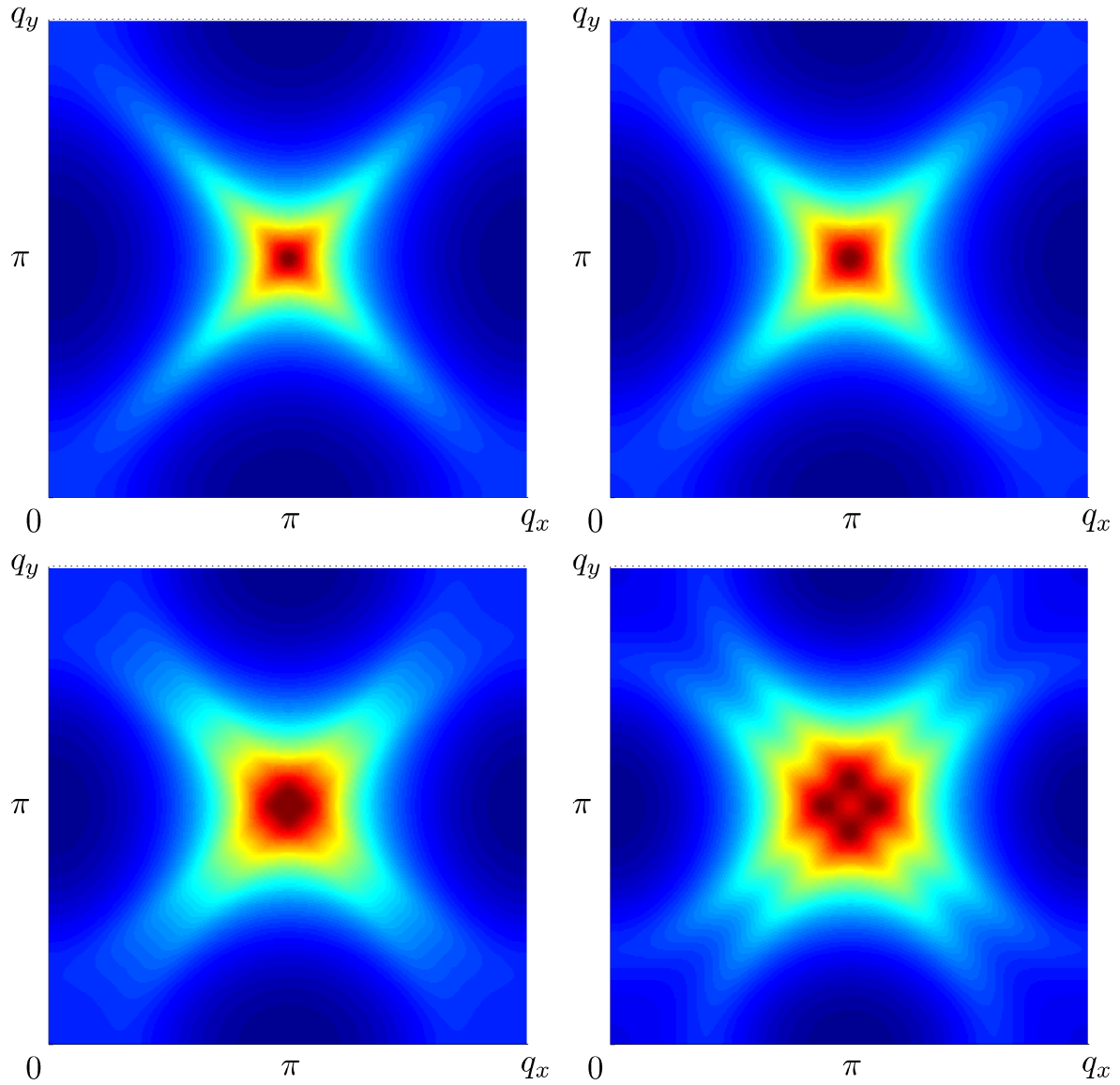


FIGURE 3.5 – Susceptibilité sans interaction tracée entre 0 et  $2\pi$  pour  $t' = 0$  et  $T = 0.1t$  pour des dopages de 0, 5, 10 et 15 %.

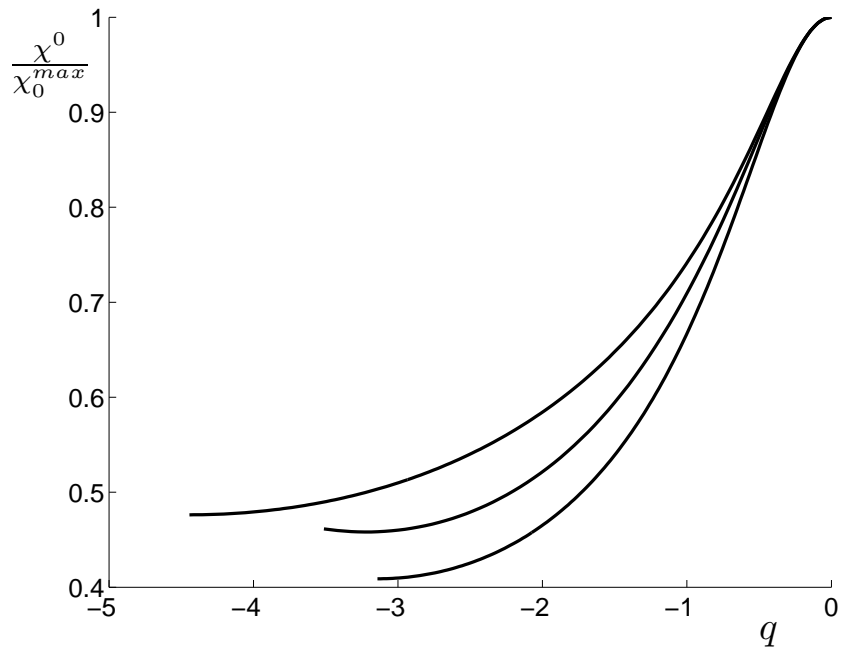


FIGURE 3.6 – Susceptibilité sans interaction (normalisée par la valeur maximale de  $\chi_0$ ) en coordonnées polaires pour les directions  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\frac{\pi}{8}$  et 0 pour  $\beta = 4$ ,  $n = 1$ ,  $t' = 0$ .

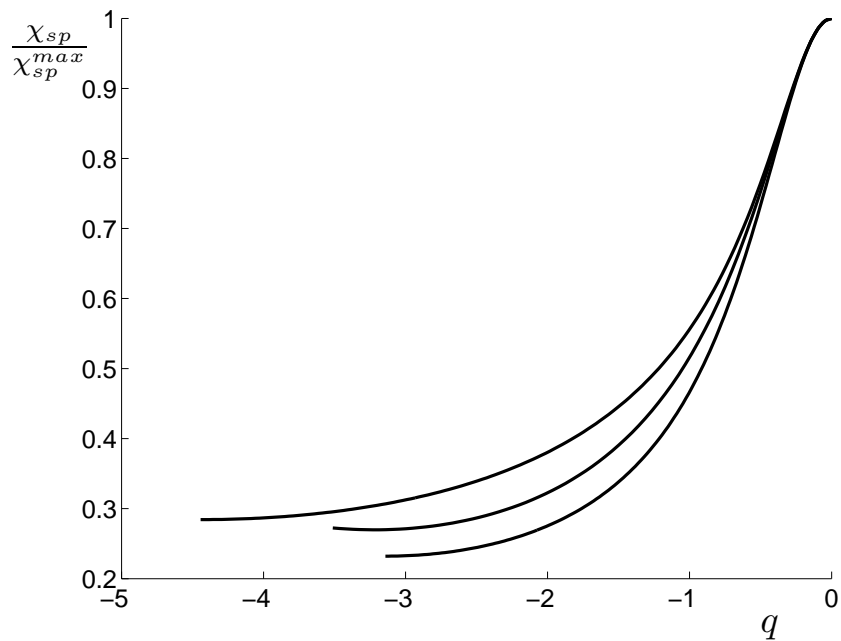


FIGURE 3.7 – Susceptibilité avec interaction (normalisée par la valeur maximale de  $\chi_{sp}$ ) en coordonnées polaires pour les directions  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\frac{\pi}{8}$  et 0 pour  $\beta = 4$ ,  $n = 1$ ,  $t' = 0$  et  $U = 4$ .

### 3.2.2 $t'$ nul, susceptibilité incommensurable

Lorsque le système est dopé, le niveau de Fermi se déplace selon l'évolution en remplissage et température du potentiel chimique. Lorsque la température est suffisamment élevée, les excitations thermiques dépassent le niveau d'énergie  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ . Dans ce cas, la susceptibilité possède toujours un maximum à  $(\pi, \pi)$  et elle est commensurable. Ainsi les considérations énoncées pour le demi-remplissage demeurent vraies en ce qui concerne la définition de la longueur de corrélation. À température fixe, lorsque le dopage augmente, on atteint un point  $(T, n)$  pour lequel ce pic se sépare en quatre pics. Ces pics se situent à des vecteurs d'onde  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi \pm \delta)$  et  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi \pm \delta, \pi)$  comme on peut le constater sur le quatrième graphique de la figure 3.5. On définit  $n_i$  le dopage pour lequel le pic n'est plus unique à  $(\pi, \pi)$ . Pour les dopage plus petit que  $n_i$ , le pic commence à s'aplatir de sorte que  $\xi_0 \rightarrow 0$  comme le montre l'évolution en dopage de la susceptibilité de la figure 3.5. Cela a pour conséquence d'invalider la définition de la longueur développée (3.2). Le terme  $\xi_0^2$  tend vers zéro ainsi cette définition de la longueur de corrélation de spin n'est plus représentative de la largeur à mi-hauteur. Cela indique que le développement asymptotique nécessite d'aller à un ordre plus élevé en  $q$  dans le développement de  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  autour du maximum (voir annexe B). Il est possible de faire le même constat si on fixe  $n$  et qu'on diminue la température. On définit la température  $T_i$ , température qui marque le changement de vecteur d'onde maximum  $(\pi, \pi)$  à un vecteur d'onde maximum incommensurable différent de  $(\pi, \pi)$ .

En analysant la forme de la longueur développée (3.2) pour la longueur de corrélation, il apparaît que son évolution en température dépend directement de l'évolution en température de  $U_{sp}$ ,  $\chi_0^{max}$  et de la dérivée seconde de  $\chi_0$  au maximum. Lorsque le système approche la frontière d'incommensurabilité, la courbure au maximum ne rend pas bien compte de l'élargissement du pic. Si le développement asymptotique très près du maximum est comparé à la fonction exacte, il semble y avoir correspondance. Mais à une certaine valeur de  $\mathbf{q}$ , le pic change de courbure et la largeur à mi-hauteur est beaucoup plus près du maximum que la dérivée ne le laisse paraître comme on le voit à la figure 3.8. La longueur pondérée (3.9) semble donner une meilleure évaluation bien qu'elle surestime l'inverse de la largeur à mi-hauteur.

De plus, la susceptibilité ne possède plus cette symétrie de révolution près du maximum. La fonction chute moins rapidement dans la direction  $\theta = 0$ . C'est ce qu'indiquent les figures 3.9 et 3.10. La longueur de corrélation est par conséquent sous-estimée. L'aplatissement du pic se fait sentir alors que la susceptibilité est commensurable, ainsi l'effet



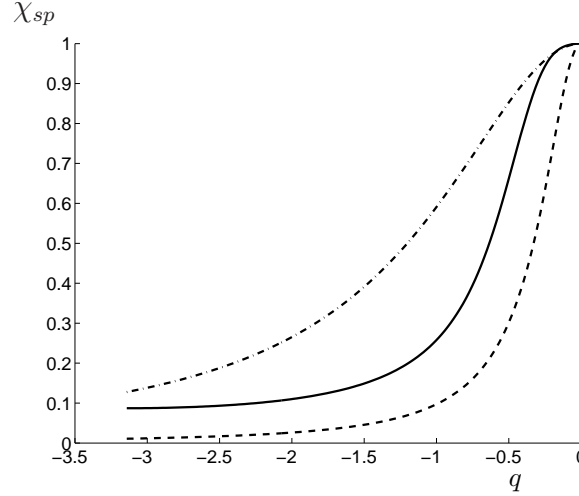


FIGURE 3.8 – Pour  $n = 0.84$ ,  $T = 0.19t$  avec  $t' = 0$  et  $U = 5.5t$  en fonction de  $q_x$  à  $q_y = \pi$ . La ligne pleine est le calcul de  $\chi_{sp}$  (normalisée par la valeur au maximum). La ligne pointillée ( $\cdot - \cdot -$ ) est le développement asymptotique avec la définition 3.2 pour la longueur de corrélation et les tirets ( $--$ ) sont le développement asymptotique avec la définition 3.9. La solution se trouve quelque part entre les deux.

de la présence de ce changement apparaît dans une gamme de paramètres relativement loin de la frontière comme telle. Si l'expression de la longueur pondérée (3.9) est utilisée comme définition de la longueur de corrélation, il semble y avoir un meilleur accord (figure 3.8) Mais dans ce cas, bien que la courbure soit mieux rendue, la susceptibilité est sous-estimée partout et la longueur de corrélation est surestimée.

Par ailleurs, cette approximation pour l'évaluation de la longueur de corrélation n'est valide que lorsque la susceptibilité est commensurable. Lorsqu'elle ne l'est plus, il faut considérer la contribution à la règle de somme des quatre pics sur lesquels se distribue le poids d'intégration. Ainsi pour que l'utilisation de la définition de la longueur pondérée soit quelque peu valide, il faut que les pics soient bien distincts et dans ce cas, la susceptibilité ne présente plus ce quasi plateau et d'autres problèmes surviennent. Ces derniers seront traités un peu plus tard. Par exemple, pour la susceptibilité sans interaction à  $T = 0.1t$  et  $n = 0.85$ , chaque pic respecte mal la symétrie de révolution nécessaire à l'établissement d'une définition simple et significative de la longueur de corrélation (voir figure 3.12). Si  $T$  et  $n$  sont choisis suffisamment loin de la frontière commensurable-incommensurable, il semble que la définition  $\xi_{sp}^2 = \xi_0^2 \frac{U_{sp}}{\delta U}$  fonctionne bien comme le montre la figure 3.11.

Lorsque les interactions sont prises en compte, pour  $T$  et  $n$  fixes, si  $U$  est trop faible, les

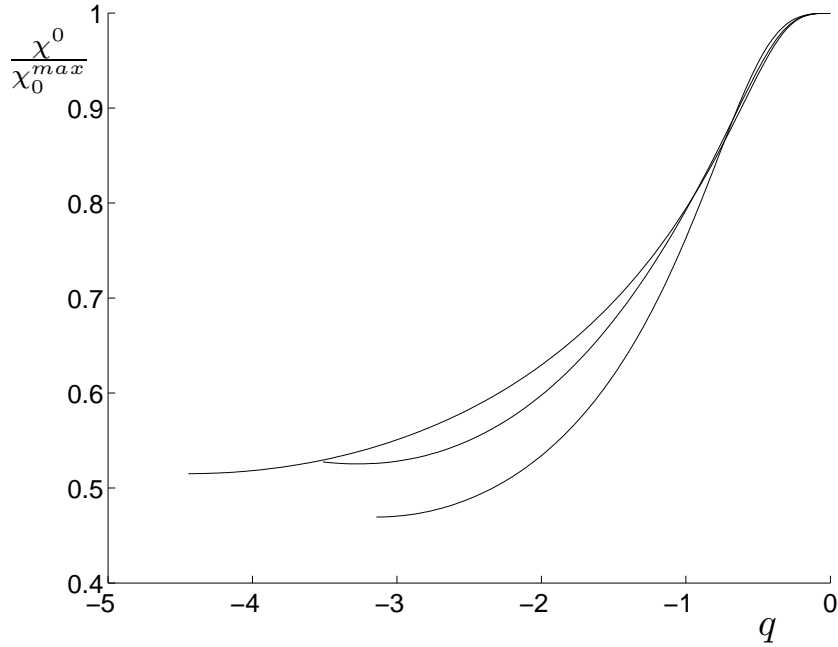


FIGURE 3.9 – Susceptibilité sans interaction (normalisée par la valeur maximale de  $\chi_0$ ) pour les directions  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\frac{\pi}{8}$  et 0 pour  $T = 0.19t$ ,  $n = 0.85$ ,  $t' = 0$ . La valeur de  $T_i$  se situe entre  $T = 0.18$  et  $T = 0.19$ .

quatre pics s'entrecroisent. Si  $U$  est suffisamment élevé, il y a peu de recouvrement entre les quatre pics et il est possible de considérer le développement habituel en sommant quatre pics indépendants et de préserver la définition de la longueur développée pour  $\xi_{sp}$ . Si le dopage augmente davantage en ajustant la température pour être à longueur de corrélation constante de manière à seulement faire varier la position du maximum, les quatre pics sont suffisamment éloignés les uns des autres pour, encore une fois, préserver la définition de la longueur de corrélation développée (3.2).

Un nouveau problème apparaît lorsque la température devient très petite. En effet, chaque pic devient asymétrique sauf selon l'axe de réflexion situé sur la frontière de la zone de Brillouin de sorte que le pic chute plus rapidement entre le maximum et  $\pi$  que dans la direction opposée (voir figure 3.14). Il faut donc trouver une autre façon fiable d'extraire cette quantité.

Ainsi, à  $t' = 0$ , le diagramme de commensurabilité est tracé à la figure 3.15. Les deux courbes supplémentaires délimitent la région pour laquelle il n'existe pas de définition analytique pour la longueur de corrélation. Pour la connaître, il faudrait carrément mesurer la largeur à mi-hauteur des pics et moyenner sur toutes les directions. Dans la région

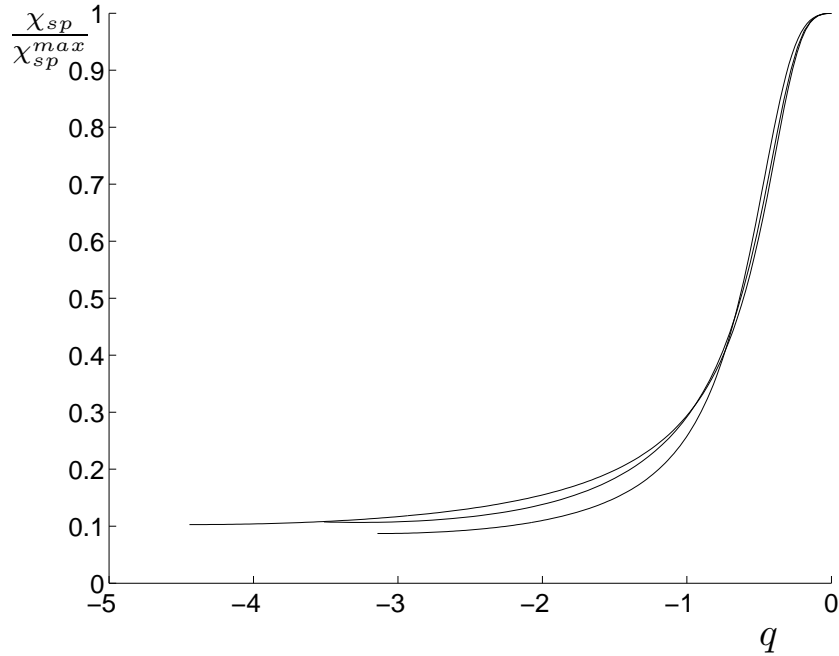


FIGURE 3.10 – Susceptibilité avec interaction (normalisée par la valeur maximale de  $\chi_{sp}$ ) pour les directions  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\frac{\pi}{8}$  et 0 pour  $T = 0.19t$ ,  $n = 0.85$ ,  $t' = 0$  et  $U = 5.5t$ . La valeur de  $T_i$  se situe entre  $T = 0.18$  et  $T = 0.19$ .

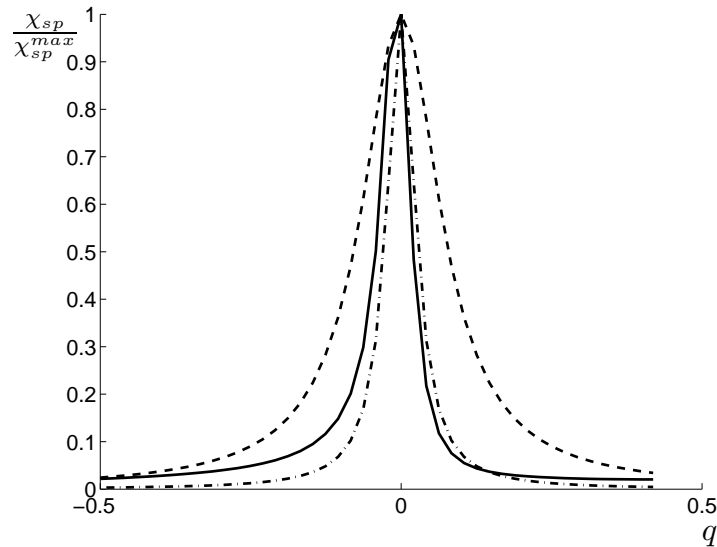


FIGURE 3.11 – Pour  $n = 0.82$ ,  $T = 0.03t$  avec  $t' = 0$ . La ligne pleine est le calcul de  $\chi_{sp}$  (normalisée par la valeur au maximum). La ligne pointillée ( $\cdot - \cdot -$ ) est le développement asymptotique avec la définition 3.2 pour la longueur de corrélation et les tirets ( $--$ ) sont le développement asymptotique avec la définition 3.9. En moyenne, pour les deux côtés du pic asymétrique de susceptibilité, le développement avec 3.2 fonctionne bien.

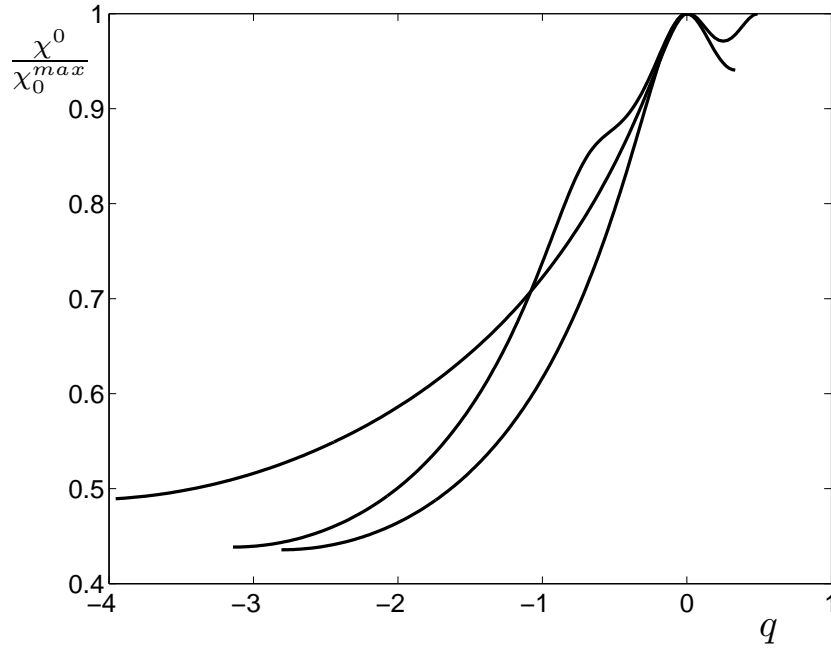


FIGURE 3.12 – Susceptibilité sans interaction (normalisée par la valeur maximale de  $\chi_0$ ) en coordonnées polaires pour les directions  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\frac{\pi}{2}$  et 0 pour  $\beta = 10$ ,  $n = 0.85$ ,  $t' = 0$ .

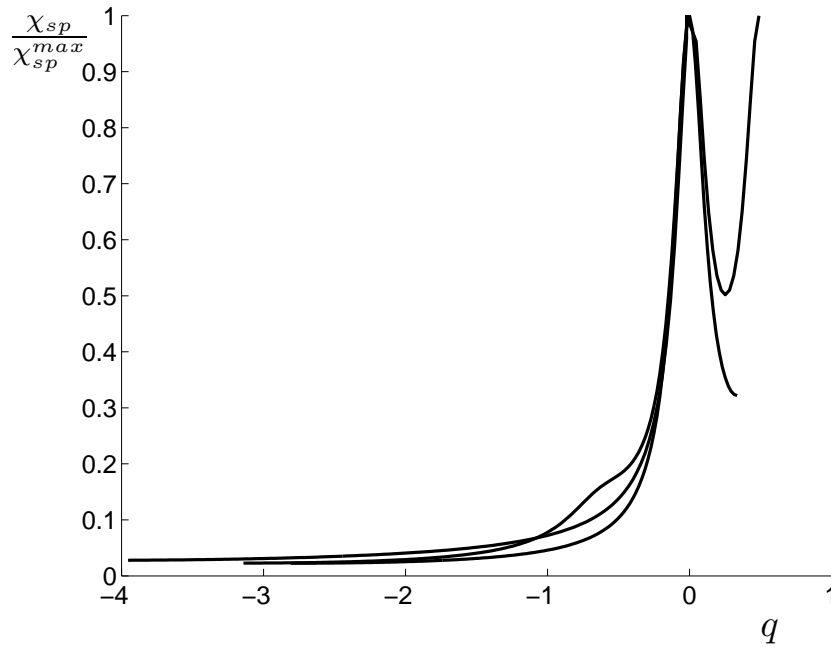


FIGURE 3.13 – Susceptibilité avec interaction (normalisée par la valeur maximale de  $\chi_{sp}$ ) en coordonnées polaires pour les directions  $\theta = \frac{\pi}{4}$ ,  $\frac{\pi}{2}$  et 0 pour  $\beta = 10$ ,  $n = 0.85$ ,  $t' = 0$  et  $U = 5.5t$ .

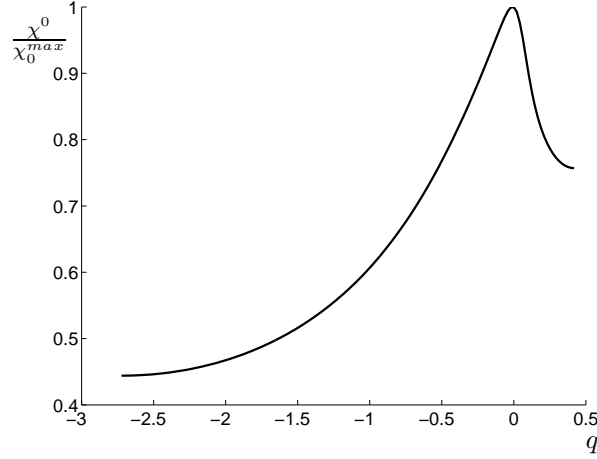


FIGURE 3.14 – Pour  $n = 0.82$ ,  $T = 0.03t$  avec  $t' = 0$ . Calcul de  $\chi^0$  (normalisée par la valeur au maximum) en fonction de  $q_x$  à  $q_y = \pi$ . Le pic n'est plus symétrique dans cette direction.

$T \rightarrow T_i^-$ , il demeure une ambiguïté quant à la définition de la longueur de corrélation. Dans les faits, la susceptibilité possède quatre pics. Mais leur recouvrement à  $(\pi, \pi)$  génère une amplitude qui est plus grande que la moitié de l'amplitude maximale comme le montre la figure 3.13. Faut-il donc considérer un seul pic ou quatre? Cette ambiguïté est levée lorsque les pics sont suffisamment loin les uns des autres pour que le minimum local à  $(\pi, \pi)$  soit plus petit que la moitié de la hauteur de chaque pic. Cela se produit à  $U$  et  $T$  fixes en augmentant le dopage, ce qui accentue l'incommensurabilité ( $q_{max}$  s'éloigne de  $\pi$ ). Cela se produit à  $n$  et  $T$  fixes en augmentant  $U$ , ce qui accentue l'effet de la renormalisation de  $\chi_0$ .

Il est important de mentionner que pour  $t' = 0$ ,  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$  le long de la frontière de la zone de Brillouin magnétique. Lorsque  $\epsilon(\mathbf{k}) \neq 0$ , il n'y a aucun point qui croise la zone de Brillouin magnétique. Ce *tout ou rien* qu'implique cette forme pour la relation de dispersion rend le passage commensurable à incommensurable plus drastique que pour les autres cas qui seront traités dans ce chapitre. L'évolution avec la température et le dopage de la frontière commensurable-incommensurable est surtout déterminée par la température. Bien que le potentiel chimique lui-même varie avec la température à dopage constant, son influence est moins grande que l'élargissement thermique qui permet d'inclure ou d'exclure les contributions à  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ . La figure 3.16 compare à  $n = 0.84$  constant les niveaux de Fermi pour deux températures différentes avec les excitations thermiques à  $\pm 2T$ .

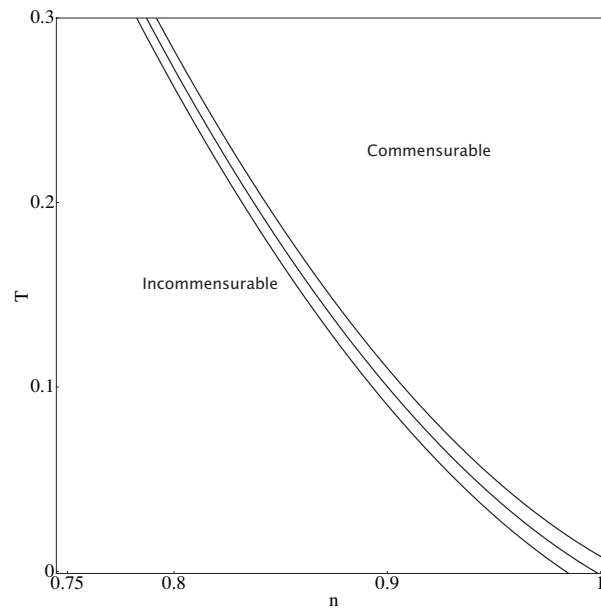


FIGURE 3.15 – Diagramme d'incommensurabilité pour  $t' = 0$ . Les courbes au-dessus et en dessous encadrent la région où la définition usuelle de la longueur de corrélation (équation (3.2)) ne peut être utilisée puisque au-dessus de la frontière le pic de  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  est plat et en dessous les quatre pics ne sont pas distincts. La courbe du centre correspond à la frontière commensurable-incommensurable, là où  $\xi_0 \rightarrow 0$ . Les courbes au-dessus et en dessous sont difficiles à déterminer précisément. Elles correspondent grossièrement aux valeurs de température, à  $n$  fixe, où  $\xi_0$  change de courbure pour atteindre la valeur zéro à la frontière.

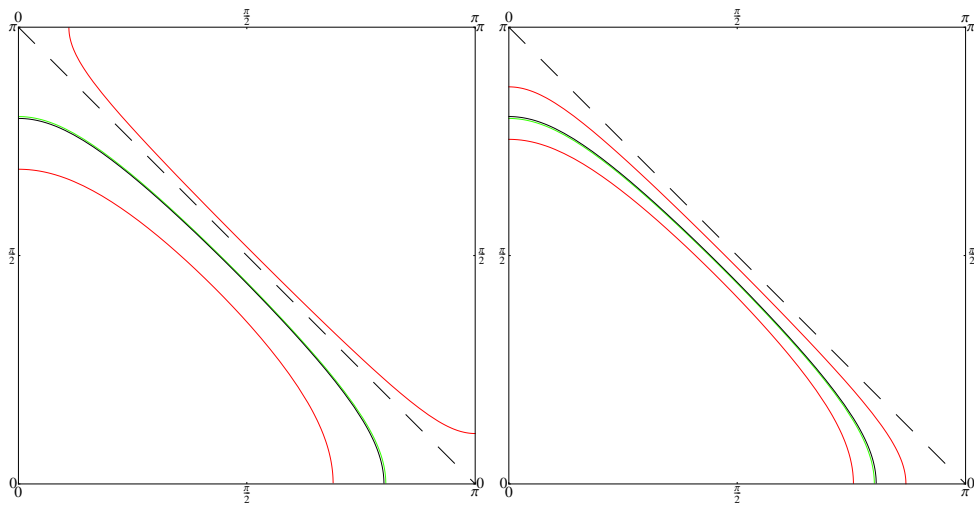


FIGURE 3.16 – Niveau de Fermi à  $n = 0.84$  pour  $t' = 0$  à  $U = 0$  dans le premier quadrant de la zone de Brillouin. La figure de gauche présente les résultats pour  $T = 0.25t$  où la susceptibilité est commensurable. L'autre est pour le cas incommensurable à  $T = 0.1t$ . Les courbes noires (confondues avec les lignes vertes) sont les niveaux de Fermi  $\mu = \epsilon(\mathbf{k})$ . Les courbes vertes sont les niveaux de Fermi pour l'autre température. Les courbes rouges sont celles à  $\pm 2T$  telles que  $\mu \pm 2T = \epsilon(\mathbf{k})$ . Les niveaux de Fermi sont sensiblement les mêmes contrairement à l'élargissement thermique. Autrement dit, à remplissage fixe, l'évolution en température du potentiel chimique est plus fin que l'effet de l'élargissement thermique. Ou encore  $|\mu(T_1) - \mu(T_2)| \ll 2(T_1 - T_2)$ .

### 3.2.3 $t'$ non nul

L'ajout d'un saut aux seconds ou troisièmes voisins modifie la forme des diverses courbes iso-énergétiques dans la relation de dispersion et donc modifie la forme du niveau de Fermi, à remplissage constant, par rapport au cas où ces intégrales de saut sont nulles. Aussitôt, il n'existe plus d'emboîtement de la surface de Fermi sans interaction, emboîtement qui coïncidait avec la frontière de la zone de Brillouin magnétique. Le niveau de Fermi peut croiser la zone de Brillouin magnétique de façon à ce qu'il existe huit points (ou moins) de la surface de Fermi connectés en paires par un vecteur du réseau réciproque  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . On définit le terme *points connectés* (par  $\mathbf{Q}$ ) pour désigner ces points.

Maintenant, ce qui détermine si la susceptibilité est commensurable ou non n'est plus la présence ou l'absence de la courbe  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$  dans le spectre d'excitations thermiques mais plutôt le volume de contributions au calcul de cette fonction à  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  versus un autre vecteur d'onde incommensurable. Autrement dit, la densité de points connectés qui contribuent à l'intégrale dans le calcul de la susceptibilité. Le graphique de droite de la figure 3.17 montre l'évolution de la surface de Fermi et des excitations thermiques pour le demi-remplissage. À  $T = 0.25t$ , toute la frontière de la zone de Brillouin magnétique est incluse dans le spectre d'excitations thermiques. Automatiquement, la susceptibilité est commensurable.

Par contre, pour  $T = 0.1t$ , ce n'est pas le cas comme en témoigne le graphique de gauche de la figure 3.17. Dans ce dernier cas, le volume d'excitations  $\frac{f(\epsilon(\mathbf{k})-\mu_0)-f(\epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})-\mu_0)}{\epsilon(\mathbf{k})-\epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})}$  dans l'espace  $\mathbf{k}$  compris à l'intérieur de la zone de Brillouin magnétique (vers  $\mathbf{q} = (0, 0)$ ) ne constitue pas la majeure partie du volume total dans le calcul de  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ . C'est plutôt les contributions le long de la frontière de la zone de Brillouin magnétique, près des points de croisement entre le niveau de Fermi et cette frontière, qui sont majoritaires et donc la susceptibilité est commensurable. Il est difficile de prévoir si à une plus basse température la susceptibilité demeurera commensurable puisque le potentiel chimique évolue avec la température. Mais si le potentiel chimique est fixé, dans ce cas, il pourrait survenir une température pour laquelle le volume autour de la zone de Brillouin magnétique sera moins important que les contributions incommensurables et alors la susceptibilité deviendra incommensurable. C'est ce qui explique le changement de courbure de la frontière commensurable-incommensurable pour le dopage aux trous. Puisque les points qui croisent la frontière de la zone de Brillouin magnétique pour le dopage aux électrons se trouvent entre  $(3\pi/4, \pi/4)$  et  $(\pi/4, 3\pi/4)$ , la surface de Fermi est plus parallèle à la frontière de la zone de Brillouin magnétique, ce qui fait qu'un faible intervalle



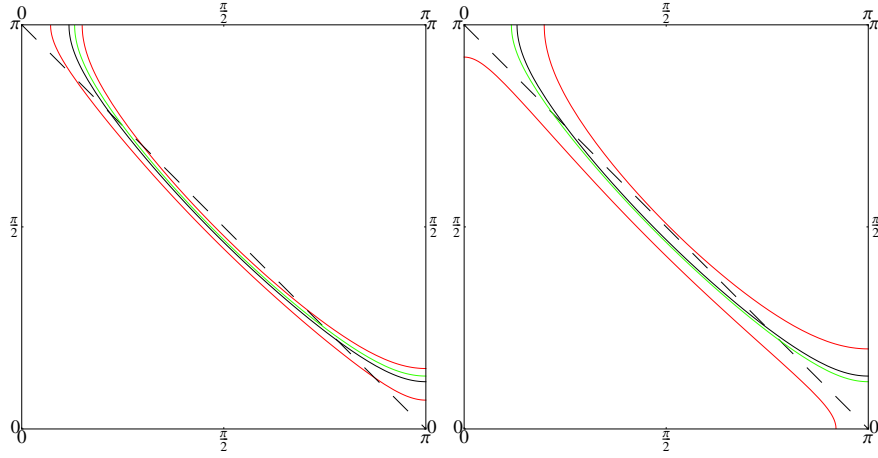


FIGURE 3.17 – Niveau de Fermi à  $n = 1$  pour  $t' = -0.1t$  à  $U = 0$  dans le premier quadrant de la zone de Brillouin. Les courbes à l'extérieur sont des excitations à  $\pm T$  pour  $T = 0.1t$  sur la figure de gauche (incommensurable) et  $T = 0.25t$  pour celle de droite (commensurable). Les potentiels chimiques calculés sont  $\mu = -0.2$  à  $T = 0.25t$  et  $\mu = -0.24$  à  $T = 0.1t$ . Les niveaux de Fermi sont en noir (confondus avec les lignes vertes). Les courbes vertes comparent les niveaux de Fermi pour les potentiels chimiques de l'autre température ( $-0.2$  à gauche et  $-0.24$  à droite). L'effet des excitations thermiques est plus important que la modification du potentiel chimique avec  $T$ . Autrement dit, à remplissage fixe, l'évolution en température du potentiel chimique est plus fin que l'effet de l'élargissement thermique. Ou encore  $|\mu(T_1) - \mu(T_2)| \ll 2(T_1 - T_2)$ . La diagonale indique la frontière de la ZBM.

de température est nécessaire pour rendre la susceptibilité commensurable. Pour le dopage aux trous, c'est l'opposé. La surface de Fermi croise la frontière de la ZBM avec un angle plus grand, ce qui fait en sorte que la susceptibilité peut devenir incommensurable à cause de la température, même si le niveau de Fermi croise la frontière de la ZBM. Le diagramme d'incommensurabilité pour  $t' = -0.1t$  se trouve à la figure 3.19.

Comme il fut mentionné, la relation de dispersion est telle que le niveau de Fermi ne fait que croiser la frontière de la zone de Brillouin magnétique en seulement deux ou un seul point dans le premier quadrant. Par exemple, à  $t' = -0.1t$ , lorsque le potentiel chimique est égal à zéro, la surface de Fermi touche en un point la frontière de la zone de Brillouin magnétique, à  $\mathbf{k} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ , et lorsque  $\mu = -0.4$ , elle touche les deux extrémités soit  $\mathbf{k} = (0, \pi)$ ;  $(\pi, 0)$  (il s'agit aussi de la position de la singularité de Van Hove). Pour tous les potentiels chimiques compris entre  $-0.4 \lesssim \mu \lesssim 0$ , la surface de Fermi croise la frontière de la zone de Brillouin magnétique en deux points (voir figure 3.18). Maintenant, si la portion de la frontière de la zone de Brillouin magnétique comprise

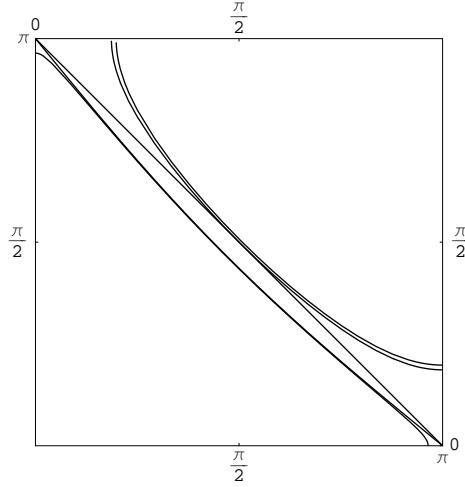


FIGURE 3.18 – Niveau de Fermi pour  $t' = -0.1t$  dans le premier quadrant de la zone de Brillouin. La diagonale montre la frontière de la zone de Brillouin magnétique. Les courbes sont celles pour les potentiels chimiques  $\mu = -0.41, -0.4, 0$  et  $0.05$  de gauche à droite respectivement.

autour du potentiel chimique fixé par la température et le remplissage choisis englobe une majeure partie de la frontière de la zone de Brillouin magnétique, on s'attend à ce que la susceptibilité soit commensurable. En d'autres termes, si pour un  $n$  et  $T$  donnés, le niveau de Fermi se situe entre  $-0.4 \lesssim \mu \lesssim 0$  et que la température est suffisamment élevée, la susceptibilité sera commensurable. Si  $\mu + \alpha T \sim 0$ , elle sera commensurable jusqu'aux très basses températures car lorsqu'on regarde à  $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ , la courbe iso-énergétique touche la ZBM en un point et donc la distance entre les deux points de croisement pour la courbe à  $\epsilon(\mathbf{k}) \sim \mu - \alpha T$  sont les deux frontières où se trouvent des états qui contribuent à la susceptibilité.

Ainsi, dans le cas où  $t'$  et  $t''$  sont différents de zéro, le potentiel chimique joue un rôle aussi important que la température elle-même, puisque aucune valeur de potentiel chimique présente un emboîtement, ce qui assurerait la commensurabilité du système. Par ailleurs, la présence de ces intégrales de saut brise la symétrie particule-trou. Les figures 3.20 et 3.21 montrent l'évolution de la fonction de Lindhard avec le dopage. Dans le cas du dopage aux électrons, l'évolution en dopage est qualitativement différente du cas  $t' = 0$ . En effet, à  $n = 1$  on remarque la présence d'un plateau qui diminue en taille à  $n = 1.10$  pour augmenter de nouveau près de la frontière commensurable-incommensurable. La figure 3.19 montre que pour les électrons, la surface de Fermi préserve la commensurabilité pour une plus grande plage de dopage que pour le dopage aux trous.

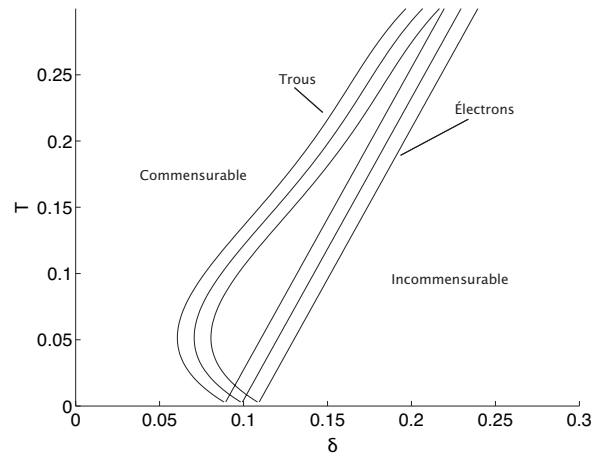


FIGURE 3.19 – Diagramme d’incommensurabilité pour  $t' = -0.1t$ . Les courbes au-dessus et en dessous désignent les régions où la définition usuelle de la longueur de corrélation (équation (3.2)) ne peut être utilisée puisque au-dessus de la frontière le pic de  $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$  est plat et en dessous les quatre pics ne sont pas distincts. La figure reporte les deux courbes en fonction du dopage pour le dopage aux trous ainsi que le dopage aux électrons, celle comportant un changement de courbure appartenant au cas du dopage aux trous. On remarque qu’à température nulle, la frontière est essentiellement la même pour les deux types de dopage puisque  $t'$  est petit. Par contre, à température finie, il existe une plus grande région d’incommensurabilité pour le système dopé aux trous. Il semble qu’à température élevée, les deux frontières tendent à se rejoindre. Ce qui explique la différence entre les deux courbes, hormi le bris de symétrie particule-trou est le parallélisme de la surface de Fermi avec la frontière de la ZBM.

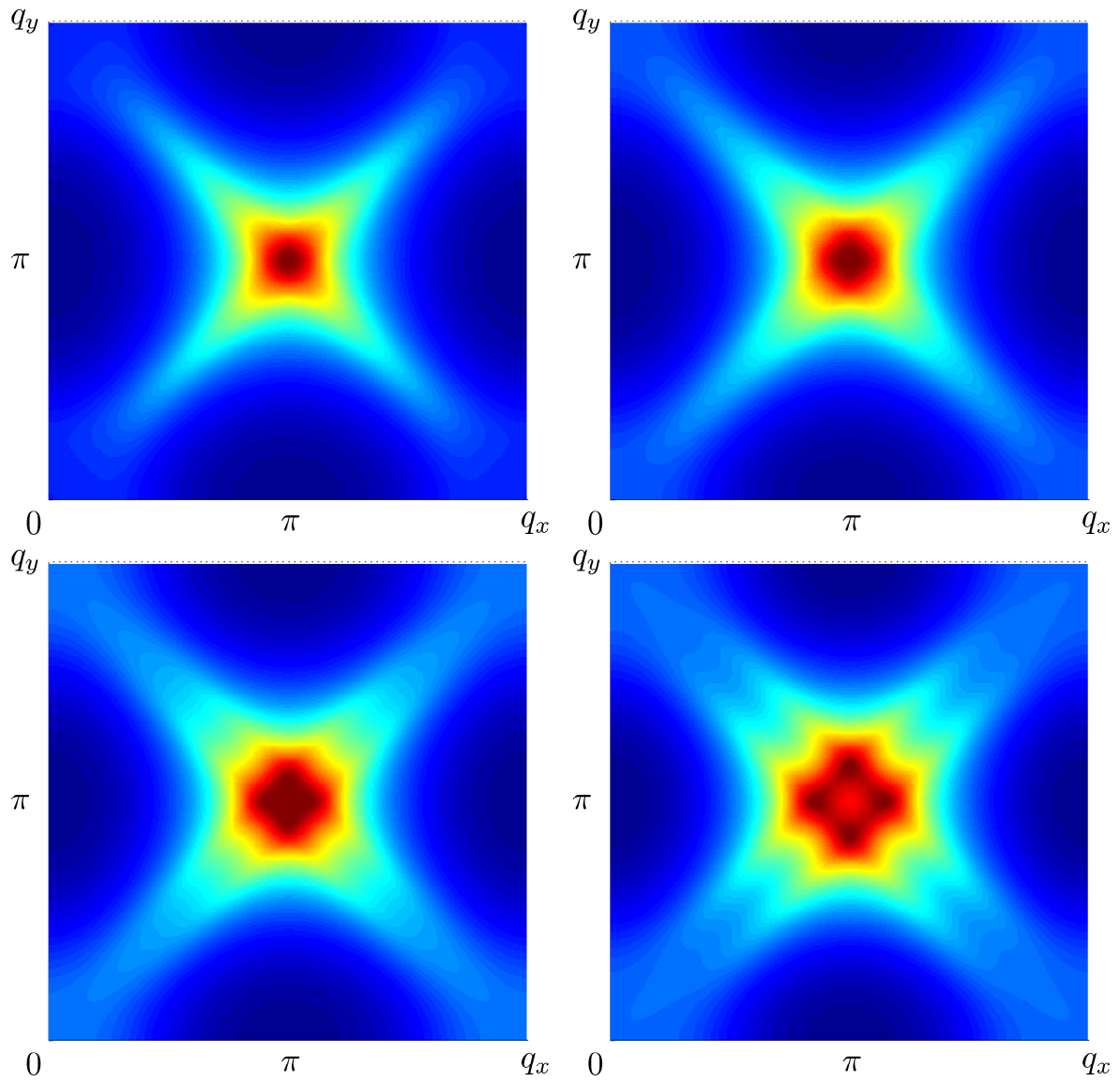


FIGURE 3.20 – Susceptibilité sans interaction tracée entre 0 et  $2\pi$  pour  $t' = -0.1t$  et  $T = 0.1t$  pour des dopages aux trous de 0, 5, 10 et 15%.

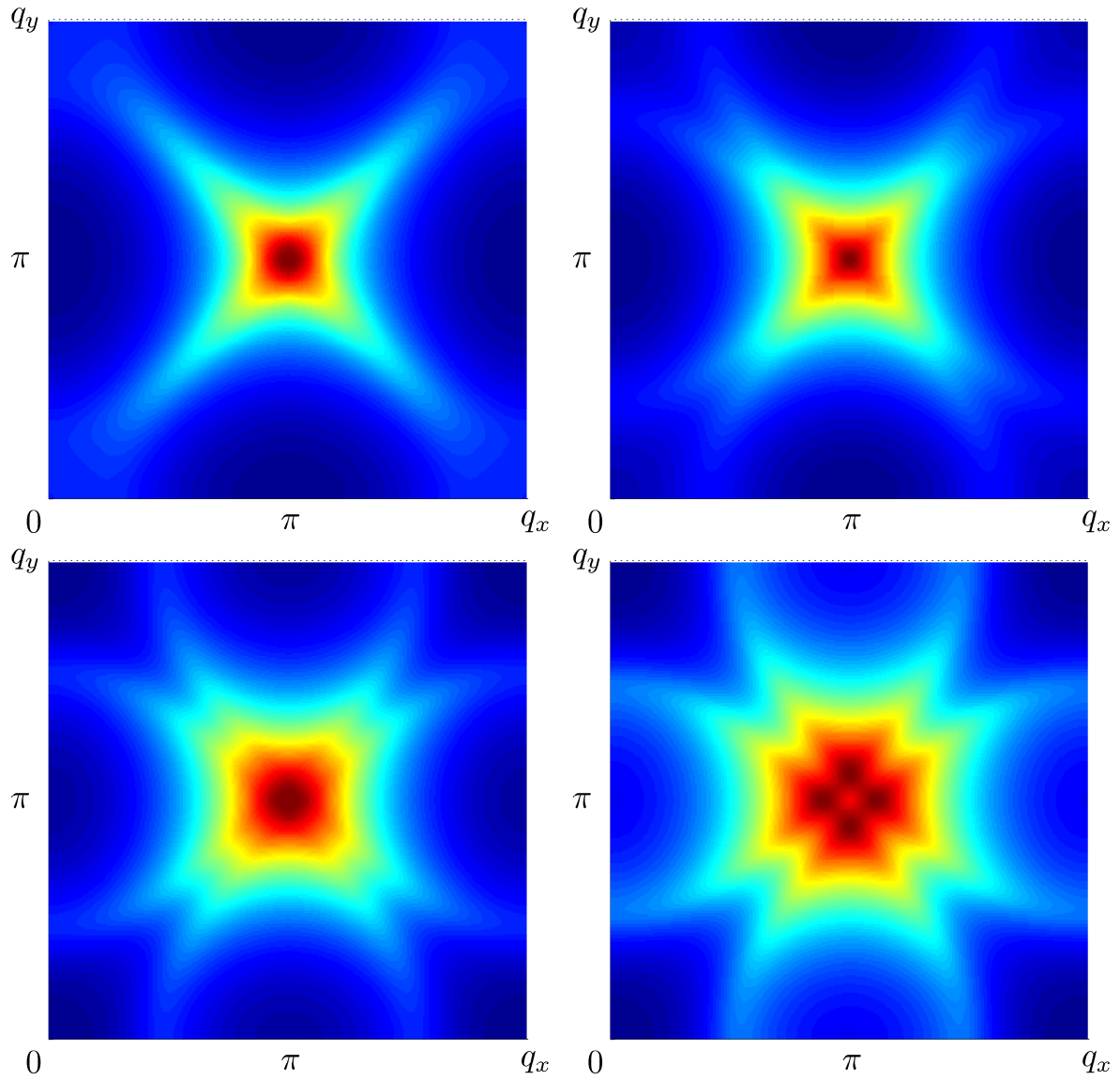


FIGURE 3.21 – Susceptibilité sans interaction tracée entre 0 et  $2\pi$  pour  $t' = -0.1t$  et  $T = 0.1t$  pour des dopages aux électrons de 0, 10, 15 et 20%. On remarque que l'évolution de la taille du plateau est qualitativement différente du cas du dopage aux trous (figure 3.20) ou du cas  $t' = 0$  (figure 3.5).

### 3.3 Sommaire de chapitre

- Lorsque le dopage et la température évoluent à partir de  $n = 1$ , la susceptibilité sans interaction voit son pic à  $(\pi, \pi)$  se séparer en quatre pics qui se déplacent le long des frontières de la zone de Brillouin.
- Les ou les maximums de susceptibilité avec interaction sont aux mêmes vecteurs d'ondes  $\mathbf{Q}_{max}$  que pour le cas sans interaction. Cela implique que la surface de Fermi avec interaction possède des points sur la surface de Fermi séparés d'une même distance  $\mathbf{Q}_{max}$  que pour le cas sans interaction là où la diffusion est maximale. Pour le cas avec interaction, ces points correspondent aux *points chauds* [1].
- Lorsque  $t' = 0$ , la relation de dispersion est telle que selon la température ou le dopage, l'emboîtement est soit parfait, soit absent.
- Lorsque  $t' \neq 0$ , la susceptibilité est maximale à  $(\pi, \pi)$  si les excitations thermiques englobent une section importante de la frontière de la ZBM.
- Les pics de susceptibilité sans interaction montrent clairement une symétrie carrée, conformément à la symétrie du réseau. Lorsque les interactions sont importantes, la renormalisation de la fonction de Lindhard pour ACDP induit une symétrie de révolution autour du maximum suffisamment robuste pour utiliser la symétrie de révolution autour du maximum pour le calcul de la susceptibilité avec interaction.
- Lorsque la susceptibilité avec interaction est faiblement incommensurable, il existe une ambiguïté au niveau de la définition de la longueur de corrélation.
- L'effet du  $t'$  sur l'incommensurabilité est tel que l'évolution des frontières dans le diagramme de phase est différent pour les trous et les électrons. La commensurabilité semble plus robuste pour le dopage aux électrons que pour le dopage aux trous.

# Chapitre 4

## Longueur de corrélation au voisinage d'un point critique quantique

L'une des particularités de la proximité d'un système à un point critique quantique est l'universalité de l'évolution de certaines fonctions physiques, notamment la longueur de corrélation et la susceptibilité, par l'intermédiaire des exposants critiques. Cette universalité se manifeste lorsque la longueur de corrélation est utilisée pour mettre à l'échelle les différents paramètres. Les fonctions de mise à l'échelle traduisent en quelque sorte la manière dont deux points du diagramme de phase peuvent avoir le même comportement physique et les mêmes grandeurs relatives pour les quantités concernées.

Dans ce chapitre, il sera question de phénomènes critiques pour le modèle de Hubbard faible couplage dans le contexte de la théorie ACDP. Les résultats seront présentés dans les chapitres 7 et 8. Cette section se limitera à l'établissement des outils de recherche de points critiques. D'abord une introduction aux phénomènes critiques sera brièvement faite. Ensuite sera dérivée la dépendance en température et dopage de la longueur de corrélation au voisinage du point critique qui permettra d'établir les règles de mise à l'échelle pour cette quantité dans le présent contexte. Il est important de mentionner que la longueur de corrélation possède des similarités avec celle dans le régime classique renormalisé seulement au point critique lui-même. Plus spécifiquement qu'en ce point, le développement asymptotique et la définition de la longueur développée de la longueur de corrélation sont les mêmes en ce point que dans le régime classique renormalisé. Par contre, dans le régime critique, ces deux formes pour leurs quantités respectives ne sont plus valides. Ainsi les considérations énoncées dans le chapitre précédent ne s'appliquent pas en général dans le contexte de ce chapitre.

## 4.1 Transition de phase quantique et point critique quantique

Lorsqu'un hamiltonien dépend d'un paramètre ajustable, il se peut que le choix de ce paramètre change radicalement la nature de l'état fondamental du système. Au point, à température nulle, où la valeur de ce paramètre marque le changement de phase se trouve une *transition de phase quantique* et ce point est alors désigné comme étant un *point critique quantique* lorsque cette transition est du second ordre. Lorsqu'une transition de phase se produit à température finie, on la dit *transition de phase classique* au sens où cette transition est régie par les fluctuations thermiques à grande longueur d'onde.

Par contre, lorsque la transition se produit à température nulle, un traitement quantique est nécessaire [8]. Dans ce cas, il s'agit de considérer le système comme possédant une dimension effective supplémentaire qui représente le temps imaginaire. Dès lors, il est possible de dériver au voisinage du point critique les quantités physiques voulues en termes de leurs exposants critiques. Des fonctionnelles de mise à l'échelle interviennent alors afin de décrire le comportement physique du système dans cette région.

Le modèle de Hubbard dans la gamme de paramètres explorés ( $|t'| < 0.2t$ ,  $1.3 < n < 0.7$ ) impose une forme de surface de Fermi sans interaction qui implique soit le parfait nesting ( $t' = 0$ ), soit la présence de *points connectés* par  $(\pi, \pi)$ , ce qui permet des excitations particule trou d'énergie arbitrairement basse. Cela fait en sorte que l'exposant dynamique  $z$ , tel que  $\xi_\tau \sim \xi_{sp}^z$ , prend la valeur  $z = 2$ . De plus, le système considéré est bidimensionnel  $d = 2$  de sorte que  $d + z = 4$  la dimension critique supérieure. Dans le cas d'une transition de phase classique, la dimension critique supérieur est  $d = 4$  puisque l'exposant dynamique n'intervient pas. La nature quantique de ce système ajoute en quelque sorte une dimension effective supplémentaire provenant des contributions dynamique ( $\omega \neq 0$ ) dans les diverses fonctions physiques d'intérêt. La présence d'excitations d'énergie arbitrairement basse ( $z = 2$ ) fait en sorte qu'un système bidimensionnel se situe à la dimension critique supérieure. Dans ce cas, des corrections logarithmiques interviennent dans la dérivation des lois d'échelle [71]. Ces corrections seront négligées dans ce travail. Par contre, l'approche ACDP introduit des corrections aux lois d'échelle qui pourraient être importantes à haute température et qui sont normalement négligées dans les autres approches. On en tient compte ici numériquement.

Les approches théoriques utilisées pour analyser ces phénomènes ne sont valides qu'au voisinage du point critique. Ainsi, les résultats obtenus ont un domaine de validité res-



treint et parfois inconnu. L'approche autocohérente à deux particules est une approche non perturbative qui s'affranchit de cette dernière restriction. Les exposants critiques sont obtenus à partir de la forme de la susceptibilité de spin près de la température de passage. En supposant l'existence d'un point critique, une dérivation de l'évolution de la longueur de corrélation au voisinage du point critique est obtenue. En traçant cette fonctionnelle judicieusement, le domaine de paramètres qui se situe à proximité du point critique est évident. En effet, partout où la mise à l'échelle est universelle, on se situe au voisinage du point critique. Les résultats quantitatifs seront présentés dans le chapitre 7. Dans la section suivante, la dérivation de la longueur de corrélation au voisinage du point critique est exposée.

### 4.1.1 Longueur de corrélation ACDP au voisinage d'un point critique quantique

La présence d'un point critique quantique dans le diagramme de phase a pour effet de modifier la dépendance en température de la longueur de corrélation. Dans le régime classique renormalisé, la longueur de corrélation possède une dépendance exponentielle. Elle passe d'une dépendance exponentielle à une dépendance en loi de puissance (en  $\frac{1}{\sqrt{T}}$ ) dans le régime critique. Afin de démontrer cet effet, il s'agit de supposer l'existence d'un point critique quantique et de voir comment cela affecte la longueur de corrélation.

Soit la règle de somme exprimée par son développement asymptotique à température finie avec  $z = 2$  :

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, q_n} \frac{A}{\Gamma |q_n| + q^2 + \xi^{-2}} = n - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \quad (4.1)$$

Ici, les paramètres  $A$ ,  $\Gamma$  et  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ , en général, dépendent de la température, du dopage et de  $U$ . À  $T = 0$ , elle prend plutôt la forme suivante :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A}{\Gamma |\omega| + q^2 + \xi^{-2}(0)} = n - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle, \quad (4.2)$$

où ici tous les paramètres adoptent les valeurs pour  $T = 0$ . La valeur absolue impliquée dans cette forme pour la susceptibilité peut être obtenue par la dérivation qui suit. Soit :

$$\frac{A\omega}{x^2 + \omega^2}, \quad (4.3)$$

la forme lorentienne du poids spectral. La susceptibilité s'écrit alors :

$$\chi(iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{A}{\omega - iq_n} \frac{\omega}{x^2 + \omega^2}. \quad (4.4)$$

Cela conduit à :

$$\chi(iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{A}{\omega - iq_n} \frac{\omega}{-2i\omega} \left[ \frac{1}{x + i\omega} - \frac{1}{x - i\omega} \right] \quad (4.5)$$

$$= \frac{A}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{\omega - iq_n} \left[ \frac{1}{\omega - ix} + \frac{1}{\omega + ix} \right]. \quad (4.6)$$

Pour  $x > 0$  et  $q_n > 0$  par le calcul des résidus en intégrant sur le chemin qui passe le long de l'axe réel en faisant un demi-cercle à l'infini dans le demi-plan complexe supérieur La susceptibilité devient :

$$\chi(iq_n) = A \frac{i}{iq_n + ix} = \frac{A}{q_n + x} \quad (4.7)$$

Si par contre,  $q_n < 0$  :

$$\chi(iq_n) = A \frac{i}{ix - iq_n} = \frac{-A}{q_n - x} = \frac{A}{-q_n + x} \quad (4.8)$$

ce qui démontre bien que :

$$\chi(iq_n) = \frac{A}{|q_n| + x} \quad (4.9)$$

Si  $n - 2\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  est à peu près indépendant de  $T$ , l'équation (4.1) est égale à l'équation (4.2) de sorte que la déviation de la règle de somme au point critique correspond à la soustraction de la règle de somme au point critique avec celle en son voisinage :

$$\frac{1}{N} \sum_q \left( T \sum_n \frac{1}{\Gamma|q_n| + q^2 + \xi^{-2}} - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2} \right) = 0, \quad (4.10)$$

où  $\xi^{-2}(0)$  (à  $T = 0$ ) est nul. S'il y avait absence de point critique,  $\xi^{-2}(0)$  serait toujours d'une grandeur finie (non nulle) et la dérivation précédente serait incorrecte.

En procédant comme le fait Subir Sachdev [8] au chapitre 5, expression (5.67) :

$$0 = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left( T \sum_n \frac{1}{\Gamma|q_n| + q^2 + \xi^{-2}} - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2 + \xi^{-2}} \right) \quad (4.11)$$

$$+ \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left( \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2 + \xi^{-2}} - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2} \right), \quad (4.12)$$

où on ajoute et soustrait la quantité :

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2 + \xi^{-2}}. \quad (4.13)$$

Sachant que :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + a} = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma\omega + a}, \quad (4.14)$$

et en posant  $\Omega \rightarrow \infty$  :

$$2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma\omega + a} = \frac{1}{\Gamma\pi} \int_0^{\Omega\Gamma} dx \frac{1}{x + a}, \quad (4.15)$$

il advient que :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + a} \quad (4.16)$$

$$= \frac{1}{\pi\Gamma} \ln \left( \frac{\Omega\Gamma}{a} \right). \quad (4.17)$$

Dans ce cas, l'équation (4.12) devient :

$$\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left( \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2 + \xi^{-2}} - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2} \right) \quad (4.18)$$

$$= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\pi\Gamma} \ln \left( \frac{q^2 \xi^2}{1 + q^2 \xi^2} \right) = \xi^{-d} \int \frac{d^d x}{(2\pi)^d} \frac{1}{\pi\Gamma} \ln \left( \frac{x^2}{1 + x^2} \right) \quad (4.19)$$

En supposant par Euler-Maclaurin que le premier terme domine (voir équation (B.3) dans l'annexe B), la somme sur les fréquences de Matsubara s'écrit (en utilisant la même fréquence de troncature que plus tôt) :

$$2T \sum_{n \geq 0} \frac{1}{\Gamma q_n + q^2 + \xi^{-2}} = \frac{2T}{2\pi T} \left[ \int_0^\Omega \frac{d\omega}{\Gamma\omega + q^2 + \xi^{-2}} \right] + \frac{T}{q^2 + \xi^{-2}}. \quad (4.20)$$

De cette façon, les deux intégrales de l'équation (4.11) se réduisent à  $\frac{T}{q^2 + \xi^{-2}}$  et donc l'équation (4.12) devient :

$$\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{T}{q^2 + \xi^{-2}} + \xi^{-d} \int \frac{d^d x}{(2\pi)^d} \frac{1}{\pi\Gamma} \ln \left( \frac{x^2}{1+x^2} \right) = 0. \quad (4.21)$$

En posant :

$$I_1 = - \int \frac{d^d x}{(2\pi)^d} \frac{1}{1+x^2} \quad (4.22)$$

et

$$I_2 = \int \frac{d^d x}{(2\pi)^d} \frac{1}{\pi\Gamma} \ln \left( \frac{x^2}{1+x^2} \right), \quad (4.23)$$

l'équation (4.21) prend la forme :

$$-\xi^{-d}(T\xi^2)I_1 + \xi^{-d}I_2 = 0 \quad (4.24)$$

qui conduit à

$$\xi^2 = \frac{1}{T} \frac{I_2}{I_1}. \quad (4.25)$$

Et donc le comportement en température de la longueur de corrélation prend bien la forme  $\xi \propto \frac{1}{\sqrt{T}}$ .

Il est aussi possible de refaire cette dérivation mais à température nulle en fonction du dopage. En rappelant la règle de somme à  $T = 0$  :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A}{\Gamma|\omega| + q^2 + \xi^{-2}(0)} = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \quad (4.26)$$

Au point critique, elle prend la forme :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A}{\Gamma|\omega| + q^2} = n_c - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle \quad (4.27)$$

En supposant encore une fois que la double occupation varie peu autour du point critique, et en soustrayant les deux équations précédentes, on trouve :

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int \left[ \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2 + \xi^{-2}(0)} - \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\Gamma|\omega| + q^2} \right] = \alpha(n - n_c) \equiv \alpha\Delta n. \quad (4.28)$$

Le coefficient  $\alpha$  est nécessaire pour tenir compte de l'amplitude des membres de gauche (supposés égaux) et de permettre une dépendance linéaire en  $n$  pour la double occupation en effectuant un développement de Taylor de la double occupation  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle(n \rightarrow n_c) = \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle(n_c) + \left[ \frac{d\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle}{dn} \right]_{n=n_c} \Delta n$ . Or le membre de gauche est strictement égal à l'expression trouvée à l'équation (4.19). Alors en utilisant la définition de  $I_2$ , pour  $\Delta n$  on trouve :

$$\xi^{-d} \frac{I_2}{\alpha} = \Delta n \quad (4.29)$$

$$\Rightarrow \xi^d = \frac{1}{\Delta n} \frac{I_2}{\alpha}. \quad (4.30)$$

Dans le cas particulier où  $d = 2$ , la longueur de corrélation varie comme l'inverse de la racine carrée de  $n$ , ce qui est analogue au comportement en température. Par contre, si la dimensionnalité est différente, le comportement en  $n$  sera différent de celui pour la température.

Maintenant qu'il fut établi que pour  $n = n_c$ ,  $\xi \propto \frac{1}{\sqrt{T}}$  et qu'en deux dimensions, à  $T = 0$ ,  $\xi \propto \frac{1}{\sqrt{(n-n_c)}}$ , il s'agit désormais d'établir  $\xi(T, n)$ . Soit :

$$\xi \sim sf(Ts^{y_t}, \Delta ns^{y_n}) \quad (4.31)$$

et  $Ts^{y_t} = 1$ . Si  $\Delta n = 0$ , cette expression devient :

$$\xi \sim \frac{1}{T^{1/y_t}} f(1, 0). \quad (4.32)$$

Or, en ce point, il fut établi que  $\xi \sim \frac{1}{\sqrt{T}}$ . Donc  $y_t = 2$ . Maintenant, si  $T = 0$ , de façon analogue, on trouve que  $y_n = 2$ . Ainsi, avec  $g(x) = f(1, x)$  :

$$\xi \sim sf(Ts^2, \Delta ns^2) \quad (4.33)$$

$$\sim \frac{1}{\sqrt{T}} g\left(\frac{\Delta n}{T}\right). \quad (4.34)$$

Lorsqu'un dopage critique  $n_c$  est bien identifié, un graphique de  $\xi\sqrt{T}$  en fonction de  $\frac{\Delta n}{T}$  devrait donner une fonctionnelle universelle.

Par ailleurs, il est possible de refaire la dérivation faite pour le cas  $n = n_c$  et  $T = 0$  pour un cas général ou en un point,  $n = n_c$  et  $T = 0$  et à l'autre point,  $n = n_c + \delta n$  et  $T = \delta T$ . Ce calcul revient à combiner les deux dérivations ci-dessus et le résultat est le suivant :

$$-\xi^{-d}(T\xi^2)I_1 + \xi^{-d}I_2 = \alpha\Delta n \quad (4.35)$$

En général, cette équation ne peut être résolue. Il faut le faire pour chaque dimensionnalité particulière. Pour  $d = 2$ , cette expression devient :

$$\xi^2 = \frac{I_2}{(I_1T + \alpha\Delta n)}, \quad (4.36)$$

qui devient :

$$\xi^2 = \frac{1}{T} \left(\frac{I_2}{\alpha}\right) \left(\frac{I_1}{\alpha} + \frac{\Delta n}{T}\right)^{-1}. \quad (4.37)$$

Cette expression a bien la bonne dépendance extraite plus tôt.

Afin de mettre en évidence l'existence d'un point critique quantique, il faut certains ingrédients. D'abord, il faut obtenir le comportement en température et dopage approprié pour la longueur de corrélation conforme à l'équation (4.34). Un second est d'obtenir avec cette longueur de corrélation la mise à l'échelle de la susceptibilité telle que :

$$\chi_{sp}^R(\mathbf{q}, \omega) \approx \xi^{\gamma/\nu} X(\mathbf{q}\xi, \omega\xi^z), \quad (4.38)$$

où  $X(\mathbf{q}\xi, \omega\xi^z)$  est la fonction d'échelle. Or, il se trouve que le développement asymptotique pour la susceptibilité possède déjà cette forme [68] :

$$\chi_{sp}^R(\mathbf{q}, 0) \approx \frac{2\xi_{sp}^2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{1 + (\xi_{sp}q)^2}, \quad (4.39)$$

Avec l'origine située à  $\mathbf{Q}_{max}$ . Il existe aussi une forme plus générale qui fait intervenir les fréquences non nulles. Mais seule la fréquence nulle sera traitée ici. Avec ce développement, il s'agit de montrer que  $\frac{\chi_{sp}(\xi\mathbf{q})}{\xi^2}$  est bien une fonctionnelle universelle. La mise à l'échelle de la susceptibilité sera traitée en détails dans le chapitre 7. Il faut préciser que ce développement n'est valable dans le régime critique qu'au point critique lui-même.

## 4.2 Sommaire de chapitre

- La longueur de corrélation varie comme  $\frac{1}{\sqrt{T}}$  à  $n = n_c$ .
- La longueur de corrélation varie comme  $\frac{1}{\sqrt{\Delta n}}$  à  $T = T_c = 0$ .
- L'évolution de la longueur de corrélation avec  $T$  et  $n$  est  $\xi^2 \sim \frac{1}{T} g\left(\frac{\Delta n}{T}\right) \sim \frac{1}{T} \left(\frac{I_2}{\alpha}\right) \left(\frac{I_1}{\alpha} + \frac{\Delta n}{T}\right)^{-1}$ .
- Les résultats des trois points précédents s'appliquent seulement pour  $d = 2$  avec  $z = 2$ .

# Chapitre 5

## Thermodynamique

Un des objectifs de ce travail consiste à décrire le comportement thermodynamique du modèle de Hubbard à faible couplage. Dans ce chapitre, il sera question des diverses fonctions thermodynamiques d'intérêt. Principalement, il sera question du grand potentiel thermodynamique ainsi que de l'énergie libre. De ces fonctions, il est possible de déduire les fonctions thermodynamiques, comme par exemple, l'entropie, la chaleur spécifique et le potentiel chimique. À la température de passage, certaines de ces fonctions présentent un comportement plutôt particulier. Les résultats seront traités dans les prochains chapitres. Dans celui-ci, il sera question des dérivations générales. Un autre aspect traité consiste à compléter l'étude de l'uniformité thermodynamique ACDP faite précédemment [4].

### 5.1 Grand potentiel thermodynamique

Lorsque l'hamiltonien du système peut s'écrire comme  $H = H_0 + V$ , où  $H_0$  est l'hamiltonien du système sans interaction, le potentiel grand canonique (par site) s'écrit :

$$\Omega(T, \mu, U) = -\frac{T}{N_s} \ln \text{Tr} [e^{-\beta(H_0 + V - \mu N)}]. \quad (5.1)$$

Pour le modèle de Hubbard,  $V = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$ . À partir de l'équation 5.1, on peut déduire que :

$$\left( \frac{\partial \Omega(T, \mu, U)}{\partial U} \right)_{\beta, \mu} = \frac{1}{U} \frac{\langle V \rangle}{N_s} \quad (5.2)$$



où  $\langle V \rangle$  représente la valeur moyenne du terme d'interaction de l'hamiltonien. Par exemple, pour le modèle de Hubbard, le membre de droite de l'équation représente directement la double occupation. Ainsi, en intégrant ce terme par rapport à  $U$ , il est possible d'obtenir le grand potentiel :

$$\Omega(T, \mu, U) = \Omega^0(T, \mu) + \int_0^U dU' \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle_{U'}, \quad (5.3)$$

où  $\Omega^0(T, \mu) = \Omega(T, \mu, U = 0)$ . On remarque alors que le grand potentiel s'exprime comme le grand potentiel sans interaction plus une intégrale. La fonction  $\Omega^0(T, \mu)$  est connue exactement. Il s'agit maintenant de calculer l'intégrale.

L'énergie interne s'écrit alors :

$$E(T, \mu) = \Omega(T, \mu) - T \left( \frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial T} \right)_{\mu} - \mu \left( \frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_{T} \quad (5.4)$$

$$= \Omega(T, \mu) + TS(T, \mu) + \mu n \quad (5.5)$$

$$\Rightarrow \Omega(T, \mu) = E(T, \mu) - TS(T, \mu) - \mu n. \quad (5.6)$$

L'énergie libre est reliée au grand potentiel par une transformation de Legendre :  $F(T, n) = \Omega(T, \mu(T, n)) + \mu(T, n)n$ . Le potentiel chimique est obtenu en inversant l'équation  $\left( \frac{\partial \Omega(T, \mu)}{\partial \mu} \right)_{T} = -n(T, \mu)$ .

## 5.2 Uniformité thermodynamique pour l'approche autocohérente à deux particules ; suite et fin

Dans le cas où la solution exacte de l'hamiltonien n'est pas connue, comme c'est le cas du modèle de Hubbard, selon la nature de l'approximation utilisée pour tenter de le résoudre, il est possible que certaines lois physiques ne soient pas respectées. Par exemple, la conservation du nombre de particules ou le principe de Pauli. La violation du principe de Pauli se manifeste par exemple lorsque  $\langle n_{\uparrow} \rangle \neq \langle n_{\downarrow} \rangle$  alors qu'aucun champ externe n'est appliqué. Un autre aspect qui peut être ébranlé est l'uniformité thermodynamique.

**Définition :** Uniformité thermodynamique *Il y a uniformité thermodynamique si toutes les manières indépendantes possibles de calculer une même quantité thermodynamique donnent le même résultat.*

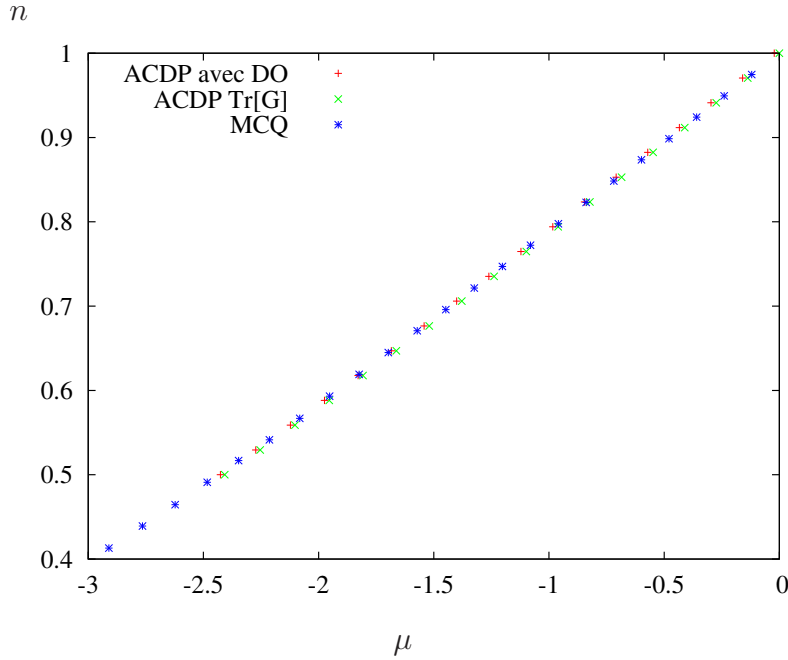


FIGURE 5.1 – Remplissage en fonction du potentiel chimique calculé avec  $\Omega(T, \mu, n) = \Omega^0(T, \mu) + \int dU' \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(2)}$  (+, DO), directement avec la fonction de Green ( $\times$ , Tr[G]) et avec les simulations Monte Carlo Quantique ( $*$ , MCQ) pour  $U = 2$  à  $T = 0.1t$  avec un système  $8 \times 8$  pour l’approche ACDP au second ordre.

Évidemment, l’uniformité est respectée pour une solution exacte. Si le grand potentiel thermodynamique est calculé directement par une approche diagrammatique, il n’est pas évident que le calcul d’une fonction thermodynamique à partir de la fonction de Green donne le même résultat qu’avec le grand potentiel. Avec une approche diagrammatique à la Kadanoff-Baym [22, 23], cette uniformité est assurée en faisant une présélection des diagrammes conformes à l’uniformité. Par contre, il reste une infinité de choix de classes de diagrammes et selon le choix fait parmi ceux restant, d’autres lois peuvent être violées, comme le principe de Pauli pour l’approximation FLEX [2].

Dans le cas de l’approche ACDP, puisque les règles de somme pour le spin et la charge sont respectées intrinsèquement, il n’est pas évident que l’uniformité soit préservée. Or, il fut démontré numériquement qu’au second ordre c’est le cas [4]. Dans ce précédent travail, la correspondance avec l’intégrale sur la double occupation ne fut pas établie. La figure 5.1 confirme que l’uniformité est respectée numériquement avec l’intégrale sur la double occupation aussi. Cette uniformité fut vérifiée dans une gamme de paramètres relativement éloignée du régime classique renormalisé. La figure 3.8 de la référence [4] se trouve à la figure 5.2 de ce présent document. On y voit que l’uniformité ne fonctionne

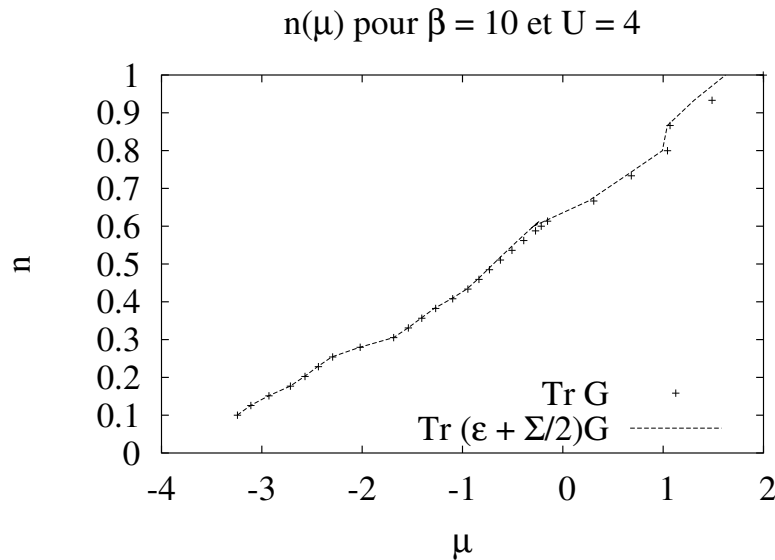


FIGURE 5.2 – Comparaison du calcul du potentiel chimique (avec le terme  $U/2$  ajouté) avec l'énergie libre calculée par l'énergie interne à l'ordre deux avec le calcul du potentiel chimique avec la fonction de Green directement pour  $U = 4$ ,  $t' = 0$  à  $T = 0.1t$  pour un réseau  $8 \times 8$ . L'entrée dans le régime classique renormalisé se fait à  $n \approx 0.9$ .

plus très bien pour des remplissages de  $n = 0.85$  et plus, à basse température. Cela correspond à l'entrée dans le régime classique renormalisé. Il se trouve que pour cette gamme de paramètres, le dopage qui marque l'entrée dans le régime classique renormalisé se situe à  $n = 0.9$  comme il sera démontré dans le prochain chapitre.

### 5.3 Thermodynamique pour ACDP

Afin d'exécuter les calculs avec l'approche autocohérente à deux particules, il faut reprendre les expressions générales (voir annexe A) et leur appliquer les valeurs ACDP. Il faut se souvenir des éléments introduits à la section 2.4.1 du chapitre 2. Pour le premier ordre, avec la double occupation, on trouve :

$$\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(1)} = \frac{1}{U} Tr \left[ \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] \quad (5.7)$$

$$= \frac{1}{U} Tr \left[ \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G^{(0)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] = \frac{U_{sp}}{U} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle \quad (5.8)$$

$$= \frac{U_{sp}}{U} \frac{n^2}{4}, \quad (5.9)$$

où la valeur de  $U_{sp}$  est extraite directement du calcul de la règle de somme pour la susceptibilité de spin et où  $\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$  est obtenue avec l'équation (2.43) du chapitre 2. Au second ordre, c'est plutôt

$$\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(2)} = \frac{1}{U} Tr \left[ \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] \quad (5.10)$$

où la fonction de Green s'écrit comme :  $(G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n))^{-1} = G^{(0)}(\mathbf{k}, ik_n)^{-1} + \delta\mu - \Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ , où  $\mu_0 + \delta\mu = \mu^{(2)}$ . Il faut noter que les expressions pour le premier et second ordre donnent numériquement à peu près les mêmes résultats au-dessus de la température de passage. Les résultats commencent à présenter des différences de plus en plus substantielles au fur et à mesure que la température ou le dopage diminue sous la température de passage. Un graphique est présenté dans le chapitre suivant à la figure 6.1.

D'abord, pour l'énergie libre, au premier ordre, avec l'intégrale sur la double occupation :

$$F(T, n, U) = F^0(T, n) + \frac{n^2}{4} \int_0^U dU' \frac{U_{sp}}{U'}, \quad (5.11)$$

où la valeur de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  fut remplacée par le résultat premier ordre  $U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(1)} = U_{sp} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$ . Ce qui conduit au potentiel chimique :

$$\mu = + \left( \frac{\partial F(T, n)}{\partial n} \right)_{\beta} = \mu_0 + \frac{n}{2} \left[ \int_0^U dU' \frac{U_{sp}}{U'} \right] + \frac{n^2}{4} \left[ \int_0^U \left( \frac{\partial U_{sp}}{\partial n} \right)_{\beta} \frac{dU'}{U'} \right] \quad (5.12)$$

$$= \mu_0 + \frac{2}{n} \left[ \int_0^U dU' \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle_{U'} \right] + \frac{n^2}{4} \left[ \int_0^U \left( \frac{\partial U_{sp}}{\partial n} \right)_{\beta} \frac{dU'}{U'} \right]. \quad (5.13)$$

Pour l'entropie, il faut prendre la dérivée première par rapport à la température :

$$S(T, n) = S^0(T, n) - \frac{n^2}{4} \int_0^U \frac{dU'}{U'} \left( \frac{\partial U_{sp}}{\partial T} \right)_n. \quad (5.14)$$

La dérivée de cette dernière expression par rapport à la température, multipliée par la température donne la chaleur spécifique :

$$C_n(T, n) = C_n^0(T, n) - \frac{Tn^2}{4} \int_0^U \frac{dU'}{U'} \left( \frac{\partial^2 U_{sp}}{\partial T^2} \right)_n. \quad (5.15)$$

Au second ordre, il faut plutôt utiliser la double occupation calculée avec la self. Mais puisque la double occupation trouvée avec  $U_{sp}$  est pratiquement égale à la double occupation calculée avec la self, dans le domaine de validité de la théorie, le résultat sera pratiquement identique à celui du premier ordre. L'uniformité thermodynamique peut être vérifiée en calculant la chaleur spécifique avec  $\left( \frac{\partial E(T, n)}{\partial T} \right)_n$  où

$$E(T, n) = Tr \left[ \left( \epsilon(\mathbf{k}) + \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} \right) G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] \quad (5.16)$$

et l'entropie en intégrant  $\frac{1}{T} \frac{\partial E(T, n)}{\partial T}$  par rapport à la température. Il est alors possible de calculer le potentiel chimique en dérivant  $F(T, n) = E(T, n) - TS(T, n)$  par rapport à  $n$  et de le comparer au potentiel chimique avec  $Tr G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ . Or, il fut démontré numériquement qu'au second ordre toutes ces façons de calculer les quantités thermodynamiques donnaient le même résultat.

Il serait possible d'explicitier les expressions tel qu'il est fait dans l'annexe A, mais puisqu'en pratique les dérivées et intégrales sont faites numériquement directement sur les valeurs de  $E(T, n)$  et de  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ , il n'est pas pertinent de le faire.

## 5.4 Uniformité thermodynamique au premier ordre ACDP

Au premier ordre ACDP pour la chaleur spécifique, la contribution cinétique à la chaleur spécifique totale est égale à la chaleur spécifique sans interaction. La contribution potentielle quant à elle est égale à cette contribution au second ordre puisque  $Tr \left[ \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right] = U_{sp} \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle$  (voir figure 6.1 au chapitre 6). Il apparaît donc évident qu'au premier ordre, la chaleur spécifique extraite de la dérivée seconde de

l'énergie libre calculée avec l'intégrale sur la double occupation ne sera pas égale à la chaleur spécifique extraite par la dérivée par rapport à la température de l'énergie interne. En effet, soit

$$C_n^{F,(i)}(T, n) = -T \frac{\partial^2 F^{(i)}}{\partial T^2} = C_n^0 - T \int_0^U dU' \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(i)}}{\partial T^2} \quad (5.17)$$

la chaleur spécifique extraite par l'énergie libre calculée avec la double occupation à l'ordre  $i$ , et

$$C_n^{E,(i)}(T, n) = \frac{\partial E^{(i)}(T, n, U)}{\partial T} \quad (5.18)$$

pour le calcul avec la dérivée de l'énergie interne, toujours à l'ordre  $i$ . Dans le dernier cas, on reconnaît :

$$C_n^{K,(i)}(T, n, U) = \frac{\partial K^{(i)}(T, n, U)}{\partial T}, \quad (5.19)$$

la partie cinétique de la chaleur spécifique à l'ordre  $i$  et :

$$C_n^{U,(i)}(T, n, U) = U \frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(i)}(T, n, U)}{\partial T}, \quad (5.20)$$

la partie potentielle de la chaleur spécifique à l'ordre  $i$ . La définition de la correction apportée à  $C_n^0$  pour donner la chaleur spécifique cinétique avec interaction s'écrit par cette équation exacte :

$$C_K^U(T, n, U) = -U \left( \frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T} \right)_n - T \int_0^U dU' \left[ \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} \right]_n, \quad (5.21)$$

où l'on suppose ici que le résultat pour chaque quantité de l'équation précédente est exacte. Il s'agit de la quantité qu'il faut ajouter à  $C_n^0$  pour obtenir  $C_n^K(T, n, U)$ , la contribution cinétique (où l'indice d'ordre fut abandonné puisqu'on traite ici le cas exact) :

$$C_n^F(T, n) = C_n^0 - T \int_0^U dU' \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} + C_n^U(T, n, U) - C_n^U(T, n, U) \quad (5.22)$$

$$= C_n^0 - \left( T \int_0^U dU' \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} + C_n^U(T, n, U) \right) + C_n^U(T, n, U) \quad (5.23)$$

$$\equiv C_n^K(T, n, U) + C_n^U(T, n, U) \quad (5.24)$$

$$\Rightarrow C_n^K(T, n, U) = C_n^0 - \left( T \int_0^U dU' \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} + C_n^U(T, n, U) \right) \quad (5.25)$$

$$= C_n^0 + C_K^U(T, n, U) \quad (5.26)$$

L'étude précédente [4] montre par des comparaisons avec le Monte Carlo Quantique que les résultats au second ordre sont exact à une erreur numérique près (de l'ordre du pourcent) dans le domaine de validité ACDP. Au second ordre, la quantité ci-dessus est :

$$C_K^{U,(2)}(T, n, U) = -U \left( \frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}}{\partial T} \right)_n - T \int_0^U dU' \left[ \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}}{\partial T^2} \right]_n \quad (5.27)$$

Le terme de l'énergie libre qui implique l'intégrale sur la double occupation contient à la fois la correction à la chaleur spécifique sans interaction pour obtenir la contribution cinétique ainsi que la contribution potentielle.

Tel que stipulé précédemment,  $C_n^{K,(1)}(T, n, U) = C_n^0$ . Si l'uniformité thermodynamique est respectés,  $C_n^{F,(1)}(T, n, U) - C_n^{E,(1)}(T, n, U) = 0$ . Par contre, au premier ordre, l'énergie cinétique est identiquement égale à l'énergie totale sans interaction :

$$K^{(1)}(T, n, U) = Tr [\epsilon(\mathbf{k}) G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n)] \quad (5.28)$$

$$= Tr [\epsilon(\mathbf{k}) G^{(0)}(\mathbf{k}, ik_n)] = E(T, n, U = 0), \quad (5.29)$$

ainsi  $C^{K,(1)}(T, n, U) \equiv C_n^0(T, n)$ , ce qui implique que  $C_n^{F,(1)}(T, n, U) - C_n^{E,(1)}(T, n, U) = C_K^{U,(1)}(T, n, U)$ , tandis que pour respecter l'uniformité thermodynamique au premier ordre, on doit avoir  $C_K^{U,(1)}(T, n, U) = 0$  tel que démontré au début du paragraphe.

Au second ordre, l'uniformité est respectée de sorte que  $C_n^{F,(2)}(T, n, U) - C_n^{E,(2)}(T, n, U) = 0$ . Ce qui implique que le terme  $C_K^{U,(2)}(T, n, U)$  est non nul, puisque  $C_n^{K,(1)}(T, n, U) \neq C_n^0$ . Et donc, puisque  $U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(1)} = U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}$  (comme le montre la figure 6.1 au chapitre 6),  $C_n^{F,(1)}(T, n, U) = C_n^{E,(2)}(T, n, U)$  et  $C_K^{U,(2)}(T, n, U) = C_K^{U,(1)}(T, n, U)$  et donc l'uniformité

thermodynamique au premier ordre n'est pas respectée. Par contre, les calculs thermodynamiques de l'énergie libre au premier ordre faits avec la double occupation intégrée sur  $U$  donnent les bons résultats dans la mesure où le second ordre donne aussi le bon résultat, ce qui semble bien être le cas si on compare au MCQ [4].

Il faut mentionner aussi que techniquement, le potentiel chimique au premier ordre est égal à  $\mu^{(1)} = \mu_0 + \frac{n(U+U_{sp}(1-n))}{4-2n}$  [72]. Qualitativement, le résultat est raisonnable mais quantitativement, la différence entre le potentiel chimique au premier ordre et celui au second sont suffisamment grands pour conclure encore une fois qu'il y a violation de l'uniformité thermodynamique au premier ordre. En effet, le potentiel chimique extrait par l'équation (5.13) est numériquement égal au potentiel chimique au second ordre, par extension, qui est quantitativement différent que  $\mu_0 + \frac{n(U+U_{sp}(1-n))}{4-2n}$ , quoique légèrement. Un graphique sera présenté dans le chapitre 6. Un autre problème survient près de la température de passage avec ce potentiel chimique.

Il existe une autre façon exacte d'écrire l'énergie libre qui fait intervenir une expression de la double occupation explicitement. Avec :

$$\frac{\partial}{\partial U} (U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle) = \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle + U \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial U} \quad (5.30)$$

$$\Rightarrow \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{\partial}{\partial U} (U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle) - U \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial U}, \quad (5.31)$$

on trouve :

$$F(T, n, U) = F_0(T, n) + U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - \int_0^U dU' U' \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial U'} \quad (5.32)$$

## 5.5 Sommaire de chapitre

- Le potentiel thermodynamique choisi peut être calculé à partir de diverses quantités entre autres, l'énergie interne et la double occupation.
- Une théorie respecte l'uniformité thermodynamique si toutes les manières indépendantes de calculer un potentiel ou une fonction thermodynamique donnent le même résultat
- La théorie ACDP au second ordre respecte numériquement l'uniformité thermodynamique autant avec le calcul du potentiel chimique, de l'énergie interne ou la double occupation, ce qui constitue trois méthodes indépendantes d'obtenir le po-



tentiel thermodynamique.

- Ce n'est pas le cas pour le premier ordre qui viole nécessairement l'uniformité thermodynamique.

# Chapitre 6

## Régime classique renormalisé du modèle de Hubbard à faible couplage

Dans les chapitres précédents, tous les outils théoriques nécessaires à l'exploration du diagramme de phase du modèle de Hubbard à faible couplage ont été présentés. Principalement il fut question des fonctions thermodynamiques telles que la chaleur spécifique et le potentiel chimique, la longueur de corrélation de spin et les susceptibilités de spin et de charge. Cela marque la fin du premier volet. Voici maintenant le second volet dans lequel les résultats ACDP sont présentés. Dans ce chapitre, il sera question de l'influence des paramètres  $n$ ,  $U$ ,  $T$  et  $t'$  sur ces fonctions pour un régime de paramètres s'approchant de paramètres réalistes pour les supraconducteurs à haute température critique. En pratique, l'exploration sera limitée aux valeurs de dopage se situant près du demi-remplissage, des valeurs de  $t'$  de l'ordre de  $0.1t$  et des valeurs de  $n$  s'étendant de  $n = 0.7$  à  $n = 1.3$  environ. Les valeurs de  $U$  seront limitées à des valeurs de l'ordre de  $6t$  ou moins étant donné la nature de l'approche ACDP. Les effets physiques considérés dans ce chapitre se trouvent dans une gamme de paramètres au voisinage de  $T_x$ . Il s'agit donc de propriétés du régime classique normalisé.

### 6.1 Considérations numériques face à la précision des calculs

La méthode ACDP exige que plusieurs calculs soient exécutés numériquement. Bien que la formulation de la théorie soit de nature analytique par opposition aux méthodes

purement numériques telles que le Monte Carlo Quantique, ces expressions impliquent des intégrales et des sommes qui doivent être calculées numériquement. Dans cette étude, tous les calculs des interactions effectives  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  sont exécutés à la limite thermodynamique avec certaines méthodes d'intégration et autres astuces numériques traitées dans l'annexe B. Par contre, les calculs impliquant la self-énergie doivent être faits avec des systèmes de taille finie afin d'accélérer les calculs et de profiter des transformées de Fourier rapides pour le calcul de la self elle-même. Le calcul de la self est traité dans l'annexe C.

Il est important de mentionner que pour les calculs impliquant la self, des réseaux de  $128 \times 128$  sites ou plus furent utilisés avec un nombre de fréquences de Matsubara variant entre 250 et 1450 selon la température. Il faut aussi mentionner que les résultats pour la double occupation au second ordre avec la self-énergie pour les systèmes de taille finie sont presque identiques aux résultats à l'ordre un obtenus pour le calcul de  $U_{sp}$  obtenus dans la limite thermodynamique dans le domaine de validité de la théorie. Afin d'illustrer plus précisément ce qui est dit ici, il suffit de revoir les définitions du calcul de la double occupation :

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(0),\infty} = \frac{U_{sp}^{\infty}}{U} \frac{n^2}{4} \quad (6.1)$$

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(0),N,M} = \frac{U_{sp}^{N,M}}{U} \frac{n^2}{4} \quad (6.2)$$

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(1),N,M} = \frac{1}{U} Tr \left[ \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G^{(1)}(\mathbf{k}, ik_n) \right]_{N,M} \quad (6.3)$$

$$\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle^{(2),N,M} = \frac{1}{U} Tr \left[ \frac{\Sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) \right]_{N,M} \quad (6.4)$$

La première équation désigne le calcul de la double occupation par l'intermédiaire de  $U_{sp}$  calculé à la limite thermodynamique selon la méthode discutée dans l'annexe B. La seconde désigne le calcul fait de la même manière que pour la première équation mais avec un réseau de taille finie  $N \times N$  ( $N = 128$ ) avec  $M$  fréquences de Matsubara ( $M = 1450$ ). La troisième équation est identiquement égale à la seconde, mais numériquement, la somme tronquée en fréquence de Matsubara peut induire des erreurs. Il s'agit d'une vérification numérique de la convergence en fréquences, utile pour établir un degré de confiance pour la quatrième équation. Cette dernière implique la fonction de Green au second ordre et elle ne peut être calculée à la limite thermodynamique étant donné la lourdeur des calculs.

Lorsque les résultats numérique provenant des deux premières équations sont égaux, la taille finie utilisée pour la seconde est adéquate. Lorsque la seconde et la troisième sont égales, le nombre de fréquences de Matsubara est adéquat. Lorsque la quatrième est égale aux trois autres, la cohérence entre premier et deuxième ordre de la méthode est respectée. Les comparaisons sont présentées sur la figure 6.1. Dans ce cas, la thermodynamique au premier ordre extraite par l'intégrale de la double occupation sur  $U$  donne les bons résultats conformément à l'étude numérique précédente [4]. Il faut prendre note que les courbes sur le graphique sont celles pour l'énergie potentielle  $U\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ .

## 6.2 Température de passage vers le régime classique renormalisé et calcul de longueur de corrélation

Il existe plusieurs façons de définir la température de passage (*crossover*)  $T_x$ . Du point de vue expérimental, elle est associée à la température de pseudogap telle qu'observée par les mesures d'ARPES [10–13] ou de conductivité optique [73] comme il fut suggéré [1]. Pour les calculs présentés ici, on l'associe à la température pour laquelle la longueur de corrélation de spin est environ égale à la longueur de de Broglie définie par :

$$\xi_{th} = \frac{\langle v_f \rangle}{\pi T}, \quad (6.5)$$

ce qui correspond au critère pour un pseudogap en ARPES lorsque  $\langle v_f \rangle$  est évalué aux points chauds plutôt que d'être moyenné.

En principe, il faudrait calculer cette dernière quantité en faisant la moyenne de la dérivée de la relation de dispersion avec interaction par rapport au vecteur d'onde évalué au niveau de Fermi. D'une part, ce calcul est très lourd en terme de temps de calcul. D'autre part, ce calcul est plus ou moins important. Puisqu'il ne s'agit pas ici d'une transition de phase proprement dite, la valeur de la température de passage n'est pas bien définie. Elle consiste plutôt en une gamme de températures plus ou moins large dans le diagramme de phase. Ainsi, l'utilisation de la vitesse de Fermi à  $U = 0$  s'avère adéquate. En fait, lorsque la température devient basse, c'est plutôt le comportement en  $\frac{1}{T}$  qui domine et le choix du paramètre  $\frac{\langle v_f \rangle}{\pi}$  n'influence pas énormément les résultats. Une autre possibilité serait d'utiliser des résultats expérimentaux même si notre exploration, pour l'instant, implique des régimes de paramètres qui ne correspondent pas à des paramètres

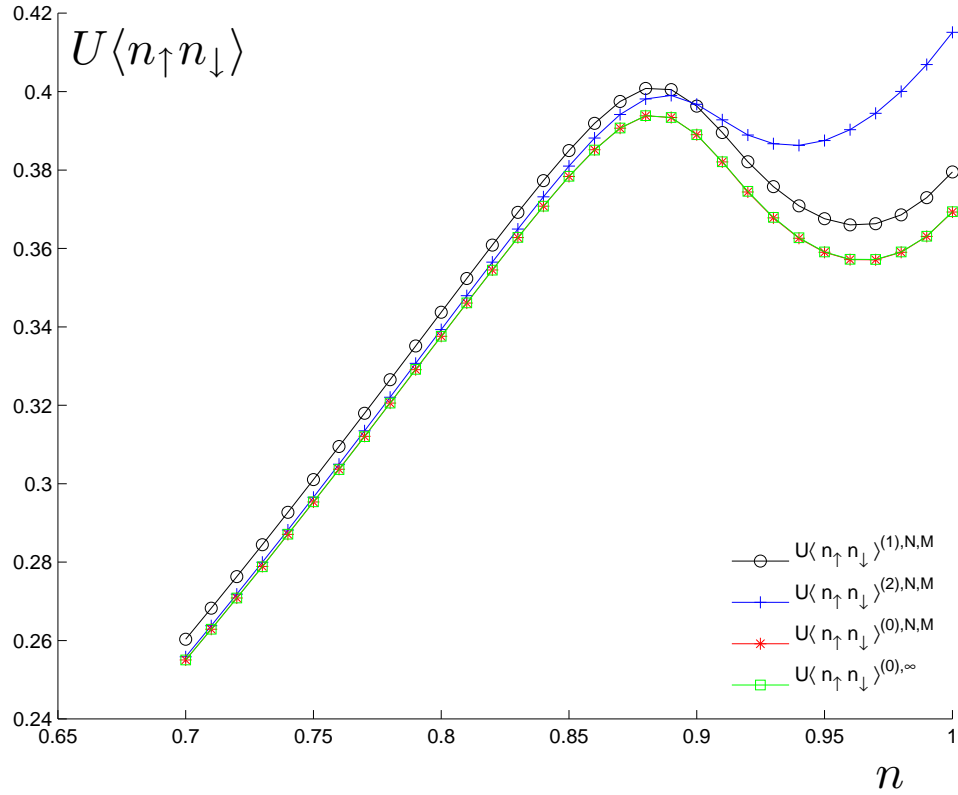


FIGURE 6.1 – Double occupation multipliée par  $U$  (énergie potentielle) en fonction du remplissage pour  $T = 0.1t$  et  $U = 4t$  à  $t' = 0$ . Les quatre courbes exposent la différence dans les résultats pour la taille et pour la somme tronquée en fréquences de Matsubara. On constate que le calcul de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(0),\infty}$  avec la règle de somme à la limite thermodynamique (en vert) coïncide très bien avec le calcul de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(0),N,M}$  avec  $N = 128$  et  $M = 1450$  (en rouge). La différence entre  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(1),N,M}$  (en noir) et le calcul de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(0),N,M}$  avec la règle de somme donne un indice de l'erreur causé par la troncature en fréquence. On voit très bien aussi que  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(2),N,M}$  (en bleu) pour  $M = 1450$  fréquences de Matsubara et un réseau de  $N \times N$  avec  $N = 128$  concorde assez bien avec le calcul de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(0),\infty}$  fait avec un système de taille infinie et 10 000 fréquences (selon la méthode exposée en annexe B) entre  $n = 0.7$  et  $n = 0.85$ . La différence entre  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(0),\infty}$  et  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(0),N,M}$  est de l'ordre de 1.5%. Le minimum local situé à environ  $n = 0.95$  se situe au delà du domaine de validité de la méthode, sa limite étant située, pour ces paramètres à  $n \sim 0.9$ .

$t - t' - U$  réalistes. On définit aussi le remplissage de passage  $n_x$  le remplissage pour lequel à température constante,  $\xi_{sp}(n)$  est plus grand que  $\xi_{th}$ . En réalité, la vitesse de Fermi nécessaire à l'évaluation de la longueur thermique varie avec le dopage. Par contre, ces variations induisent des changements mineur, voir aucun changement, dans les résultats numériques de  $T_x$ . Pour cette raison, afin de faciliter l'extraction des résultats, on suppose que  $\xi_{th}$  est indépendant de  $n$ .

Cette température de passage ( $T_x$ ) peut être associée à d'autres effets observables dans d'autres quantités. On pense principalement à l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral [2]. De plus, la double occupation et par conséquent la chaleur spécifique, présentent des structures qui sont causées par ce passage. Ainsi, dans la mesure où la détermination de la température de passage par l'une ou l'autre de ces quantités donne des résultats identiques au sens où les différences sont de l'ordre de la précision numérique<sup>1</sup>, la valeur de température de passage sera considérée comme étant juste.

### 6.3 Diagramme de phase

Dans cette section, il sera question des diagrammes de passage et de commensurabilité pour diverses gammes de paramètres.  $U = 2, 3, 4, 5, 6$ ;  $t' = 0, -0.05t, -0.1t, -0.2t$ ;  $n = \{0.7, 1.3\}$ ;  $T = \{0, 0.3t\}$ . Pour donner une échelle grossière à propos de la température, la valeur de  $t$ , pour les matériaux dopés aux électrons tels que  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$  est de l'ordre de 230meV à 420meV [1, 74]. Sachant que  $1\text{eV} = 1.1604 \times 10^4$  Kelvin, une température de  $0.1t$  correspond à une température allant de 267 Kelvin à 487 Kelvin, selon le choix de  $t$ . Une température de  $0.01t$  correspond à une température allant de 27 Kelvin à 49 Kelvin et ainsi de suite. Ce chapitre se veut une exploration du modèle de Hubbard sans attaches expérimentales. Un cas physique intéressant sera traité dans le chapitre 8. Ce présent chapitre constitue un préambule à l'analyse du cas physique.

Avant de poursuivre, il faut préciser quelques termes. Il sera question ici de *régime antiferromagnétique* ou de *régime d'ondes de densité de spin*. En réalité, il n'y a pas de traces de transition de phase magnétique, à température finie, conformément au théorème de Mermin-Wagner [7]. Il s'agit plutôt d'un régime de fortes fluctuations. C'est ce qu'on veut dire ici par *régime*. Il s'agit en fait du passage entre la phase normale et la présence d'une

---

<sup>1</sup>La précision sur la détermination de la température de passage dépend plus de l'intervalle en température et remplissage utilisé pour le balayage de ces paramètres que de la précision de chacun de ces calculs. Autrement dit, si on calcule  $U_{sp}$  avec une précision de  $10^{-6}$  pour un  $\Delta T$  de  $10^{-2}$ , la précision sur  $T_x$  est de  $10^{-2}$ .

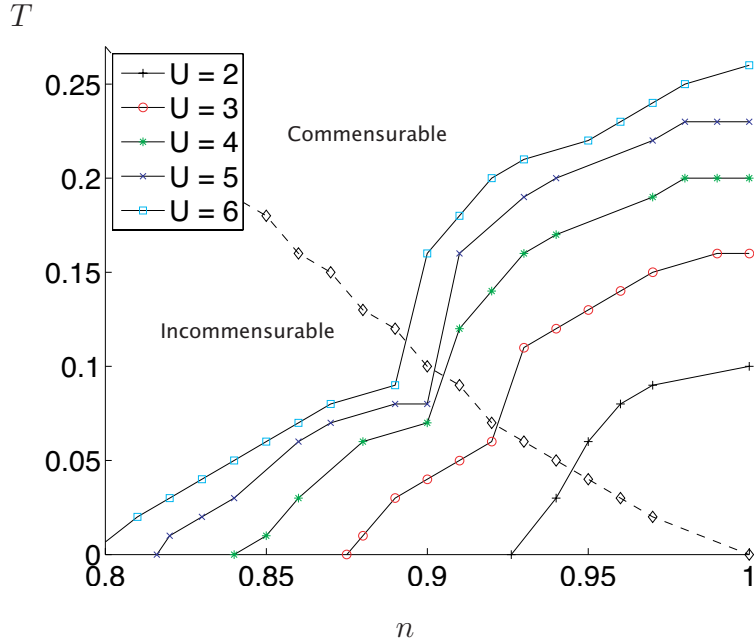


FIGURE 6.2 – Diagramme de phase température-dopage pour  $t' = 0$  pour quelques valeurs de  $U$  en fonction de  $n$  et  $T$ . Les diamants ( $\diamond$ ) indiquent la frontière commensurable-incommensurable.

transition de phase magnétique à température nulle par le passage dans le *régime classique renormalisé*. C'est ce qu'on pourrait nommer *phase de pseudogap* ou encore *régime de pseudogap*. Afin d'alléger l'écriture, le terme *régime* sera utilisé. De plus, puisque le paramètre d'ordre n'atteint pas la valeur maximale correspondant à Heisenberg, le régime antiferromagnétique est en fait un régime d'onde de densité de spin de vecteur d'onde caractéristique  $\mathbf{Q}_{AF} = (\pi, \pi)$ .

Tout d'abord, la figure 6.2 montre les résultats pour  $t' = 0$ . Lorsque  $U$  augmente,  $T_x$  augmente à dopage fixe. La première caractéristique digne de mention est l'influence de la frontière entre la zone commensurable (régime d'onde de spin antiferromagnétique sous  $T_x$ ) et incommensurable (régime d'ondes de densité de spin de vecteur d'onde qui varie de façon continue en fonction de  $T$  et  $n$  sous  $T_x$ ). Il y a une diminution de l'intensité des fluctuations magnétiques près de cette frontière comme le montre la chute de  $T_x$  là où la courbe d'évolution de  $T_x$  croise la frontière commensurable-incommensurable. Cela est causé par l'influence du dopage et de la température sur  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ , telle que mentionnée dans le chapitre 3. Lorsque le système s'approche de la frontière, la susceptibilité s'aplatit au maximum (voir figure 3.9 du chapitre 3).

À  $U = 0$ , la règle de somme sur le spin donne une constante lorsque  $n$  est fixe :

$$n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = n - \frac{n^2}{2} = T \sum_n \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n) \quad (6.6)$$

en fonction de  $T$ . Si la susceptibilité s'aplatit en diminuant la température, le volume de la contribution à la règle de somme tend à augmenter autour du maximum et donc la fonction se reconfigure aux autres vecteurs d'ondes et aux autres fréquences afin de satisfaire la règle de somme. Pour illustrer l'effet qui se produit, il s'agit de supposer que la susceptibilité présente un véritable plateau. De sorte que  $\chi_0(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}_{max}, 0) \approx \chi_0^{max}$ . Dans la règle de somme avec interaction :

$$n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (6.7)$$

$$= \int_{ZB-\square} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} + \int_{\square} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{\chi_0^{max}}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0^{max}} \quad (6.8)$$

$$= \int_{ZB-\square} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} + \left( \frac{\Delta q}{2\pi} \right)^2 \frac{\chi_0^{max}}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0^{max}}, \quad (6.9)$$

où le carré<sup>2</sup> désigne la zone en vecteurs d'onde couverte par le plateau, le  $\Delta q$  est la hauteur et la largeur du carré centré en  $(\pi, \pi)$  où la susceptibilité présente un plateau (voir graphique 3.10 au chapitre 3). Le dernier terme du membre de droite constitue la contribution la plus divergente lorsque  $U_{sp} \rightarrow \frac{2}{\chi_0^{max}}$ . C'est le cas lorsque  $\xi_{sp} \rightarrow \frac{\langle v_f \rangle}{\pi T}$ . Le membre de gauche impose comme contrainte la continuité de l'évolution de  $U_{sp}$  et par conséquent du moment local  $\langle S_z S_z \rangle$  avec la température et le dopage. La figure 6.3 montre l'évolution de  $U_{sp}$  autour de la frontière et on n'y remarque rien de particulier. L'amplitude du maximum de  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  ne semble pas être affectée non plus. Par contre, si on trace  $\sqrt{\frac{\chi_{sp}^{max}}{\chi_0^{max}}}$  en fonction de la température, on observe à la figure 6.3 un plateau dans le voisinage de la frontière commensurable-incommensurable. Lorsque le dopage augmente, la frontière se situe à une température plus élevée et la température de passage diminue.

À la figure 6.3, toujours, on remarque le plateau à la frontière mais pour les dopages plus grands, il est moins marqué. Cela a deux effets. Le premier est que ce plateau n'a

<sup>2</sup>Ce carré est orienté de manière à ce que ses sommets se trouvent à  $(\pi, \pi \pm \delta)$ ,  $(\pi \pm \delta, \pi)$  pour tenir compte de la symétrie du système. On pourrait utiliser un cercle lorsque  $\xi_{sp}$  est suffisamment grand conformément à la discussion du chapitre 3



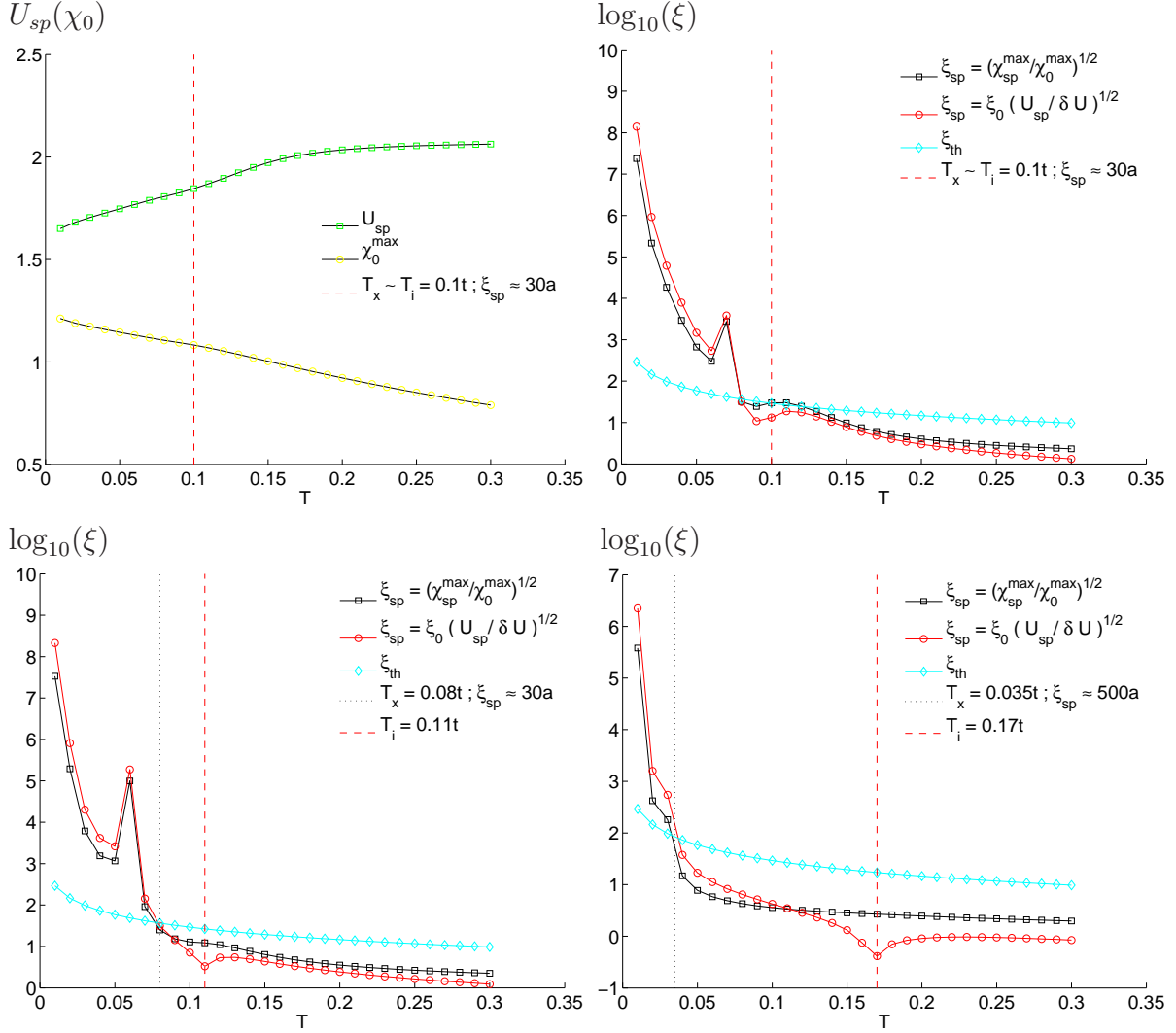


FIGURE 6.3 – Pour  $U = 4t$ , évolution de la longueur de corrélation de spin au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable. La première figure montre l'évolution de  $U_{sp}$  (en vert) et de  $\chi_0^{\max}$  (en jaune) en fonction de la température pour  $n = 0.91$ , le dopage pour lequel  $T_x \sim T_i$ . Les tirets rouges désignent les frontières commensurables-incommensurables. Les lignes pointillées noires, les températures de passage. Les points rouges reliés par des lignes sont les longueurs de corrélation avec la définition de la longueur développée 3.2 et les noirs pour la longueur pondérée 3.9 et en bleu la longueur d'onde corrélation thermique. Les deux courbes du haut sont pour  $n = 0.91$  et celles du bas pour  $n = 0.9$  et  $n = 0.86$  respectivement. Les minimums locaux sur les courbes rouges sont causés par l'annulation de  $\xi_0^2$  à la frontière.

plus d'incidence sur la détermination de la température de passage puisque la valeur de la longueur de corrélation au plateau est faible devant  $\xi_{th}$ . La seconde est que la variation de la longueur de corrélation à la frontière commensurable-incommensurable est plus faible, ce qui diminue la présence de cet effet. Lorsque le dopage est suffisamment grand, la longueur de corrélation est pratiquement constante à la frontière de sorte que le plateau est masqué par la faible évolution en température de la longueur de corrélation. Par conséquent, la présence de la frontière a une incidence sur la physique du système seulement lorsque la transition entre le régime antiferromagnétique et le régime d'onde de densité de spin apparaît près de la température de passage comme par exemple, sur le graphique de la figure 6.2 à  $T = 0.11t$  pour  $n = 0.90$  à  $U = 4t$ .

Physiquement, ce qui se produit, c'est l'apparition progressive d'ondes de densité de spin à un vecteur d'onde différent de  $(\pi, \pi)^3$ . Ces excitations sont présentes dans le système au-delà de cette région, mais avec une importance relative qui varie avec le dopage. À la frontière, le système est autant susceptible antiferromagnétiquement que pour un vecteur d'onde incommensurable d'ondes de densité de spin. Lorsque la frontière est franchie, les fluctuations incommensurables deviennent les plus importantes et l'antiferromagnétisme disparaît progressivement. Il y a donc deux effets présents dans les calculs qui causent cette diminution de  $T_x$ . (1) Le point de départ pour le calcul de la susceptibilité avec interaction qui puise son essence dans la forme de la susceptibilité sans interaction. C'est ce qui est responsable de la commensurabilité du système avec interaction. Et (2) le mécanisme de renormalisation de l'interaction effective dans la règle de somme avec interaction qui impose comme contraintes la relation entre  $U_{sp}$  et la double occupation ainsi que la relation entre  $U_{sp}$  et la susceptibilité avec interaction.

En quelque sorte, cela suggère qu'il existerait, dans quelques régions particulières du diagramme de phase, deux valeurs de températures voisines, à dopage constant, pour lesquelles  $\xi_{sp} \sim \xi_{th}$  comme à la figure 6.3 pour  $n = 0.91$ . La plus grande marque la présence de fortes fluctuations antiferromagnétiques et la plus basse le déplacement du vecteur d'onde maximum d'un vecteur antiferromagnétique à un vecteur incommensurable, à fluctuations constantes. On veut dire à *fluctuations constantes* au sens où l'amplitude du maximum de susceptibilité ne varie pas, ou très peu, avec la température. La largeur du plateau pour  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n)$ , qui varie avec  $U$  impose l'intervalle de températures pour lesquelles il n'existe pas de définition propre de la longueur de corrélation. C'est-à-dire

---

<sup>3</sup>En réalité, c'est quatre vecteurs d'onde à cause de la symétrie du système tel que vu dans le chapitre

que dans un cas, le pic possède un plateau et dans l'autre, les quatre pics possèdent un trop grand recouvrement pour distinguer les pics. En fait, les figures 6.3 présentent les zones où la définition de  $\xi_{sp}$  est ambiguë là où les deux définitions de la longueur de corrélation donnent des résultats d'une part différents et d'autre part pouvant donner des valeurs de  $T_x$  différentes selon le choix de la définition. Par contre, il y a possibilité qu'aussitôt que la condition  $\xi_{sp} > \xi_{th}$  soit rencontrée, on ne doive pas considérer ce qui se produit sous cette température. Dans les faits, cela ne fait qu'induire une incertitude sur la détermination de  $T_x$ .

Dans cette région, il existe alors deux grandeurs caractéristiques. D'abord la largeur à mi-hauteur du pic (si on considère les quatre pics comme un seul) et la distance entre les quatre maximums (ou encore la taille du plateau au-dessus de  $T_i$ ). En pratique, il existe une certaine ambiguïté sur la détermination de la longueur de corrélation. Par exemple, un choix différent de valeur de  $\langle v_f \rangle$  pourrait lever cette ambiguïté en la déterminant de manière à avoir une température  $T_x$  qui est systématiquement au-dessus ou en dessous du plateau.

Puisque le système n'est commensurable, à température nulle, qu'à  $n = 1$ , peu importe la valeur de  $U$  utilisée, si petite soit-elle, il y aura deux régimes de fluctuations. Un régime antiferromagnétique pour des dopages faibles et un régime d'ondes de densité de spin incommensurables pour des dopages élevés.

Lorsqu'on fixe  $t' \neq 0$ , à demi-remplissage, on s'attend intuitivement à ce que les fluctuations soient moins intenses. C'est effectivement ce qu'on constate. Par contre, lorsqu'on s'éloigne de  $n = 1$ , ce n'est pas si simple. Précédemment, il fut question de l'influence de l'incommensurabilité sur la température de passage lorsque  $t' = 0$ . En présence d'un  $t'$ , cet effet demeure présent. Ainsi, la différence principale entre le cas  $t' = 0$  et  $t' \neq 0$  tient du fait que la frontière commensurable-incommensurable se déplace dans le diagramme  $T - n$  en fonction de  $t'$ . Puisque la présence d'un saut aux seconds voisins brise la symétrie particule-trou présente lorsqu'on ne tient compte que des sauts aux premiers voisins, il faut maintenant analyser le dopage en électrons ainsi que le dopage aux trous.

Les figures 6.4, 6.5 et 6.7 montrent les résultats pour  $t' = -0.05t$ ,  $-0.1t$  et  $-0.2t$  respectivement. Ces résultats consistent en réalité une limite inférieure de  $T_x$  car celles-ci sont déterminées avec la précision relative au grillage  $T - n$  utilisé. Pour ces courbes, la température et le dopage varient respectivement de  $\Delta T = 10^{-2}t$  et  $\Delta n = 10^2$  entre chaque point. Pour obtenir plus de précision, il faudrait augmenter la densité de points au

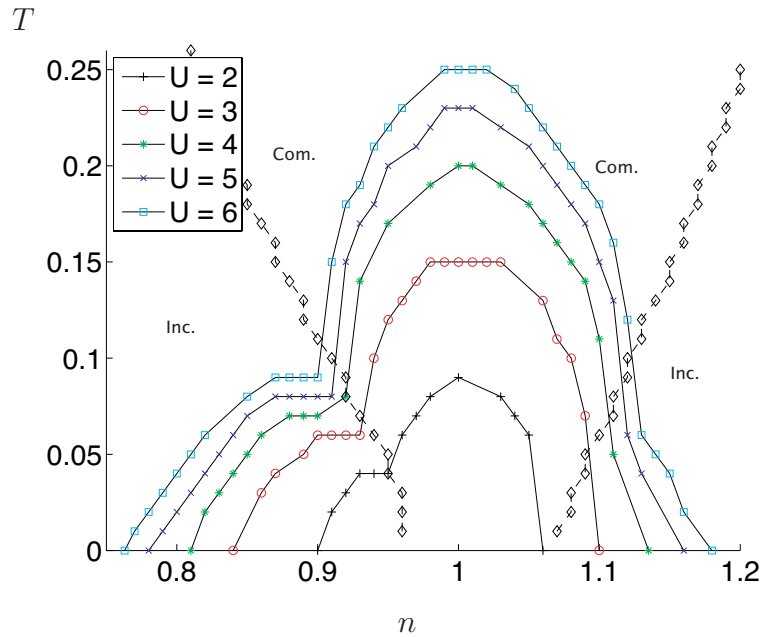


FIGURE 6.4 – Diagramme de phase température-dopage pour  $t' = -0.05t$  pour quelques valeurs de  $U$  en fonction de  $n$  et  $T$ . Les diamants ( $\diamond$ ) indiquent la frontière commensurable-incommensurable.

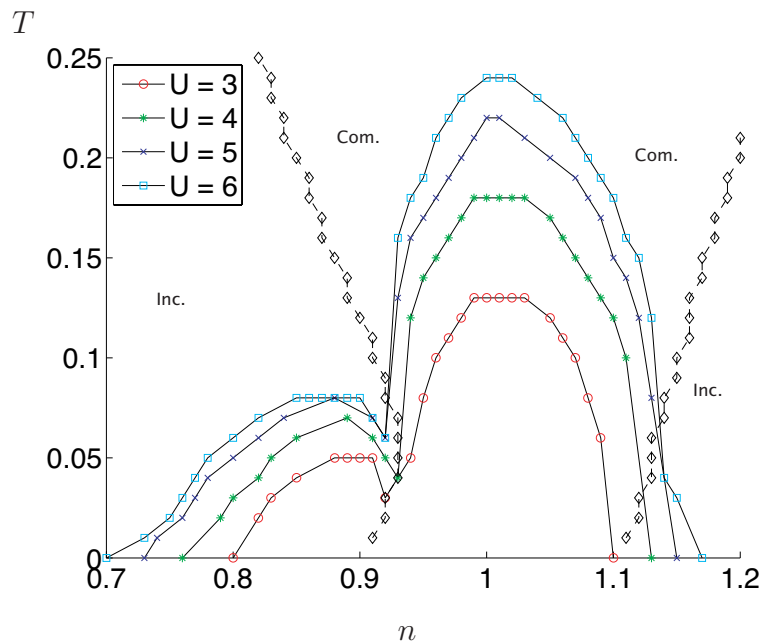


FIGURE 6.5 – Diagramme de phase température-dopage pour  $t' = -0.1t$  pour quelques valeurs de  $U$  en fonction de  $n$  et  $T$ . Les diamants ( $\diamond$ ) indiquent la frontière commensurable-incommensurable.

voisinage du  $T_x$  obtenue sur ces courbes. Il faut mentionner que lorsque  $|t'| > t/2$ , d'autres particularités apparaissent dans le système [70]. L'analyse des résultats qui suivent ne s'applique qu'au cas  $|t'| < t/2$ .

On constate d'abord la disparition du régime d'ondes de densité de spin lorsque  $U$  est suffisamment faible pour le dopage aux électrons comme par exemple sur la figure 6.4 ( $t' = -0.05t$ ) pour  $U = 2t$ . Cette caractéristique sera importante pour l'analyse du cas physique du chapitre 8. Ensuite, on remarque que la courbe de  $T_x$  en fonction de  $n$  présente un minimum local lorsqu'on dope avec des trous si  $t' \leq -0.1t$ . Avec le bon choix de  $U$  et  $t'$ , on peut imposer au système d'avoir une région normale à température finie entre le régime antiferromagnétique et le régime d'ondes de densité de spin. Par exemple, à  $U = 4t$ ,  $t' = -0.1t$  à  $T = 0.05t$  entre  $n = 0.9$  et  $n = 0.92$  se trouve une région normale qui sépare le régime d'ondes de densité de spin à gauche du régime antiferromagnétique à droite.

La raison qui explique pourquoi la courbe de  $T_x$  en fonction de  $n$  possède un maximum pour les ondes de densité de spin provient du fait que pour un dopage donné, la longueur de corrélation présente un plateau pour une gamme de température plus large que pour le dopage inférieur et le dopage supérieur. Soit  $T_p$  la température à laquelle le plateau apparaît, si  $\xi_{th}$  est presque égale à  $\xi_{sp}$  pour  $T = T_p$ , la température de passage sera située à une température inférieure à celle où le plateau disparaît. Étant donné que ce plateau constitue en sorte un minimum local de la longueur de corrélation en fonction de  $n$ , de part et d'autre de ce dopage,  $T_x$  sera plus grand. C'est ce qu'illustre la figure 6.6. Le graphique sur cette figure qui correspond au dopage de  $n = 0.94$  cause un problème car selon le choix de définition pour  $\xi_{sp}$  on trouve des valeurs de  $T_x$  très différentes. Si on recherchait  $n_x$  à  $T$  constant dans cette région, on trouverait à peu près une ligne droite. Autrement dit, plusieurs  $T_x$  pour un même  $n_x \approx 0.94$ . On pourrait affirmer alors que pour ce dopage,  $\xi_{sp} \approx \xi_{th}$  pour  $0.06t < T < 0.12t$ . Il faut tout de même garder à l'esprit l'idée de l'ambiguïté de la détermination de  $T_x$  énoncée plus tôt.

Lorsque  $t'$  est suffisamment grand ( $t' = -0.2t$ ), la valeur de  $T_x$  maximale ne se situe plus au demi-remplissage. Il semble y avoir une suppression du régime de fluctuation à demi rempli et ce même si on constate un régime persistant pour le dopage aux électrons. Par exemple, sur la figure 6.7, pour  $U = 5$ , on voit clairement un dôme antiferromagnétique dans la région du dopage aux électrons, un dôme antiferromagnétique pour le dopage aux trous ainsi qu'un dôme d'ondes de densité de spin exclusivement pour le dopage aux trous. Il y a recouvrement entre ces trois dômes aux basses températures.

De plus, on remarque que la valeur de  $T_x$  maximale se situe du côté dopé aux électrons, ce qui est conforme à l'idée que le  $t'$  renforce l'antiferromagnétisme lorsqu'on dope avec des électrons alors que c'est le contraire qui se produit pour les trous. Par contre, le dopage critique pour le régime de fluctuations est plus élevé pour les trous étant donné la présence du régime d'onde de densité de spin. C'est donc dire que  $t'$  a un effet contraire sur les ondes de densité de spin. Pour le dopage aux trous,  $t'$  renforce la présence de fluctuations magnétiques incommensurables et les affaiblit pour le dopage aux électrons.

Pour une valeur de  $t'$  donnée, il existe une valeur critique de  $U$  en dessous de laquelle il n'y a plus d'ordre à longue portée à  $T = 0$  et donc plus de température de passage. Il est plutôt difficile d'obtenir une précision acceptable aux basses températures pour établir une valeur de  $U_{critique}$  pour chaque  $t'$  sous lequel le système est dans l'état normal partout dans le diagramme  $T - n$ . Il n'est pas évident que l'état ordonné soit anéanti même à température nulle. Dans le chapitre suivant, la présence ou l'absence d'un point critique donnera la réponse.

Ensuite, la tendance de l'évolution de  $T_x$  avec  $U$  à  $n$  fixe est telle que  $T_x$  augmente avec  $U$ . Par contre, il est possible que pour un trop grand  $t'$ , le régime de faible couplage (c'est-à-dire le régime qui est décrit par la caractéristique  $\xi_{sp} \sim \xi_{th}$  à basse température) disparaisse du diagramme de phase. En principe, la théorie ACDP est valide partout où  $U$  est suffisamment faible pour que les fluctuations à courte et moyenne portées dominent. Mais il est possible que pour un  $t'$  trop grand, seule la physique de Mott soit présente à fort  $U$ .

Lorsque  $t' = 0$ , on peut décrire le diagramme de phase en fonction de  $U$  à basse température comme étant : État paramagnétique ( $U = 0$ )  $\rightarrow$  État antiferromagnétique itinérant (ou onde de densité de spin) ( $U \lesssim 6$ )  $\rightarrow$  Limite couplage fort ( $U \gtrsim 6$ ). Par contre, lorsque  $t'$  est suffisamment grand, les résultats ACDP suggèrent plutôt un diagramme de la forme : État paramagnétique ( $U = 0$ )  $\rightarrow$  isolant de Mott ( $U \gtrsim 6$ ) (voir figure 6.8). On tire cette conclusion avec ACDP en constatant que pour une certaine valeur de  $t'$  (typiquement  $|t'| > 0.2t$ ), même pour des valeurs de  $U$  énormes ( $U \sim 8t - 10t$ ), les longueurs de corrélation demeurent faibles et donc le système présente un état normal, ce qui semble contradictoire avec les résultats CPT [75]. Une étude utilisant une généralisation de la méthode de l'approximation par champ moyen dynamique (*Dynamical Mean Field Approximation* DMFA) propose un diagramme de phase  $T - U - t'$  à demi rempli semblable [76]. Une étude de Monte Carlo variationnel avec projecteurs de Gutzwiller obtient aussi un diagramme semblable à celui présenté ici [77].

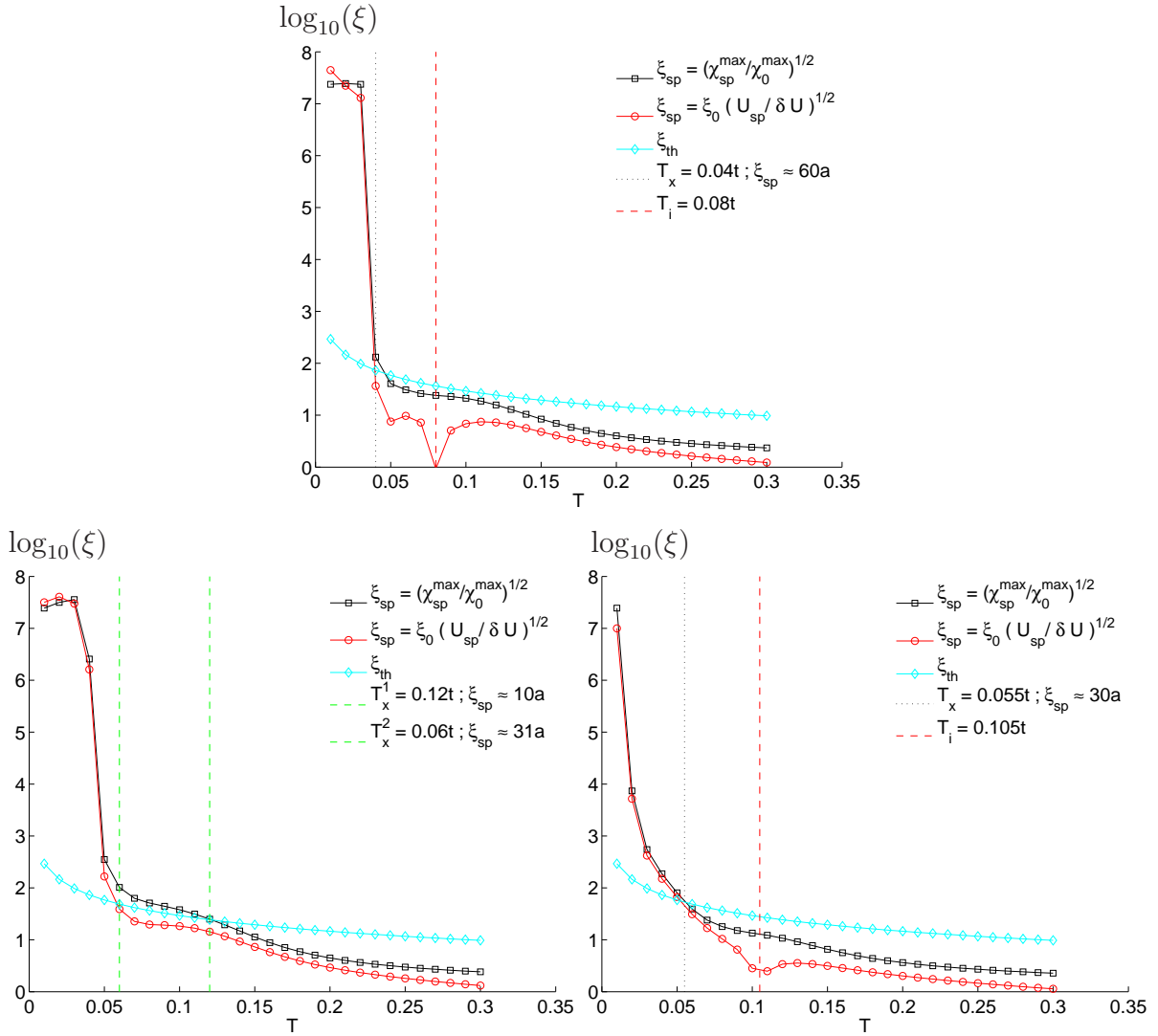


FIGURE 6.6 – Pour  $U = 4t$ , évolution de la longueur de corrélation de spin au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable. Les tirets rouges désignent les frontières commensurables-incommensurables. Les lignes pointillées noires, les températures de passage. Les points rouges reliés par des lignes sont les longueurs de corrélation avec la définition de la longueur développée 3.2 et les noirs pour la longueur pondérée 3.9 et en bleu la longueur d’onde thermique. La courbe du haut est celle pour  $n = 0.93$ , ce qui correspond au dopage où  $T_x$  enregistre un minimum sur la figure 6.5. Celles du bas sont pour  $n = 0.94$  et  $n = 0.92$  respectivement. À  $n = 0.94$ , selon le choix de définition pour  $\xi_{sp}$  on trouve une valeur de  $T_x$  soit au-dessus, soit en dessous du plateau. Il faut remarquer qu’à ce dopage,  $\chi_{sp}$  est toujours commensurable. Mais dans la gamme de températures du plateau, la proximité de la frontière cause un aplatissement de la susceptibilité au maximum comme à la figure 3.10 du chapitre 3.

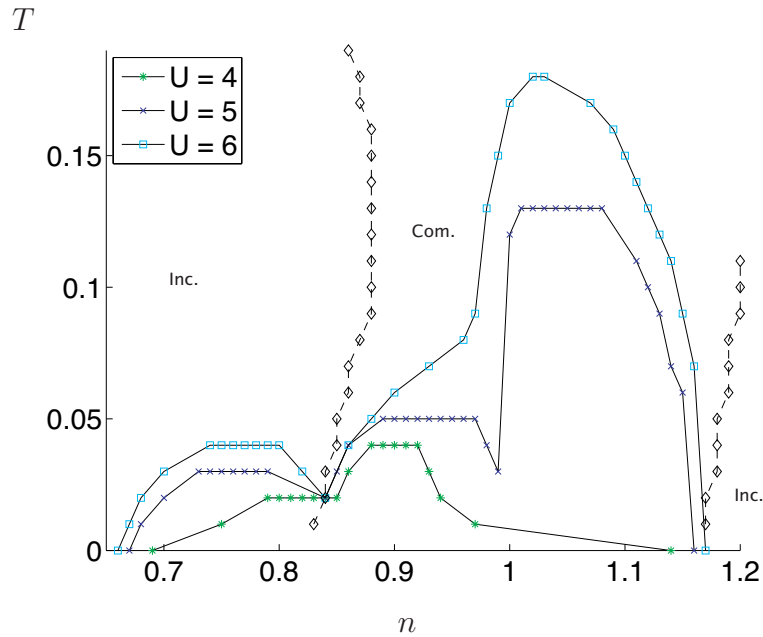


FIGURE 6.7 – Diagramme de phase température-dopage pour  $t' = -0.2t$  pour quelques valeurs de  $U$  en fonction de  $n$  et  $T$ . Les diamants ( $\diamond$ ) indiquent la frontière commensurable-incommensurable.

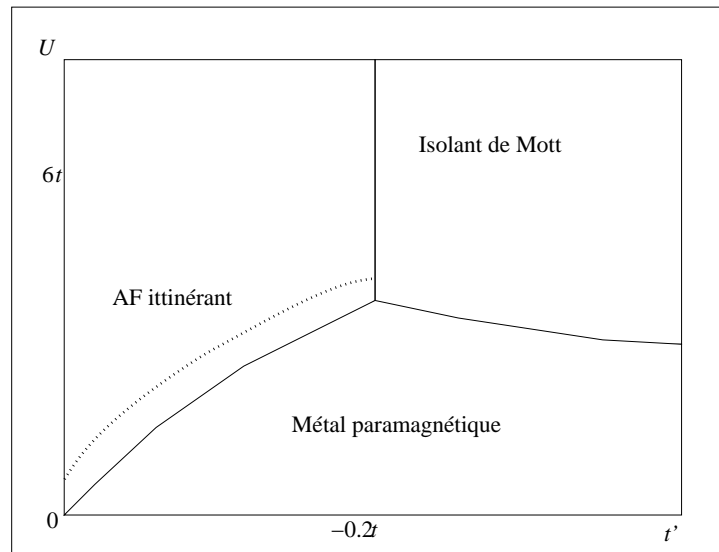


FIGURE 6.8 – Diagramme de phase à basse température en fonction de  $U$  et  $t'$  à  $n = 1$ . La antiferromagnétique (AF) itinérant sous la ligne pointillé et la région métal paramagnétique appartiennent au domaine de validité ACDP. La frontière entre l'isolant de Mott et le métal paramagnétique ne peut être facilement identifiée avec l'approche ACDP. Une étude de Monte Carlo variationnel suggère que cette frontière se situe autour de  $U \sim 6t$  [77].



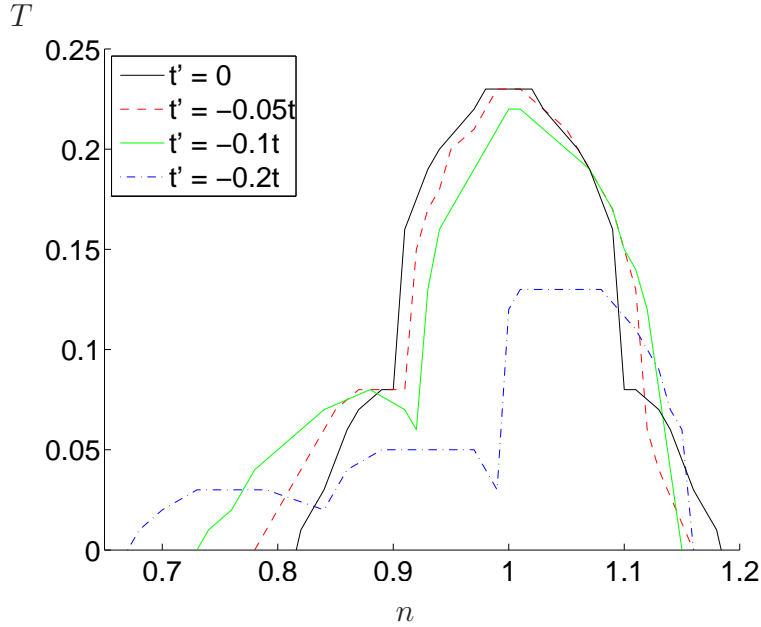


FIGURE 6.9 – Diagramme de phase température-dopage pour  $U = 5t$  pour quelques valeurs de  $t'$  en fonction de  $n$  et  $T$ .

En somme, ce qu'on constate, c'est que l'effet de  $t'$  se manifeste principalement de deux façons. La première vient de la modification de la courbe de la frontière commensurable-incommensurable. Telle que mentionnée plus tôt, la caractéristique générale est une suppression des fluctuations au voisinage de la frontière. En d'autres termes, il s'agit de l'influence de la proximité d'un régime incommensurable sur les fluctuations magnétiques qui est causée indirectement par la présence d'un  $t'$ . La seconde est l'effet de  $t'$  lui-même sur les fluctuations. Près du demi-remplissage, on constate une réduction de  $T_x$ . Pour le dopage aux électrons, relativement loin du dopage nul, on constate une augmentation de  $T_x$ . Et finalement, pour le dopage aux trous, on constate une persistance en fonction du dopage du régime d'onde de densité de spin. C'est donc dire que si  $t'$  renforce l'antiferromagnétisme pour le dopage aux électrons, il renforce la présence d'ondes de densité de spin pour le dopage aux trous.

À la figure 6.9, on présente les résultats à  $U = 5t$  pour diverses valeurs de  $t'$ . On ignore ici l'effet de la commensurabilité, mais on peut la garder à l'esprit en se référant aux précédentes figures. Cette figure montre qu'en augmentant  $t'$ , on renforce les fluctuations antiferromagnétiques pour le dopage aux électrons, sauf s'il est trop grand. À demi rempli, on réduit légèrement ces fluctuations de manière progressive, puis drastiquement si  $t'$  est trop grand. Finalement, pour le dopage aux trous, on voit un élargissement en

dopage de la zone de fluctuations d'ondes de densité de spin ainsi qu'un déplacement du  $T_x$  maximum pour l'antiferromagnétisme vers des dopages plus élevés que zéro. Il est important de rappeler qu'on traite ici le régime de faible couplage et qu'il faut faire attention lorsqu'on compare ces résultats aux véritables matériaux dopés aux trous qui présentent des caractéristiques plus apparentées au régime de fort couplage  $U > 8$  avec des valeurs de  $t' \sim -0.3t$ .

### 6.3.1 Double occupation et chaleur spécifique

Dans la section précédente, des courbes de température de passage au régime classique renormalisé furent présentées. Maintenant, il s'agit de relier cette caractéristique ( $\xi_{sp} > \xi_{th}$ ) à d'autres quantités physiques. La structure principale observée à faible couplage est une chute de double occupation qui induit un pic de chaleur spécifique à basse température. Il ne faut pas oublier que la double occupation est reliée au moment local par l'équation  $\langle S_z S_z \rangle = n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ .

D'abord les graphiques de la figure 6.10 montrent l'évolution de l'énergie potentielle avec la température pour quatre remplissages donnés. Le quatrième remplissage se trouve là où il n'y a pas de température de passage même à température nulle. Comme le montrent les contributions cinétiques à la chaleur spécifique totale, le pic de chaleur spécifique totale vient principalement de cette chute. La présence de cette chute est une conséquence directe du respect du théorème de Mermin-Wagner. Pour ACDP, l'interaction de spin est proportionnelle à la double occupation avec le choix d'ansatz  $U\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = U_{sp}\langle n_\uparrow \rangle\langle n_\downarrow \rangle$ . Ainsi, dans la règle de somme :

$$n - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = Tr \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U}{2} \frac{\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}, \quad (6.10)$$

puisque  $U_{sp} = \frac{U\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle}$  doit respecter  $U_{sp} < \frac{2}{\chi_0^{max}}$  lorsque  $T \rightarrow T_x$ , il faut que  $U_{sp}$  diminue ce qui impose une diminution de  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ . Lorsqu'il n'y a pas de température de passage, à  $n = 0.8$ , il n'y a pas de chute. La double occupation sature à basse température.

À la figure 6.11 se trouvent les résultats de différentes quantités physiques pour  $U = 4$ ,  $t' = 0$  à demi rempli autour du pic à basse température. La ligne pointillée désigne les valeurs de  $T_x$  obtenues avec  $\xi_{sp} > \xi_{th}$ . À la température de passage, la chaleur spécifique

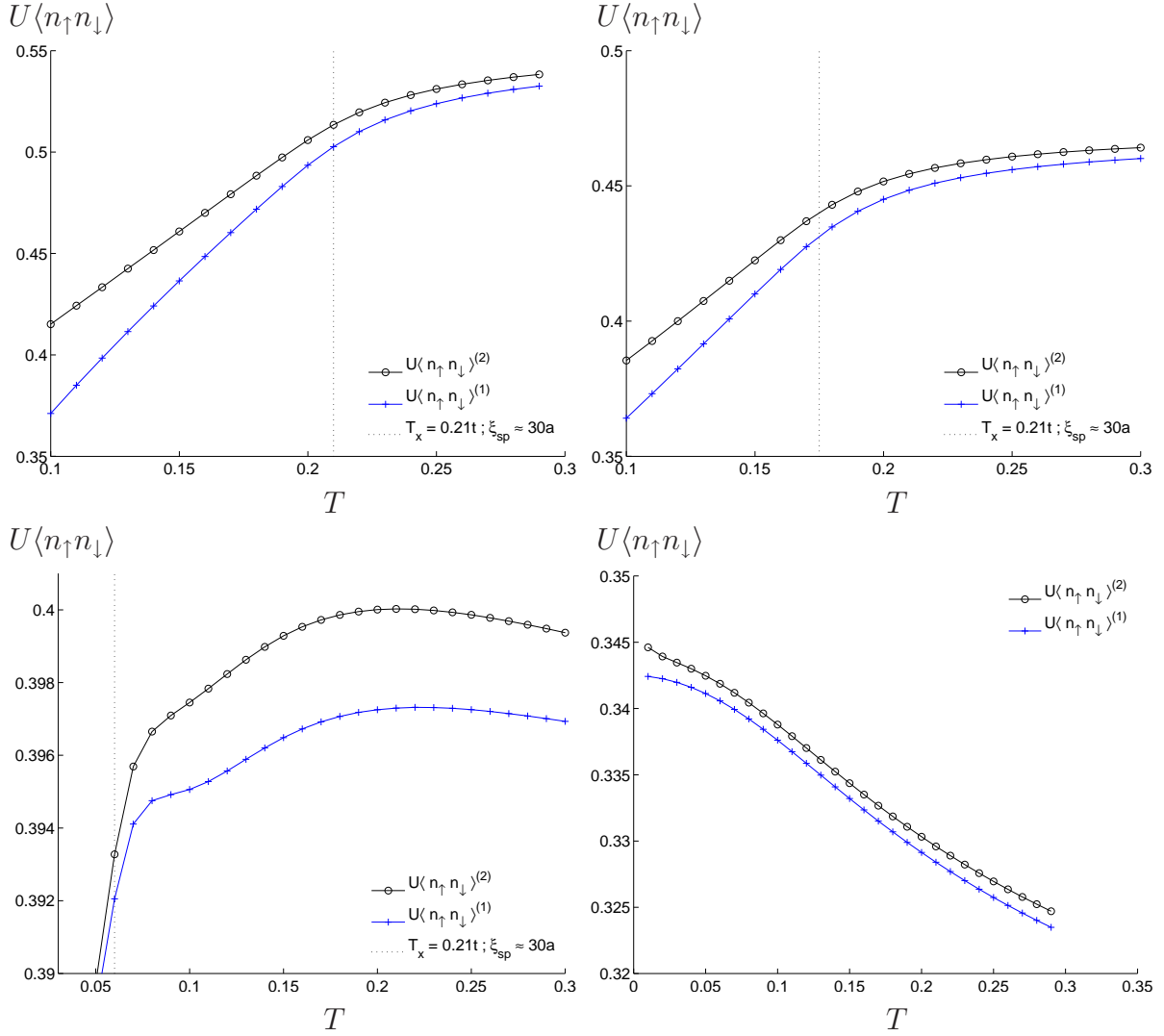


FIGURE 6.10 – Sur ces graphiques, on compare la température de passage  $T_x$  avec l'énergie potentielle  $U\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  pour  $t' = 0$  et  $U = 4t$  pour les remplissages  $n = 1, 0.94, 0.88$  et  $0.8$ .  $T_x$  se caractérise par une chute de double occupation. On remarque aussi la concordance entre les valeurs au premier et au second ordre lorsque  $T > T_x$ . Les différences peuvent être attribuables à des problèmes numériques puisque la double occupation au premier ordre  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(1)}$  est évaluée à la limite thermodynamique avec 10 000 fréquences alors que le résultat au second ordre  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}$  est évalué avec un réseau  $128 \times 128$  avec 1450 fréquences. Sous  $T_x$ , les différences rendent compte de la limite du domaine de validité ACDP. Pour  $n = 0.8$  aux plus basses températures, le changement de courbure est dû à un manque de fréquences de matsubara. Lorsqu'il n'y a pas de  $T_x$ , la double occupation ne présente pas de chute. Elle croit et elle finit par saturer.

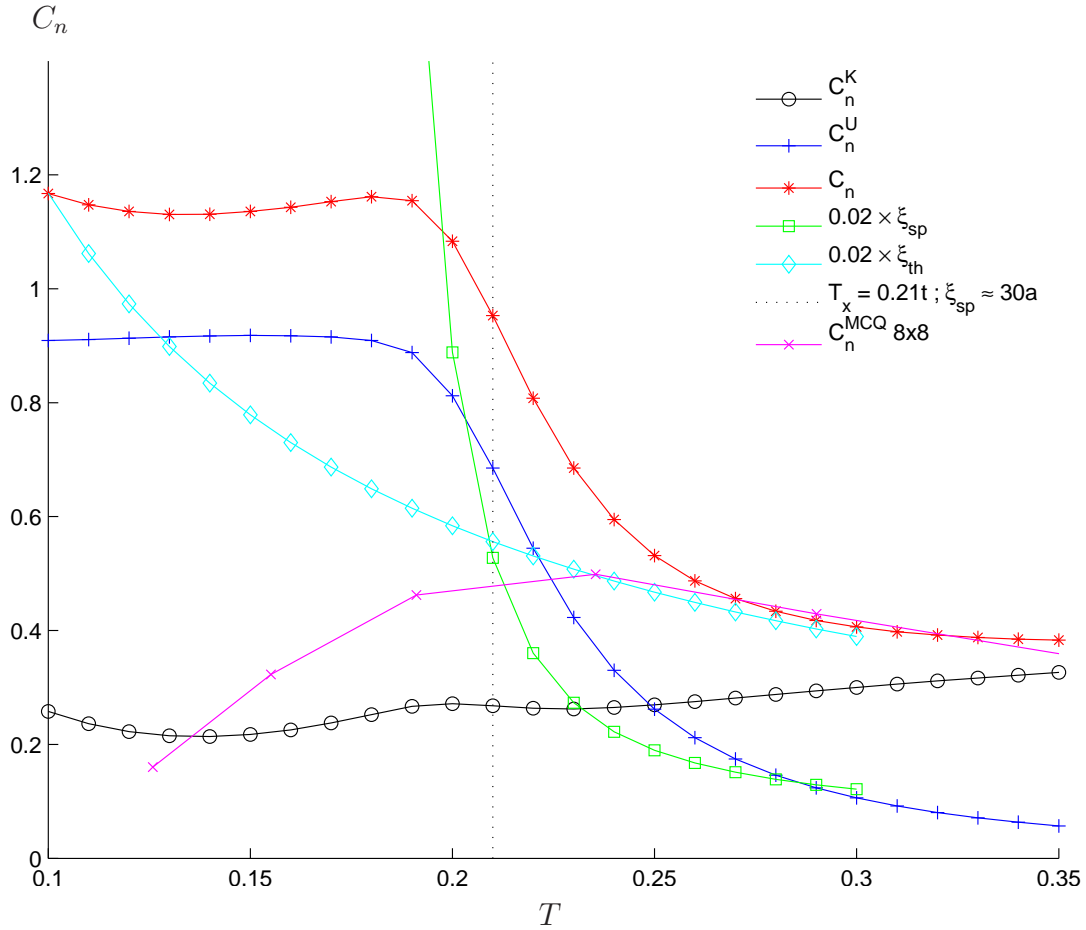


FIGURE 6.11 – Sur ce graphique se trouvent, en fonction de la température, la chaleur spécifique totale ( $C_n$ ) pour  $n = 1$  et  $U = 4t$ , les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique ( $C_n^K$  et  $C_n^U$ ), la longueur de corrélation de spin ( $\xi_{sp}$ ), la longueur thermique de de Broglie ( $\xi_{th}$ ), la température de passage qui se trouve à  $T_x = 0.21t$  et finalement la chaleur spécifique totale pour le Monte Carlo Quantique. Pour ces paramètres, à  $T_x$ , la longueur de corrélation est d'environ  $30a$ , où  $a$  est le pas du réseau. Les longueurs de corrélation furent renormalisées par un facteur 50 afin de les comparer à la chaleur spécifique.

est maximale comme le montre les résultats Monte Carlo<sup>4</sup> pour un réseau  $8 \times 8$ . Bien que les résultats ACDP montrent le contraire, il faut comprendre que la double occupation chute sans se stabiliser avec l'approche ACDP. En calculant l'entropie  $S(T) = S(T = \infty) - \int_T^\infty \frac{dT'}{T'} C_n(T')$ , il advient une température légèrement en dessous de  $T_x$  pour laquelle  $S(T) < 0$ . Ce qui viole les lois de la thermodynamique. En s'inspirant de simulations Monte Carlo, il faut conclure que la chaleur spécifique sous  $T_x$  est erronée. De plus, il semble y avoir un désaccord considérable aux températures inférieures à  $T = 0.3t$  comme le démontre la figure 6.12. Par contre, dans nos comparaisons avec le MCQ, il faut garder à l'esprit que la taille du système pour le MCQ est beaucoup plus petite que pour ACDP. Pour cette dernière, une étude en taille montre que la limite thermodynamique fut bien atteinte (voir figure 6.1), ce qui ne semble pas être le cas du MCQ. Par contre, une étude en taille avec le MCQ montre la bonne tendance [78].

Par ailleurs, on remarque que pour une température comprise entre  $T_x < T < t$  (voir figure 6.12), l'approche autocohérente à deux particules surestime la chaleur spécifique par rapport au MCQ. En regardant les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique, il semble que le désaccord entre MCQ et ACDP se situe autour du maximum de la contribution cinétique à la chaleur spécifique totale.

Une étude en taille pour le cas à  $U = 0$  suggère que les effets de taille finie apparaissent lorsque  $L \sim \frac{20}{T}$  [78]<sup>5</sup>. Cette échelle de température concorde bien avec les résultats présentés ici.

Si le système est dopé, dans la mesure où il y a toujours une température de passage, le même phénomène se produit. Par contre, thermodynamiquement, puisque  $T_x$  est plus petit, pour respecter l'évolution en température et dopage de l'entropie, l'amplitude du pic situé autour du régime classique renormalisé est plus petite. Ensuite, les longueurs de corrélation en cause sont plus grandes et évoluent légèrement différemment ce qui implique une chute moins drastique sur une gamme de température plus restreinte. Il est possible de constater les résultats pour  $n = 0.94$  et  $n = 0.88$  aux figures 6.13 et 6.14. Pour des dopages plus élevés, l'absence de chute de double occupation implique l'absence de pic de chaleur spécifique à basse température comme le montre la figure 6.15.

---

<sup>4</sup>Bien que le graphique semble montrer que le maximum serait plutôt à une température plus élevée, il est possible que le point absent du MCQ à  $T_x$  soit effectivement plus grand que ses deux voisins. Par ailleurs, la valeur de  $T_x$  n'est pas une valeur bien définie.

<sup>5</sup>À titre d'exemple, pour  $T = 0.5t$  en 2D, le calcul de la chaleur spécifique sans interactions converge pour  $L = 16$  mais pas pour  $L = 8$ .

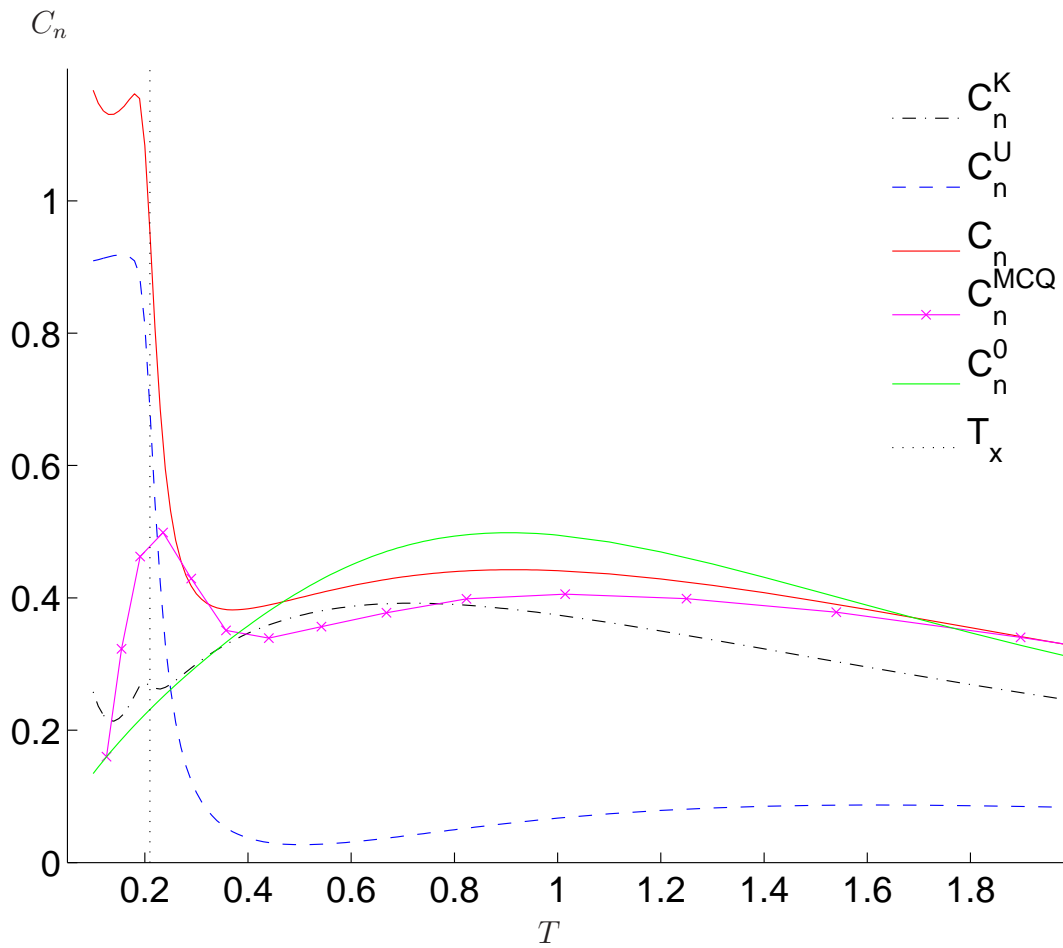


FIGURE 6.12 – Sur ce graphique se trouvent, en fonction de la température, la chaleur spécifique totale ( $C_n$ ) pour  $n = 1$  et  $U = 4t$ , les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique ( $C_n^K$  et  $C_n^U$ ), la température de passage qui se trouve à  $T_x = 0.21t$ , la chaleur spécifique totale pour le Monte Carlo Quantique et finalement la chaleur spécifique totale pour  $U = 0$  ( $C_n^0$ ). Pour ces paramètres, à  $T_x$ , la longueur de corrélation est d'environ  $30a$ , où  $a$  est le pas du réseau.

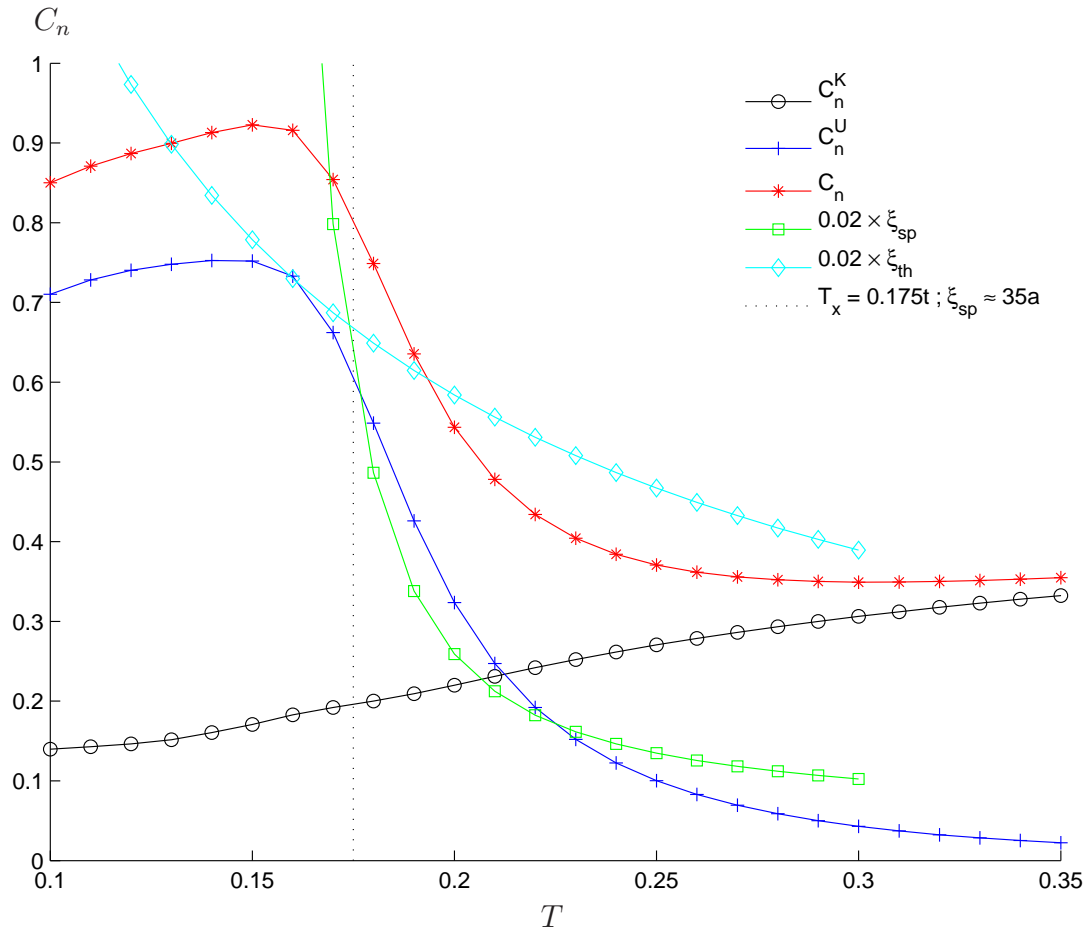


FIGURE 6.13 – Sur ce graphique se trouvent, en fonction de la température, la chaleur spécifique totale ( $C_n$ ) pour  $n = 0.94$  et  $U = 4t$ , les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique ( $C_n^K$  et  $C_n^U$ ), la longueur de corrélation de spin ( $\xi_{sp}$ ), la longueur thermique de de Broglie ( $\xi_{th}$ ) et finalement la température de passage qui se trouve à  $T_x = 0.175t$ . Pour ces paramètres, à  $T_x$ , la longueur de corrélation est d'environ  $35a$ , où  $a$  est le pas du réseau. Les longueurs de corrélation furent renormalisées par un facteur 50 afin de les comparer à la chaleur spécifique.

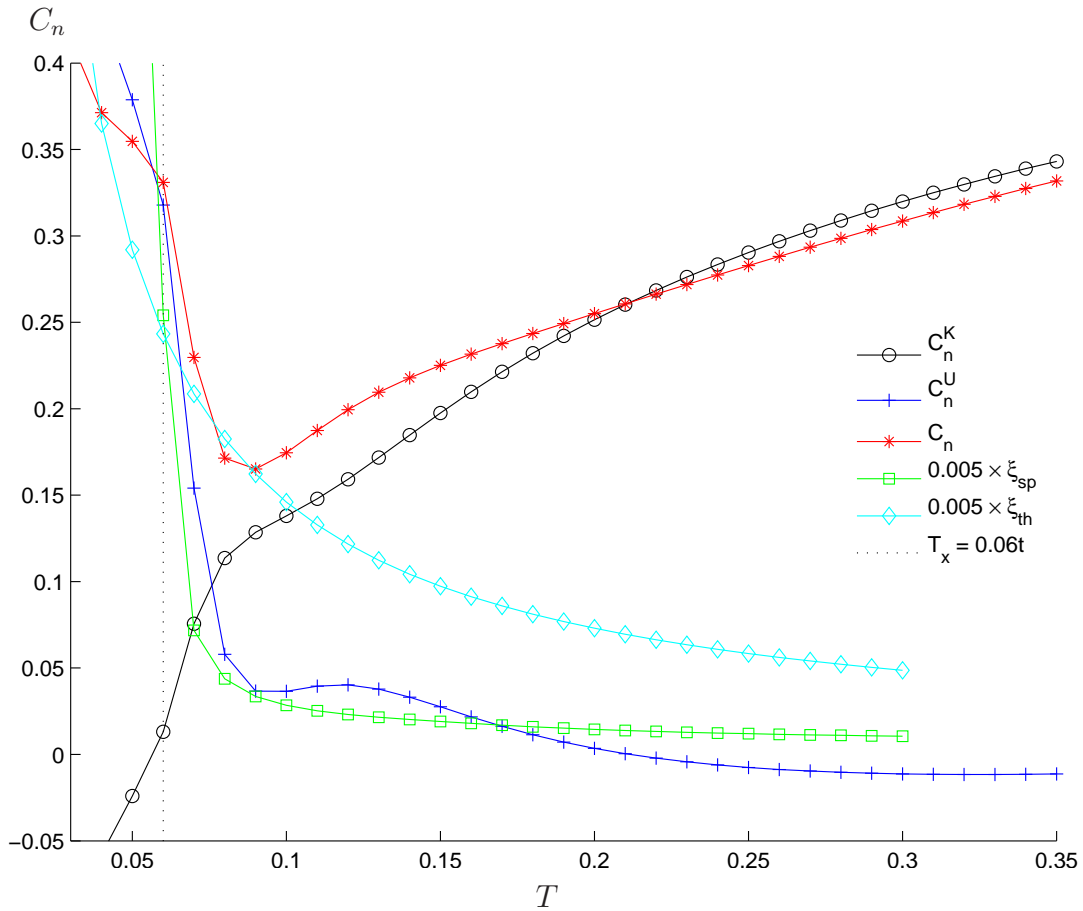


FIGURE 6.14 – Sur ce graphique se trouvent, en fonction de la température, la chaleur spécifique totale ( $C_n$ ) pour  $n = 0.88$  et  $U = 4t$ , les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique ( $C_n^K$  et  $C_n^U$ ), la longueur de corrélation de spin ( $\xi_{sp}$ ), la longueur thermique de de Broglie ( $\xi_{th}$ ) et finalement la température de passage qui se trouve à  $T_x = 0.06t$ . Pour ces paramètres, à  $T_x$ , la longueur de corrélation est d'environ  $46a$ , où  $a$  est le pas du réseau. Les longueurs de corrélation furent renormalisées par un facteur 200 afin de les comparer à la chaleur spécifique.



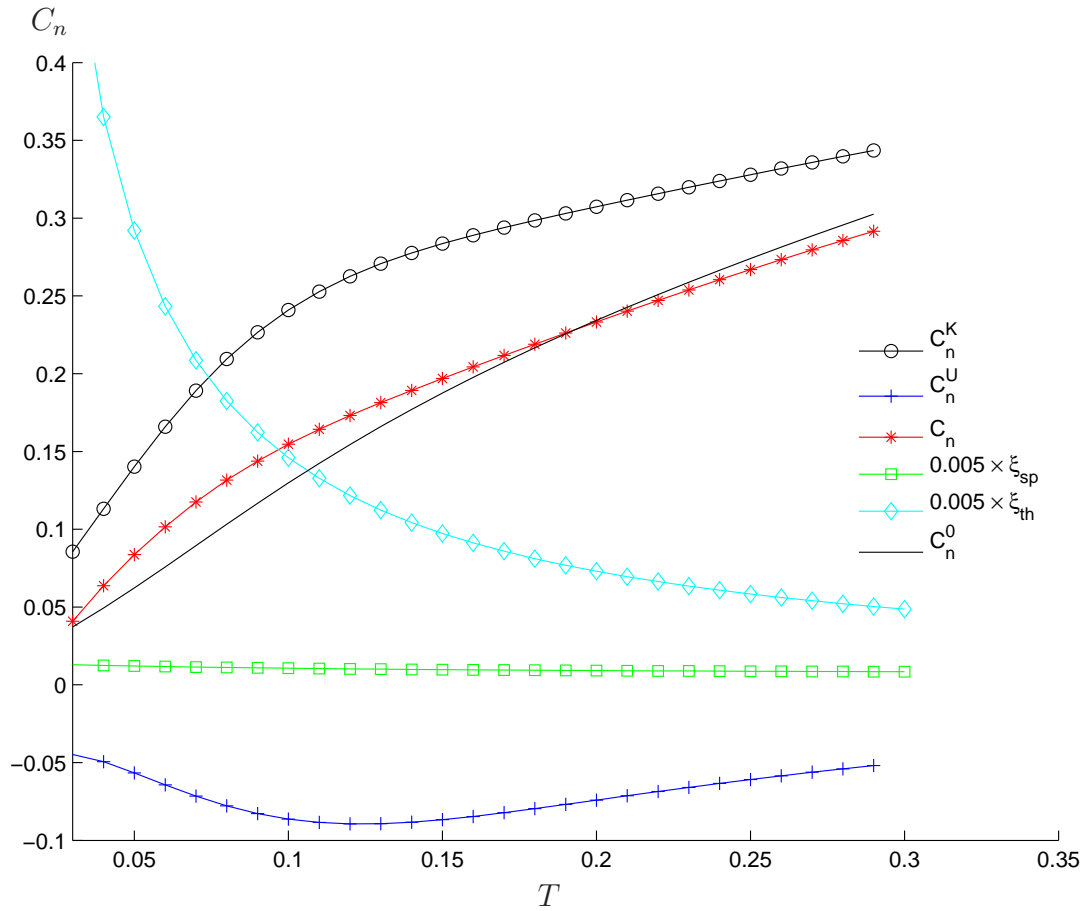


FIGURE 6.15 – Sur ce graphique se trouvent, en fonction de la température, la chaleur spécifique totale ( $C_n$ ) pour  $n = 0.80$  et  $U = 4t$ , les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique ( $C_n^K$  et  $C_n^U$ ), la longueur de corrélation de spin ( $\xi_{sp}$ ), la longueur thermique de de Broglie ( $\xi_{th}$ ) et finalement la chaleur spécifique sans interaction. Pour ces paramètres, il n'y a pas de  $T_x$ .

### 6.3.2 Potentiel chimique

Un pic de chaleur spécifique à basse température est induit par la présence de fluctuations magnétiques. Le maximum se situe à la température de passage. La présence de ce pic porte une incidence sur l'évolution des fonctions thermodynamiques en fonction du dopage. Dans cette section, il sera question de l'influence de la double occupation sur le potentiel chimique. Il s'agira d'abord de dériver une formule approximative pour le potentiel chimique afin de développer une intuition pour les résultats surprenants présentés plus loin. Soit l'énergie libre :

$$F(T, n, U) = E(T, n, U) - TS(T, n, U) \quad (6.11)$$

$$= K(T, n, U) + U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - T \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \left( \frac{\partial K(T, n, U)}{\partial T'} \right)_n \quad (6.12)$$

$$- TU \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \left( \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial T'} \right)_n \quad (6.13)$$

Le potentiel chimique est alors :

$$\mu(T, n, U) = \left( \frac{\partial F(T, n, U)}{\partial n} \right)_T \quad (6.14)$$

$$= \left( \frac{\partial K}{\partial n} \right)_T + U \left( \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial n} \right)_T \quad (6.15)$$

$$- T \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \left( \frac{\partial^2 K}{\partial n \partial T'} \right)_{n,T} - TU \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \frac{\partial^2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial n \partial T'}. \quad (6.16)$$

Si on suppose que pour  $n < n_x$   $K(U) \approx K(0) = E(U = 0)$ , on obtient :

$$\mu(T, n, U) = \left( \frac{\partial E_0(T, n)}{\partial n} \right)_T - T \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \frac{\partial^2 E_0(T, n)}{\partial n \partial T'} \quad (6.17)$$

$$+ U \left( \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial n} \right)_n - TU \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \frac{\partial^2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial n \partial T'} \quad (6.18)$$

$$= \mu_0(T, n) + U \left( \frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial n} \right)_T - TU \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \frac{\partial^2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial n \partial T'}. \quad (6.19)$$

Ensuite, si on suppose que, pour  $n < n_x$  toujours, avec  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \approx \alpha n^2$  avec  $\alpha = \frac{\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{n^2}$  tel

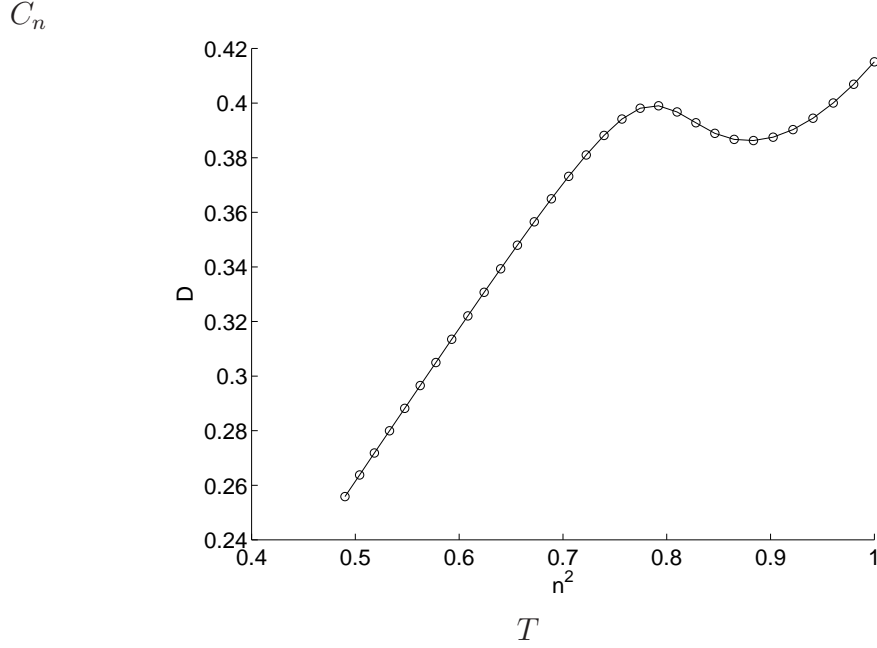


FIGURE 6.16 – Graphique de  $U\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}$  en fonction de  $n^2$  pour  $t' = 0$  et  $U = 4t$ . Entre  $n = 0.5$  et  $n = 0.75$ ,  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}$  varie comme  $n^2$ .

que  $\frac{\partial \alpha}{\partial n} = 0$ , comme le suggère la figure 6.16, et sachant que  $\frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T \partial n} = \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial n \partial T}$ , on obtient :

$$\mu = \mu_0 + 2U \frac{\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{n} - 2 \frac{TU}{n} \int_0^T \frac{\partial T'}{T'} \left( \frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T'} \right)_n. \quad (6.20)$$

$$= \mu_0 + 2U \frac{\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{n} - \frac{2T}{n} S_U \quad (6.21)$$

Cette expression possède des ressemblances avec une expression déjà obtenue pour ACDP [72]. Cette expression s'écrit :

$$\mu = \mu_0 + \frac{n}{2}(U + U_{sp}(1 - n)) \frac{1}{2 - n} \quad (6.22)$$

Si on analyse l'évolution de la chaleur spécifique pour les faibles températures en fonction de  $n$  et  $T$ , on remarque trois scénarios. D'abord, pour un fort dopage, les fluctuations de spin sont absentes, comme le montre la figure 6.15. La figure 6.10 montre que pour  $n = 0.8$  à  $U = 4t$ , la double occupation tend vers une constante à basse température. Il est alors possible de négliger les contributions entropique provenant de la double occu-

pation. La contribution cinétique est déjà incluse dans l'approximation qui stipule que l'énergie cinétique est environ égale à l'énergie totale sans interaction.

Ensuite, lorsque le dopage est très faible, le pic de chaleur spécifique associé aux fluctuations antiferromagnétiques se trouve à une température plus élevée que celle à laquelle on s'intéresse. On sait que l'entropie par site, à température infinie est  $S(\infty) = \int_0^\infty \frac{dT'}{T'} C(T')$   $= 2 \ln \left( \frac{2}{2-n} \right) - n \ln \left( \frac{n}{2-n} \right)$  [4]. De plus, à demi rempli, pour le MCQ, il fut démontré que  $\int_{T_1}^\infty \frac{dT'}{T'} C_n(T', n, U) = S(T = \infty, n)$  [24] pour  $T_1 > 0$ , où  $T_1$  est la plus petite température calculée, température en dessous de laquelle les contributions à l'entropie totale (intégré de  $T = 0$  à  $T = \infty$ ) sont négligeables. Pour l'argument, on suppose que la température qu'on considère, pour le calcul du potentiel chimique en fonction de la densité, se trouve à  $T_1$  ou moins. C'est donc dire que, considérant que le pic de chaleur spécifique se situe à la température de passage  $T_x(n = 1)$ , si on considère une température  $T < T_x(n = 1)$ , l'entropie est à peu près nulle. Et encore une fois le dernier terme de l'équation (6.20) peut être négligé.

Il faut noter que pour  $U = 0$ , l'entropie à température infinie a la même valeur que pour  $U \neq 0$ ;  $S^0(T = \infty, n, U = 0) = S(T = \infty, n, U)$ . Cela remet en cause notre approximation stipulant que les contributions de l'énergie cinétique sont égales à celles du cas sans interaction. En effet, si :

$$S_U(\infty, n) = \int_0^\infty \frac{dT'}{T'} C_n^U(T', n) \neq 0, \quad (6.23)$$

$S(T = \infty, n, U) = S^0(T = \infty, n) + S_U(T = \infty, n) \neq S^0(T = \infty, n)$ . Par contre, il se pourrait que  $S^U(T = \infty, n) = 0$  puisque la contribution potentielle à la chaleur spécifique peut être négative ou positive<sup>6</sup>. Puisqu'il n'est pas possible avec la théorie ACDP d'obtenir la valeur de  $S_U(T, n)$  pour  $T < T_x$ , il n'est pas possible de vérifier si  $S_U(T = \infty, n) = 0$ .

Il est à noter que la chaleur spécifique cinétique  $C_K(T, n)$  calculée avec le Monte Carlo Quantique ou encore avec l'ACDP comporte des différences avec le cas sans interactions, comme le témoigne la figure 6.12. Par contre, dans la région du pic à haute température,  $C_n(T, n, U) \approx C_n^0(T, n)$ , si le couplage est suffisamment faible, la chaleur spécifique potentielle est presque nulle sauf dans la région du pic à basse température comme par exemple, à  $U = 2t$  comme le montre la figure 6.17.

Finalement, il reste les valeurs de dopage pour lesquelles le pic de chaleur spécifique

---

<sup>6</sup>C'est la chaleur spécifique totale qui doit être positive.

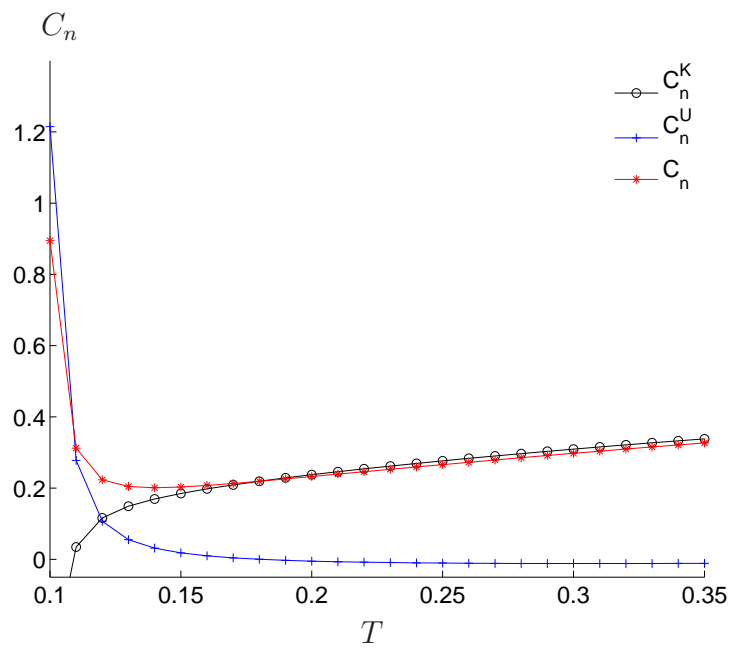


FIGURE 6.17 – Sur ce graphique se trouvent, en fonction de la température, la chaleur spécifique totale ( $C_n$ ) pour  $n = 1$  et  $U = 2t$ , les contributions cinétiques et potentielles à la chaleur spécifique ( $C_n^K$  et  $C_n^U$ ). La contribution potentielle est pratiquement nulle à haute température. La température de passage pour ces paramètres se situe autour de  $T_x \sim 0.1t$ .

se trouve à la température d'intérêt. Il s'agit de la seule région où la contribution  $S_U$  peut difficilement être négligée dans l'équation (6.20). Par contre, sachant qu'il existe une valeur de remplissage pour laquelle le pic de chaleur spécifique provenant de la double occupation disparaît (lorsque  $T_x \rightarrow 0$ ), sachant aussi que l'amplitude du pic de chaleur spécifique à la température où la chaleur spécifique est maximale diminue de façon continue jusqu'à atteindre le point où  $T_x = 0$ , il est possible de choisir une température suffisamment basse pour considérer que le second terme de l'équation (6.20) domine sur le dernier et finalement qu'on peut toujours négliger le dernier terme de cette équation. Cette approximation sera meilleure plus la température considérée est basse étant donnée la nature des approximations.

Comme on peut le constater à la figure 6.18, ces approximations semblent donner quantitativement le bon comportement (à une constante près), pour des densités inférieures à la densité de passage, pour le potentiel chimique, même pour des températures aussi élevées que  $0.1t$ . On peut attribuer les différences quantitatives aux approximations considérées ici, mais l'évolution du potentiel chimique avec le remplissage provient essentiellement de la double occupation elle-même. Lorsque le remplissage est près du remplissage de passage  $n_x$ , le potentiel chimique change de comportement et les considérations énoncées plus tôt ne tiennent plus la route. De toute façon, au-delà de ce point la validité de l'approche ACDP peut être remise en cause. Par contre, cette approximation indique que la double occupation a une incidence sur l'évolution du potentiel chimique lorsque la longueur de corrélation de spin croît avec le remplissage. Ce que cette approximation cherche à faire valoir, c'est l'influence de la chute de double occupation avec  $T$  ou  $n$  sur l'évolution du potentiel chimique. Le changement de comportement de l'évolution du potentiel chimique, calculé avec  $n = TrG^{(2)}$  et l'approximation qui marquent tous deux un changement de courbure à  $T_x$ , favorise l'apparition d'un plateau ou d'un maximum local.

On peut mentionner qu'une formulation empirique peut être obtenue en effectuant un lissage de  $U_{sp} \sim \alpha + \beta \ln(n)$ , avec  $\beta \sim \frac{1}{4}$ . Dans ce cas, le résultat du calcul approximatif donne :

$$\mu \sim \mu_0 + \frac{2U}{n} \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle + n. \quad (6.24)$$

En ajoutant une constante (-0.25), on trouve un excellent accord quantitatif sur une large gamme de dopage comme le montre la figure 6.19. Il n'existe pas de justification rigoureuse pour cette paramétrisation, mais il y a deux possibilités justifiant ce choix. La

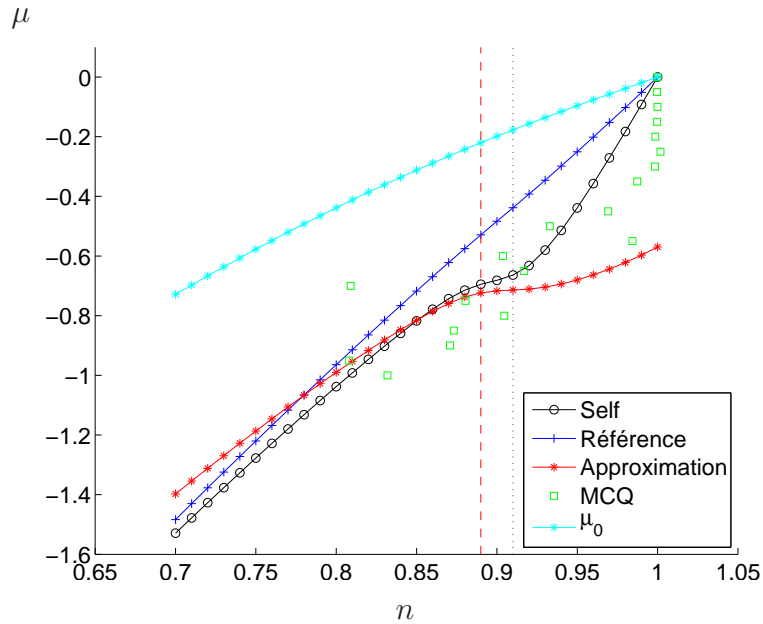


FIGURE 6.18 – Comparaison des potentiels chimiques obtenus avec le calcul de la self (Self) à l'ordre 2, l'approximation de la référence [72] (Référence), l'approximation de l'équation (6.20) (Approximation), les résultats Monte Carlo Quantique (MCQ) et finalement le cas sans interaction pour  $U = 4$  et  $T = 0.1t$  pour  $t' = 0$ . Les incertitudes MCQ ne sont *pas* sur le graphique car à l'exception du point pour  $\mu = 0$ , le problème de signe étant très grand, ces barres d'erreur sont gigantesques et elle nuit à la lisibilité du graphique. Les données MCQ sont incluses à titre indicatif uniquement. Une constante (0.6) fut ajoutée aux données obtenues avec l'approximation (6.20) pour tenir compte des termes négligés. Encore une fois, la ligne pointillée noire indique le remplissage de passage et les tirets rouges, la frontière commensurable (à droite) et incommensurable (à gauche). L'anomalie de potentiel chimique est exactement entre ces deux lignes.

première est que l'approximation qui consiste à négliger tout les termes sauf la double occupation est bonne, mais l'approximation à l'effet que  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \propto n^2$  est trop grossière. C'est ce que suggère le lissage de  $U_{sp}$ . Il faut dire que le lissage ne fut pas effectué sur  $\mu$  mais bien sur  $U_{sp}$  et les paramètres de lissage pour  $U_{sp}$  conduisent directement à un accord quantitatif pour  $\mu$ . Il est aussi possible que cette correction puisse venir des termes négligés. Mais on s'attend plutôt à ce que ces termes soit importants seulement lorsque que  $\xi_{sp} > \xi_{th}$ .

Une autre façon d'obtenir une résultats analogue à l'expression empirique consiste à utiliser plutôt l'énergie libre obtenue en intégrant sur  $U$  la double occupation (équation (5.32)) :

$$F(T, n, U) = F_0(T, n) + U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - \int_0^U dU' U' \frac{\partial \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle}{\partial U'} \quad (6.25)$$

En utilisant toujours l'approximation stipulant que  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \alpha n^2$ , on trouve :

$$\mu = \mu_0 + U \frac{\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle}{n} - \int_0^U dU' U' \left( \frac{\partial}{\partial U'} \frac{\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle}{n} \right), \quad (6.26)$$

qui rappelle énormément l'équation (6.20). Il faut préciser que le dernier terme de l'équation ci-dessus n'est pas égal au dernier terme de l'équation (6.20) puisque cette dernière fut obtenue avec des approximations sur l'énergie cinétique ( $K \sim E_0$ ). L'expression ci-haut est exacte si on remplace  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle/n$  par  $\frac{\partial \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle}{\partial n}$ . Ainsi la seule et unique approximation dans l'expression (6.26) provient de la forme approximative attribuée à  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ . Or il se trouve, d'une part, que l'équation contient toujours le terme en  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle/n$  auquel on attribue l'épaulement observé dans le potentiel chimique calculé avec  $TrG^{(2)}$ , et d'autre part, le second terme varie linéairement avec  $n$  ce qui cadre bien avec l'expression phénoménologique (6.24). En effectuant numériquement l'intégrale pour le second terme, on s'attend à obtenir un excellent accord puisque les paramètres phénoménologique concordent bien comme le montre la figure 6.19.

Lorsque le potentiel chimique obtenu avec l'approximation ne concorde plus avec le potentiel chimique obtenu avec la self ACDP au deuxième ordre, on se trouve en face d'un critère de cohérence analogue à celui pour la comparaison entre la double occupation au premier et au second ordres ACDP. Il s'agit en quelque sorte d'un autre critère de cohérence thermodynamique. Par ailleurs, si le potentiel chimique devient une constante de  $n$  sous  $T_x$ , la double occupation devra décroître avec  $n$  comme il sera montré. À cause des lois thermodynamiques, le potentiel chimique ne peut décroître avec  $n$ . Cette



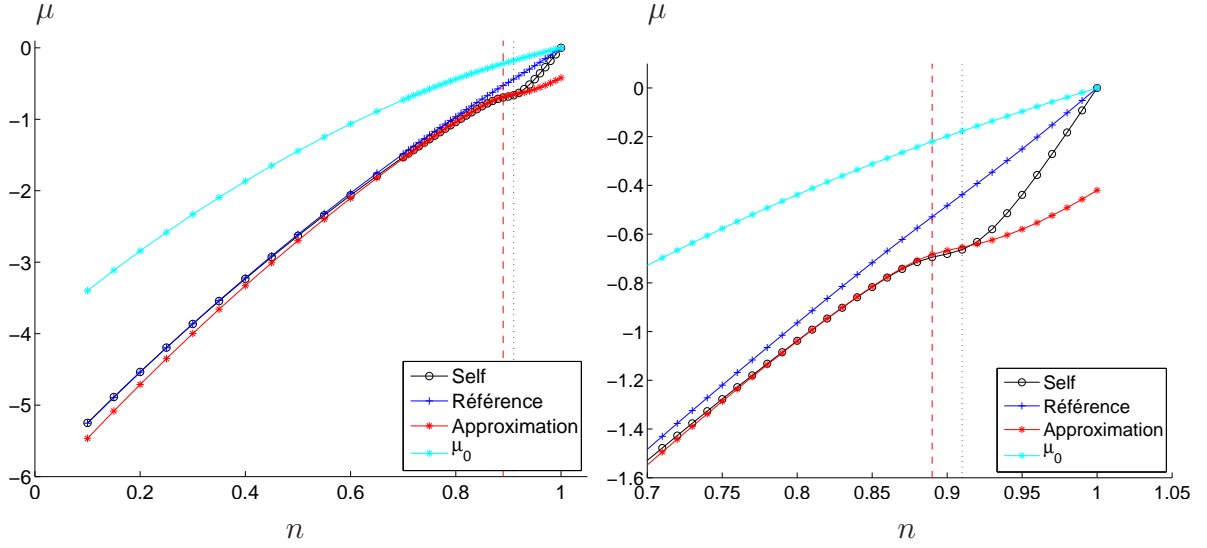


FIGURE 6.19 – Comparaison des potentiels chimiques obtenus avec le calcul de la self (Self), l’approximation de la référence [72] (Référence), l’approximation de l’équation phénoménologique (6.24) (Approximation) et finalement le cas sans interaction pour  $U = 4$  et  $T = 0.1t$ . Les deux courbes comprennent les mêmes données mais tracées sur une plage de dopages différents.

contrainte aura des répercussions sur l’évolution de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  avec  $n$  et donc aussi sur son évolution avec la température. Si on utilise l’équation (6.20) :

$$\mu = \mu_0 + \frac{2U}{n} \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \mu_{cte} \quad (6.27)$$

$$\Rightarrow \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{n}{2U} (\mu_{cte} - \mu_0). \quad (6.28)$$

Or  $\mu_0$  n’est pas constant et il évolue pour les paramètres de la figure 6.18 comme  $\mu_0 \approx 2n - 2$  lorsque  $n \rightarrow 1$ . Conséquemment,  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  sera décroissant avec  $n$ . Si par contre,  $\mu$  augmente, la double occupation sera constante lorsque  $\mu - \mu_0$  le sera et sera croissante si  $\mu > \mu_0$ . À dopage nul, pour  $t' = 0$ , ces deux valeurs sont égales et sont égales à 0.

En traçant les courbes de potentiel chimique en fonction du dopage à température constante, on observe un maximum et un minimum local dans le potentiel chimique comme le montre la figure 6.20. Si le potentiel chimique ne présente qu’un point d’inflexion pour toutes les températures, il s’agit d’une transition de second ordre marquée par une divergence de compressibilité.

Si par contre, le potentiel chimique présente un maximum et un minimum local (et

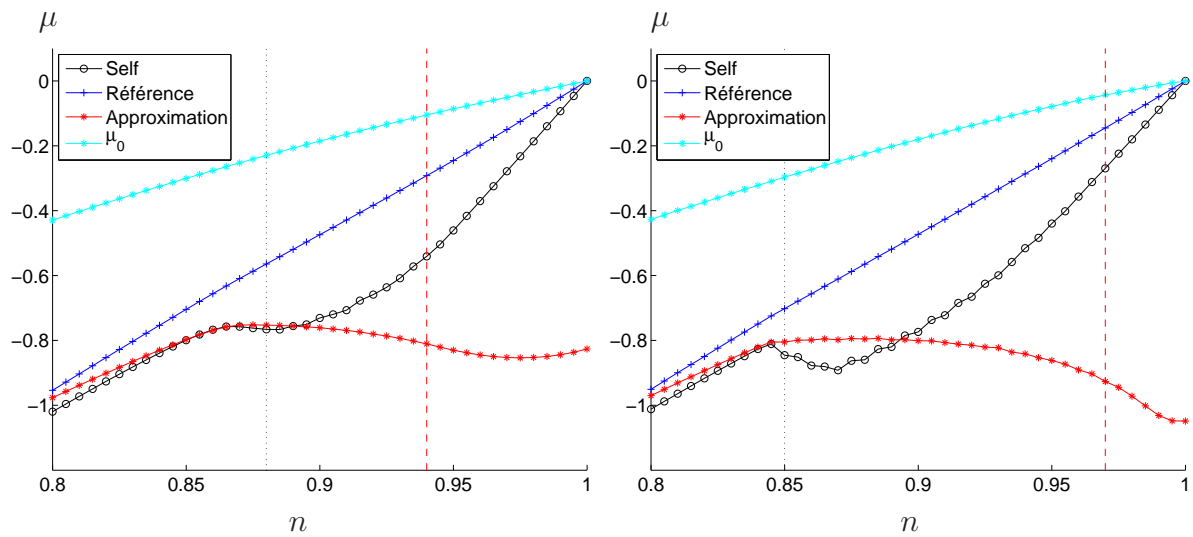


FIGURE 6.20 – Comparaison des potentiels chimiques obtenus avec le calcul de la self (Self), l’approximation de la référence [72] (Référence), l’approximation de l’équation (6.20) (Approximation) et finalement le cas sans interaction pour  $U = 4$  et  $T = 0.05t$  (à gauche) et  $T = 0.01t$  (à droite) pour  $t' = 0$ . Une fois de plus, une constante (0.6) fut ajoutée aux données obtenues avec l’approximation (6.20) pour tenir compte des termes négligés. Encore une fois, la ligne pointillée noire indique le remplissage de passage et les tirets rouges la frontière commensurable (à droite) et incommensurable (à gauche). L’anomalie de potentiel chimique est exactement entre ces deux lignes.

donc une compressibilité négative), il faut effectuer une construction de Maxwell qui marque une transition de premier ordre. On peut alors tracer les lignes spinodales qui se trouvent le long des maximums et minimums locaux, là où la compressibilité est divergente. En réalité, il faudrait faire une construction de Maxwell et remplacer la région en S par un plateau. Dans ce cas, la compressibilité n'est pas divergente car aux extrémités de la construction de Maxwell, la compressibilité ne l'est pas. La transition de premier ordre se termine en un point critique classique à la température où le potentiel chimique ne présente qu'un point d'inflexion (pas de spinodales à cette température).

Soit  $\mu_p$  la valeur du potentiel chimique au plateau, le potentiel chimique calculé croise cette valeur en trois points de remplissage  $n_{min}$ ,  $n_c$  et  $n_{max}$  tels que  $n_{min} > n_c > n_{max}$ , où  $\mu(n_c < n < n_{max}) < \mu_p$  et  $\mu(n_{min} < n < n_c) > \mu_p$ . La construction de Maxwell donne la valeur de  $\mu_p$  selon :

$$\int_{n_{min}}^{n_c} (\mu(n) - \mu_p) dn = \int_{n_c}^{n_{max}} (\mu_p - \mu(n)) dn. \quad (6.29)$$

Selon les résultats de la figure 6.20, le potentiel chimique possède un maximum local à  $n \lesssim n_x$  ( $n_x$  semble se trouver au point d'inflexion de  $\mu(n)$ ). Loin sous la température de passage, l'approche ACDP n'est plus entièrement fiable. Alors, il est possible que le potentiel chimique pour  $T < T_x$  soit tel que : sa courbure se modifie de manière à faire disparaître toute trace de transition, sa courbure se modifie de manière à faire apparaître une divergence de compressibilité pour toute température ou finalement, sa courbure se modifie de manière à confirmer l'apparition d'une transition de premier ordre.

Les graphiques pour le potentiel chimique montrent que l'anomalie de potentiel chimique est causée par la proximité à la frontière commensurable-incommensurable. Il y a un saut lorsque  $T_x$  est incommensurable. Ainsi la présence de cette anomalie dans le potentiel chimique résulte du fait qu'en ce point,  $\xi_{sp}(T, n)$  est à peu près constant, pour les raisons discutés dans la section 6.3. Connaissant la forme de la susceptibilité, qui comporte quatre pics qui se chevauchent ou encore un plateau au vecteur d'onde antiferromagnétique, on conclut que ce potentiel chimique constant, qui traduirait la présence d'une transition de premier ordre selon les résultats ACDP, manifesterait une séparation de phase entre le régime antiferromagnétique et le régime d'onde de densité de spin.

Un fait intéressant est que pour toute température inférieure à celle où apparaît cette anomalie de potentiel chimique, on observe ce maximum local dans le potentiel chimique près de  $n_x$ . De plus cette anomalie apparaît aussitôt que  $n_x$  se situe du côté

incommensurable. Cela suggère que le régime d'ondes de densité de spin est toujours constitué d'un mélange d'antiferromagnétisme et d'onde de densité de spin.

Comme mentionné précédemment, étant donné le domaine de validité de l'approche autocohérente à deux particules, il ne faut pas exclure la possibilité que cette transition ne puisse exister qu'autour de la température de passage. Cette frontière peut être tracée jusqu'aux températures nulles en utilisant des calculs sans interaction, mais avec cette théorie, il n'est pas possible de déterminer si la présence des interactions modifie cette courbe loin au dessus de  $n_x$ . La figure 6.21 illustre trois scénarios possibles. Le premier diagramme est tracé en considérant la frontière commensurable-incommensurable trouvée par le calcul sans interactions. Le second est celui qu'on trouve avec l'approche ACDP si on exécute la construction de Maxwell pour le potentiel chimique ACDP calculé avec  $TrG$ . Le dernier est celui qu'on pourrait trouver avec une théorie exacte. Il est aussi possible que la transition disparaisse entièrement ou qu'elle soit du second ordre.

Puisque l'approche ACDP n'est plus valide à un certain point sous  $T_x$  difficile à déterminer, il ne faut pas exclure que la ligne qui marque la fin de la transition de premier ordre ne corresponde pas à ce que révèle l'ACDP selon les graphiques de la figure 6.20. Il est possible que les interactions modifient la frontière commensurable-incommensurable sous  $T_x$ . Par contre, puisque le maximum local en fonction de  $n$  du potentiel chimique se trouve toujours au-dessus de  $T_x$ , on peut conclure que le scénario le plus probable soit la présence d'une transition de premier ordre. Les graphiques 6.20 suggèrent que c'est le point d'inflexion de  $\mu(n)$  qui se trouve à  $T_x$  ce qui impose un saut de potentiel chimique par l'intermédiaire de la construction de Maxwell. Par contre, l'évolution du potentiel chimique sous  $T_x$  est en réalité inconnue ou du moins incertaine, de sorte que la construction de Maxwell pour toute la région de transition ne peut être faite avec exactitude. À en croire les résultats ACDP sous  $T_x$ , le scénario deux de la figure 6.21 serait le bon.

La forme de la susceptibilité avec interaction loin de la frontière commensurable-incommensurable montre quatre pics bien distincts ce qui suggère aussi qu'il ne devrait pas y avoir de mélange de phase dans cette région. Bien sûr, le point de départ, la fonction de Lindhard, possède un minimum local à  $(\pi, \pi)$  d'amplitude considérable. Malgré le fait que les interactions augmentent le rapport  $\frac{\chi_{sp}(\mathbf{Q}_{max})}{\chi_{sp}(\pi, \pi)}$ , il demeure que la valeur de  $\chi_{sp}(\pi, \pi)$  est relativement grande par rapport aux autres valeurs de  $\chi_{sp}$  loin de  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{max}$ . Aussi, le pic est toujours partiellement asymétrique. Pour ces causes, il est possible d'émettre l'hypothèse que le régime d'ondes de densité de spin n'est jamais pur au sens où dans

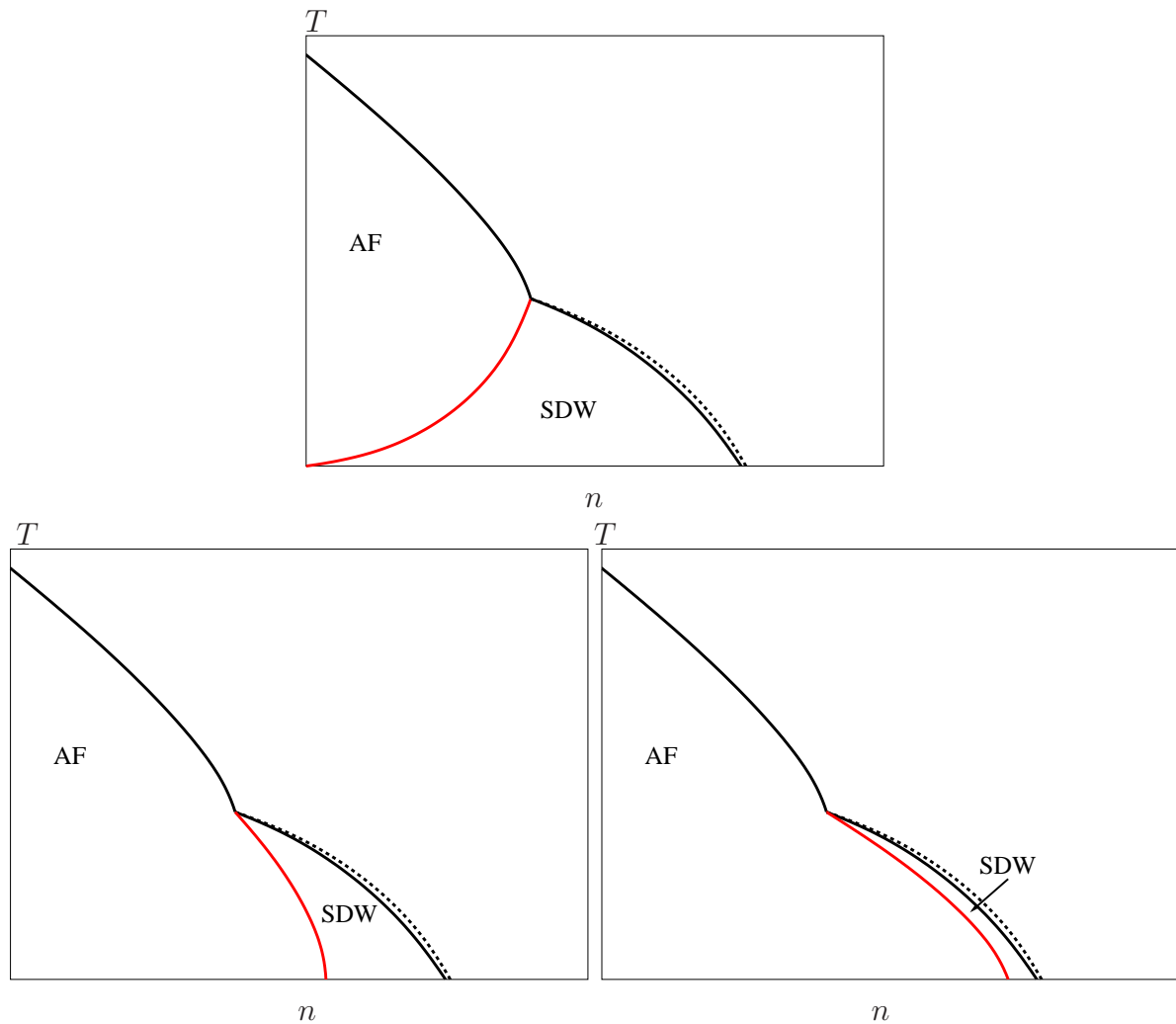


FIGURE 6.21 – Diagramme  $T - n$  pour le modèle de Hubbard à couplage intermédiaire. Les trois graphiques sont comme suit : la ligne pointillée montre la position du maximum local en  $n$  du potentiel chimique et marque le début de la transition de premier ordre. La ligne noire provient de la température de passage  $T_x$  trouvée avec ACDP. La ligne rouge marque la fin de la transition de premier ordre et la séparation entre le régime purement antiferromagnétique et celui pour les ondes de densité de spin incommensurable. Le premier graphique est construit en combinant les informations venant du cas sans interaction et les résultats ACDP. La ligne rouge est alors tracée avec la frontière commensurable-incommensurable pour le cas sans interactions. Du point de vue ACDP ce diagramme se justifie par la forme de la susceptibilité de spin ACDP le long de cette frontière. Le second scénario est celui pour lequel la ligne rouge provient du point où la construction de Maxwell se termine. Le dernier constitue une hypothèse de scénario qui pourrait apparaître avec une théorie exacte sous  $T_x$ .

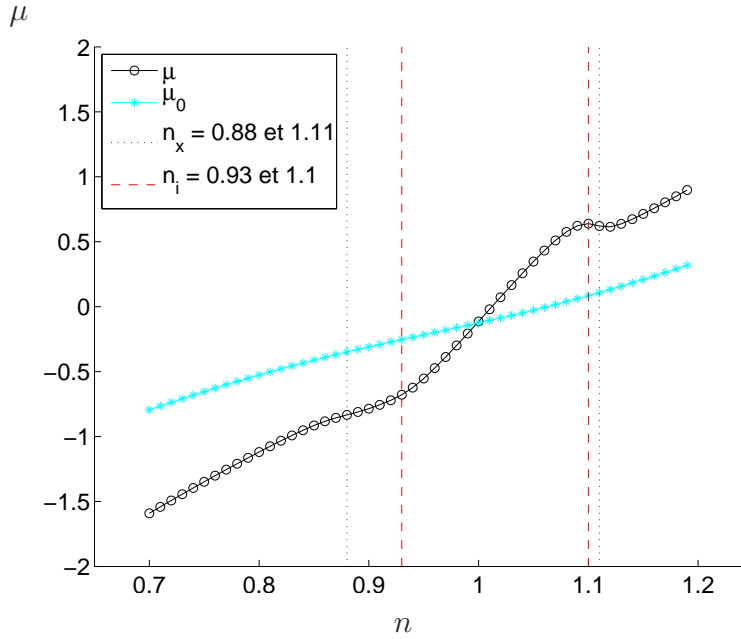


FIGURE 6.22 –  $\mu(n)$  à  $T = 0.08t$  pour  $t' = -0.05t$  et  $U = 4t$ . On remarque un saut pour le dopage aux électrons et seulement une anomalie pour les trous malgré que les conditions pour en voir un sont réunies.

ce régime, le système est toujours en présence d'une séparation de phase qui semblent disparaître lorsque le système devient purement antiferromagnétique.

Aussitôt qu'il existe une température de passage du côté incommensurable, à  $t' = 0$ , on vérifie la présence de ce saut de potentiel chimique. À proximité de la frontière, le potentiel chimique s'aplatit. Il y aura un saut seulement si  $T_x$  est marqué par une susceptibilité incommensurable. C'est l'analogue de la transition liquide-gaz pour l'eau [79]. Le point critique classique se situe là où  $T_x$  coïncide avec  $T_i$ .

Lorsqu'on ajoute un  $t'$  et qu'on dope aux électrons ( $t' < 0$ ), ce qui fut énoncé plus haut reste vrai. Mais pour le dopage aux trous, un phénomène particulier se produit. Bien qu'on observe une anomalie de potentiel chimique au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable, il n'y a pas présence de saut comme le témoigne la figure 6.22. Selon ce que la discussion précédente affirme, il faudrait voir un saut de potentiel chimique des deux côtés du demi-remplissage car les deux températures de passage sont incommensurables. Si on regarde la forme de la susceptibilité, on comprend pourquoi la séparation de phase n'est pas présente pour le dopage aux trous. La figure 6.23 montre que la susceptibilité avec interaction pour le dopage aux trous est bien piquée et ne subit pas l'élargissement qui apparaît pour le cas  $t' = 0$  ou pour le dopage aux électrons lorsque

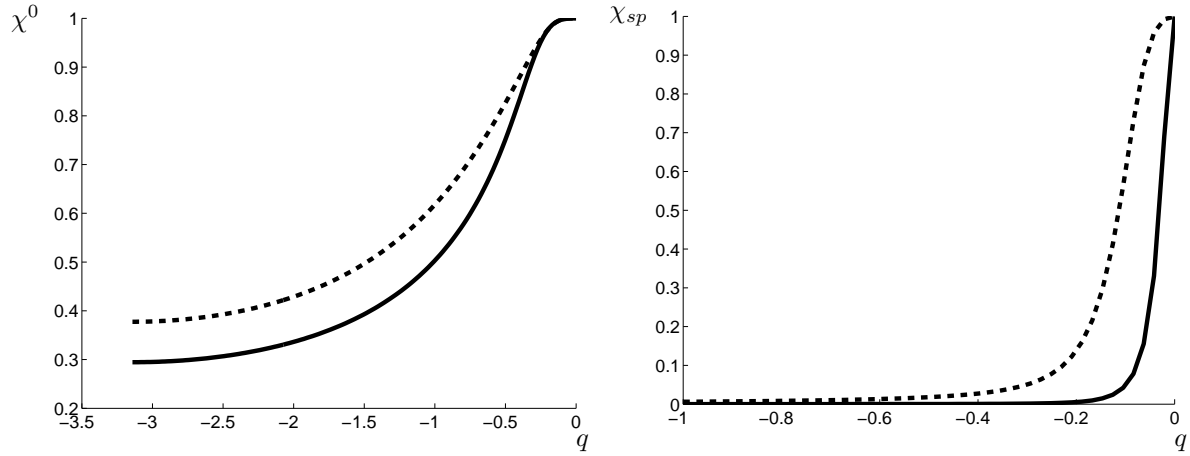


FIGURE 6.23 – La figure de gauche présente la comparaison entre la susceptibilité de spin sans interaction pour un dopage de  $n = 0.94$  (ligne pleine) et  $n = 1.11$  (tirets) à  $T = 0.08t$  et  $t' = -0.05t$ . Celle de droite montre les résultats avec interaction pour  $U = 4t$ . Les fonctions sont normalisées par la valeur au maximum. Bien qu'autour du maximum, pour le cas sans interaction, les deux fonctions se ressemblent énormément, les différences d'amplitudes au maximum font en sorte que pour le cas avec interaction, pour le dopage aux trous le pic est pointu alors que pour le dopage aux électrons, il est élargi. Cela explique pourquoi la transition disparaît pour le dopage aux trous. Puisque l'amplitude du maximum est grande devant les contributions aux autres vecteurs d'onde, la susceptibilité de spin ACDP ne présente pas les caractéristiques qui causent l'apparition du saut de potentiel chimique.

$t' \neq 0$ .

### Violation de la règle de somme thermodynamique avec ACDP

La règle de somme thermodynamique pour la compressibilité électronique s'écrit comme suit :

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \chi_{ch}(\mathbf{q}, \omega = 0) \quad (6.30)$$

Pour le cas sans interactions, on trouve alors une façon fort simple de calculer la compressibilité utile entre autres pour le calcul général de la chaleur spécifique :

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu_0}\right)_T = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \chi_0(\mathbf{q}, \omega = 0) \quad (6.31)$$

Il est aussi utile de rappeler que  $1 = \left(\frac{\partial n}{\partial \mu_0}\right)_T \left(\frac{\partial \mu_0}{\partial n}\right)_T$ .

Dans l'annexe A, il est mentionné que  $F(T, n, U) = F_0(T, n) + \int_0^U dU' \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ . En dérivant deux fois par rapport au dopage, on trouve l'inverse de la compressibilité électronique :

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T = \left( \frac{\partial \mu_0}{\partial n} \right)_T + \left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T, \quad (6.32)$$

où  $I_U \equiv \int_0^U dU' \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$ . Il faut supposer maintenant que l'énergie libre avec interaction inclut la construction de Maxwell mentionnée plus tôt. Dans ce cas,  $\mu(n)$  est une fonction monotone croissante. C'est une condition qu'imposent les lois de la thermodynamique. Alors dans le cas exact, il est possible d'inverser cette quantité pour obtenir la compressibilité électronique :

$$\left( \frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_T = \frac{1}{\left( \frac{\partial \mu_0}{\partial n} \right)_T + \left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T} \quad (6.33)$$

$$= \frac{\left( \frac{\partial n}{\partial \mu_0} \right)_T}{\left( \frac{\partial n}{\partial \mu_0} \right)_T \left( \frac{\partial \mu_0}{\partial n} \right)_T + \left( \frac{\partial n}{\partial \mu_0} \right)_T \left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T} \quad (6.34)$$

$$= \frac{\chi_0(0, 0)}{1 + \chi_0(0, 0) \left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T}, \quad (6.35)$$

où on reconnaît la forme RPA de la susceptibilité de charge si  $\left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T = \frac{U}{2}$  ou encore la susceptibilité de charge ACDP si  $\left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T = \frac{U_{ch}}{2}$ . Dans le cas RPA, la double occupation prend la valeur Hartree-Fock  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = \frac{n^2}{4}$ . Dans ce cas,  $I_U = U \frac{n^2}{4}$  ce qui correspond à l'énergie potentielle pour cette approximation. En dérivant par rapport à  $n$ , on trouve bien que  $\left( \frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2} \right)_T = \frac{U}{2}$ .

Il faut d'abord affirmer un résultat important. L'équation (6.35) est un résultat exact qui ne dépend pas du choix de l'approximation. Le premier corollaire qu'on peut en déduire est que peu importe la grandeur de  $U$ , la susceptibilité de charge statique ( $\omega = 0$ ) pour le modèle de Hubbard à  $\mathbf{q} = 0$  prend toujours la forme RPA. Le second est que si  $I_U$  est une fonction monotone croissante concave de  $n$ , la dérivée seconde est alors négative. Cela implique que, pour une fonction concave :



$$\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T = \frac{\chi_0(0,0)}{1 - \Gamma \chi_0(0,0)}, \quad (6.36)$$

où  $\Gamma$  est la valeur absolue de  $\left(\frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2}\right)_T$ . Si  $\Gamma \geq \frac{1}{\chi_0(0,0)}$ <sup>7</sup>, la compressibilité électronique diverge et on trouve une transition de premier ordre qui correspond à une séparation de phase. Il faut mentionner qu'une transition de ce type n'est pas proscrite par le théorème de Mermin-Wagner puisque qu'elle ne brise pas de symétrie continue. À cause de la règle de somme pour la charge :

$$n + 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - n^2 = \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n), \quad (6.37)$$

si  $\chi_{ch}(0,0)$  devient très grand, ou encore divergent, il faut impérativement que les autres contributions à la règle de somme soient petites afin d'avoir une double occupation finie. Cela suggère alors que la susceptibilité de charge statique doit posséder un pic à  $\mathbf{q} = 0$ .

Dans un contexte encore plus général, tout hamiltonien de la forme  $H = H_0 + H_I$  où  $H_0 = \sum_{\sigma, i \neq j} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$  répond aussi à l'équation (6.35) dans la mesure où on remplace alors  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  par  $\frac{\langle H_I \rangle}{I}$  et qu'on fait la somme sur  $I$  où  $I$  devient le paramètre associé à la nature du terme  $H_I$ .

Pour ACDP maintenant, si on utilise l'approximation présentée à l'équation (6.20) avec  $S_U = 0$ , la valeur de  $\left(\frac{\partial^2 I_U}{\partial n^2}\right)_T$  donne  $\frac{U_{sp}}{2}$ . Bien qu'a priori,  $U_{sp}$  pourrait être égal à  $U_{ch}$ , les règles de somme sur le spin et sur la charge sont telles que cela s'avère impossible en général. C'est-à-dire qu'à la limite  $U \rightarrow 0$  c'est vérifié<sup>8</sup>, mais en général, c'est impossible. Ceci suggère que l'approche ACDP viole la règle de somme thermodynamique pour la compressibilité. En comparant le calcul de  $\frac{\chi_0(0,0)}{1 + \frac{U_{ch}}{2} \chi_0(0,0)}$  comparé à  $\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T$  avec le calcul de  $\mu^{(2)}$  par  $n(\mu) = Tr G_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ , on constate effectivement une violation de cette règle de somme (voir figure 6.24). Par contre, loin de la température de passage, il semble que les résultats tendent à converger les uns vers les autres.

Si on calcule  $\chi_{ch}(0,0)$  par l'inversion de la règle de somme thermodynamique en utilisant l'approximation de l'équation (6.20), il semble y avoir un accord qualitatif entre cette version de la susceptibilité de charge au vecteur d'onde nul à fréquence nulle et la

<sup>7</sup>Afin de respecter les lois de la thermodynamique,  $\Gamma \chi_0(0,0)$  ne peut être plus grand que un. Si cette quantité devenait plus grande que un, il faudrait alors faire une construction de Maxwell.

<sup>8</sup>En fait, lorsque  $U \rightarrow 0$ ,  $U_{sp} \rightarrow U$  ce qui implique que  $U_{ch} \rightarrow U_{sp}$  et dans cette limite, l'approche ACDP retrouve le résultat RPA à l'exception de la transition de phase pour la RPA.

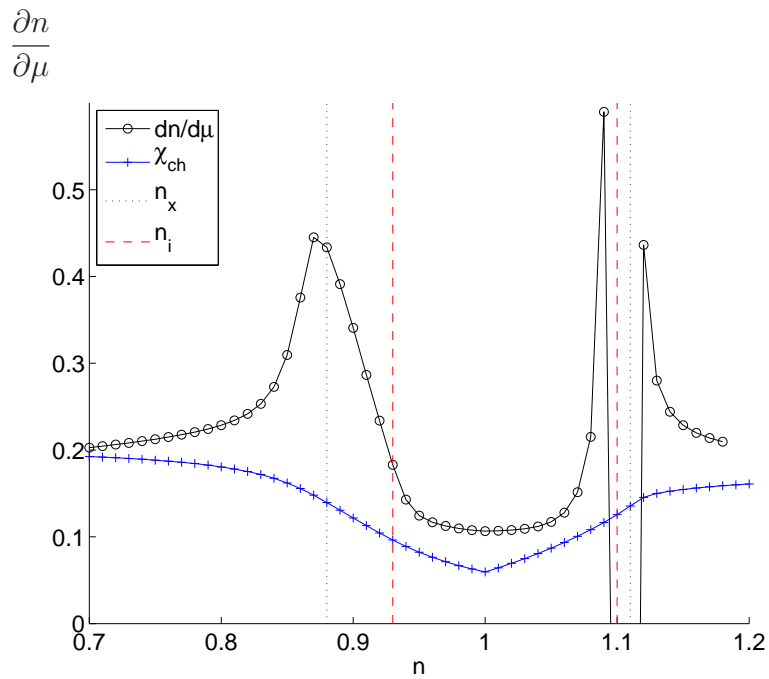


FIGURE 6.24 – Comparaison de  $\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T$  calculée avec  $TrG^{(2)}$  avec la susceptibilité de charge statique à vecteur d'onde nul en fonction de  $n$  à  $T = 0.08t$  pour  $t' = -0.05t$  et  $U = 4t$ . On remarque que la divergence de compressibilité pour le dopage aux électrons se produit au-dessus de  $T_x$ .

compressibilité électronique calculée numériquement avec  $n(\mu) = \text{Tr}G_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ . Cette anomalie de potentiel chimique, même s'il n'y a pas de divergence de compressibilité, c'est-à-dire une transition du premier ordre marquant une séparation de charge, indique que la susceptibilité de charge à  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  et  $\omega = 0$  doit être grande. En se rappelant la règle de somme sur la charge :

$$n + 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - n^2 = \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n), \quad (6.38)$$

et en utilisant le même argument que pour le cas général, si la susceptibilité de charge statique grandit au vecteur d'onde nul, il faut que la susceptibilité de charge soit maximale en ce point. Cette idée semble cohérente avec le fait que dans la règle de somme ACDP, l'interaction de charge effective devient très grande dans le régime classique renormalisé. Lorsque  $U_{ch} \rightarrow \infty$ , la susceptibilité de charge tend vers une constante soit  $\frac{1}{U_{ch}}$ . Puisque la fonction de Lindhard possède un pic à  $\mathbf{q} \sim (\pi, \pi)$ , telle que démontrée au chapitre 3, la meilleure façon d'avoir à peu près un maximum à  $\mathbf{q} \sim 0$  à fréquence nulle est de réduire le pic à  $(\pi, \pi)$  en imposant à la susceptibilité de charge de tendre vers une constante qui vaut, avec la règle de somme  $\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{1}{T}(n + 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - n^2)$  afin que :

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = n + 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle - n^2. \quad (6.39)$$

Ce résultat suggère que le choix d'un vertex constant pour la susceptibilité de charge soit inadéquat comme il fut remarqué antérieurement [62]. Malgré tout, pour ce qui est de la susceptibilité de spin, tout semble en ordre au niveau de la cohérence ACDP à l'effet que  $U_{sp} \frac{n^2}{4} \approx \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle^{(2)}$  et au niveau des comparaisons Monte Carlo. Pour des températures plus grandes que  $T_x$  le calcul de la self est tel que la contribution provenant de la charge est négligeable. Ainsi, le résultats de susceptibilité de charge est, à priori, celui considéré comme faux puisque l'approximation du vertex constant pour cette quantité est nécessairement inadéquate [62]. Pour ce qui est de la compressibilité électronique obtenue par la thermodynamique, étant donné le respect de l'uniformité thermodynamique au dessus de  $T_x$  (en dessous de  $n_x$ ) et la concordance avec le Monte Carlo, tout indique que ce résultat est valable.

## 6.4 Discussion et interprétation

Le comportement de la longueur de corrélation montre la présence d'un régime classique renormalisé autour du régime magnétique qui marque l'ouverture du poids spectral à la température de passage [1, 2]. Cette grande croissance de la longueur de corrélation fait en sorte que les fluctuations thermiques ont un temps caractéristique plus long que les fluctuations quantiques qui dominent à des températures plus élevées. Le système possède des régions qui présentent de l'ordre magnétique à courte portée (antiferromagnétique ou onde de densité de spin) qui grandissent à mesure que la température diminue. À cause du théorème de Mermin-Wagner, qui est respecté avec l'approche ACDP, ces régions sont de taille finie et seront de taille infinie lorsque la température critique pour l'ordre magnétique  $T_c = 0$  sera atteinte.

Cette croissance de l'amplitude des fluctuations induit une chute de double occupation qui cause l'apparition d'un pic de chaleur spécifique à basse température. Lorsque les fluctuations thermiques dominent dans le régime classique renormalisé, la double occupation est réduite par ces fluctuations, ce qui induit une texture antiferromagnétique qu'impose la forme de la surface de Fermi qui favorise l'antiferromagnétisme par la présence de points connectés d'un vecteur  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . Dès que la température est suffisamment élevée, la double occupation se stabilise car l'énergie interne étant plus grande, les doubles occupations peuvent se former.

Un phénomène supplémentaire apparaît lorsque le dopage varie. Pour un  $t'$  donné, il existe, pour chaque température, un dopage pour lequel la susceptibilité n'est plus maximale en  $(\pi, \pi)$  mais plutôt à un vecteur d'onde à proximité de ce point. Par symétrie, ce vecteur d'onde est dégénéré quatre fois de sorte que le pic commensurable se sépare en quatre pics incommensurables. Cet effet a des répercussions sur la règle de somme avec interaction qui impose à la double occupation de se stabiliser alors que le système se reconfigure d'un système antiferromagnétique vers un système d'onde de densité de spin incommensurable comme le montre la constance de  $\xi_{sp}(T)$  dans cette région.

En quelque sorte, on peut considérer que le vecteur d'onde de la texture magnétique évolue de façon continue de  $(\pi, \pi)$  vers les quatre vecteurs voisins. Cette reconfiguration cause deux problèmes à la susceptibilité. Le premier est qu'avant même de devenir incommensurable, la susceptibilité présente un plateau au maximum plutôt qu'un pic. Cette augmentation de la largeur du pic doit être compensée par sa hauteur. Avec l'expression de la susceptibilité ACDP, cette dernière influence directement la valeur que doit

prendre la double occupation. Ainsi, avec la contrainte provenant de la règle de somme et des lois de la thermodynamique, il advient qu'autour de la frontière commensurable-incommensurable, la longueur de corrélation devient constante. Cette constante dans la longueur de corrélation implique une constante dans la double occupation et c'est cette dernière qui cause une saturation de l'évolution de potentiel chimique avec le dopage qui ressemble à une transition de premier ordre. Puisque les lois de la thermodynamique imposent au potentiel chimique d'évoluer de façon monotone croissante, on conclut que la double occupation en fonction de la température doit se stabiliser à basse température à une valeur plateau.

Si l'anomalie de potentiel chimique provient effectivement d'une transition de premier ordre, il s'agirait d'une séparation de phase entre l'antiferromagnétisme et les ondes de densité de spin incommensurables. Pour un certain intervalle dans le diagramme de phase, les deux phases coexistent dans le système et la transition marque la séparation des deux phases. Dans ce cas, la séparation de phase pour laquelle le régime incommensurable domine marque la fin du régime de fortes fluctuations car la longueur de corrélation de spin est alors trop petite. Seul le régime antiferromagnétique peut exister seul. Lorsque les ondes de densité de spin dominant, une partie du système est toujours commensurable. Par contre, le fait que cette évolution se fasse de façon continue, les résultats suggèrent davantage qu'il s'agit plutôt d'un *crossover* pour les modes de spin. C'est-à-dire une évolution continue de la valeur de  $Q_{max}$ . Dans les faits, l'approche ACDP ne peut explorer le passage du régime antiferromagnétique mélangé avec les ondes de densité de spin vers un état purement antiferromagnétique puisque ce phénomène se produirait sous  $T_x$ .

Somme toute, l'évolution du diagramme de phase pour le modèle de Hubbard à faible couplage répond à toutes les conditions énoncées dans cette section. Selon le choix de  $U$  et des intégrales de sauts, seule la grandeur de  $U$  et la *position* de la frontière commensurable-incommensurable différencient les résultats en fonction des paramètres. Autrement dit, il serait possible de cartographier l'essentiel de la physique aux points connectés pour une valeur de  $U$ ,  $n$  et  $t'$  donné sur les résultats pour n'importe lequel de ces paramètres différents en autant que l'on renormalise les valeur de  $n$  et  $T$  judicieusement. Par contre, lorsque la valeur de  $U$  devient trop grande, il faut avoir recours à une autre théorie puisque la physique à fort couplage intervient de plus en plus.

Les propriétés de la susceptibilité de spin à fréquence nulle dépendent principalement de la forme de la surface de Fermi et de la densité d'état au niveau de Fermi. Puisque la susceptibilité de spin possède un caractère qualitativement semblable au cas

sans interaction, la surface de Fermi avec interaction possèdera des points séparés d'une même distance  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{max}$ . La présence des interactions amplifie l'effet de la présence de points connectés, ce qui cause un dépeuplement au niveau de Fermi de la densité d'état. C'est ce dépeuplement qui cause l'ouverture du pseudogap [1, 2]. Ce dépeuplement est directement causé par les corrélations électroniques qui favorise l'apparition d'une phase magnétique qui possède une longueur caractéristique  $\xi_{sp}$ . Cette longueur caractéristique impose l'apparition d'un régime classique renormalisé et par l'intervention de la règle de somme une chute de double occupation qui affecte les propriétés thermodynamiques d'une manière unique, pour ce modèle, au cas bidimensionnel à faible couplage. Lorsque le couplage est trop élevé, la surface de Fermi s'effondre plus significativement. Lorsque la dimensionnalité est plus petite, les fluctuations quantiques sont trop grandes, ce qui cause l'absence du phénomène lié à la chute de double occupation. Il s'agit d'une physique différente. Lorsque la dimensionnalité est plus grande, la transition de phase est permise et cela minimise l'énergie. À faible couplage, l'ouverture du pseudogap constitue en quelque sorte le compromis entre la préservation de l'état désordonné et le potentiel de former un état ordonné proscrit par la bidimensionnalité. On pourrait parler alors d'un état quasi ordonné, conformément à la notion de passage entre l'état normal à haute température et l'état ordonné magnétique à température nulle.

Finalement, la susceptibilité de charge, en général, est directement reliée à l'évolution du terme d'interaction d'un hamiltonien de la forme  $H = H_0 + H_I$  par l'intermédiaire de la règle de somme thermodynamique pour la compressibilité électronique. Dans le cas du modèle de Hubbard, cette dernière possède une forme RPA à  $\mathbf{q} = 0$  à fréquence nulle pour n'importe quelle valeur de  $U$ . Pour l'approche autocohérente à deux particules, cette règle de somme est violée car le choix d'un vertex constant pour la susceptibilité de charge est inapproprié. Par contre, pour la susceptibilité de spin et pour le calcul de la self-énergie, cette approximation est raisonnable pour  $T > T_x$ . S'il était possible de mettre à profit l'équation (6.35) dans un meilleur choix de correction de vertex pour la susceptibilité de charge, il serait intéressant de voir comment cette correction modifierait les résultats avec l'approche ACDP.

## 6.5 Sommaire de chapitre

- La température de passage est extraite en comparant la longueur de corrélation de spin à la longueur thermique de de Broglie  $\frac{\langle v_f \rangle}{\pi T}$ . À  $U$  constant, en fonction

- du dopage, on identifie deux régimes : un régime antiferromagnétique lorsque le maximum de la susceptibilité de spin se situe à  $(\pi, \pi)$  et un régime d'onde de densité de spin incommensurable lorsque le maximum se situe à un autre vecteur d'onde.
- Lorsque  $t'$  est différent de zéro, le diagramme pour le dopage aux trous est différent de celui pour les électrons. Pour les trous, le régime antiferromagnétique se trouve à des températures plus basses comparativement à celles pour un  $t'$  plus près de zéro et cette zone s'étend moins loin en dopage. Par contre, la zone d'onde de densité de spin incommensurable persiste à des dopages plus élevés.
  - Pour le dopage aux électrons, c'est le contraire. Bien qu'à demi rempli la température de passage est plus petite que pour un  $t'$  plus près de zéro, les températures de passage sont plus grandes dans l'ensemble. De plus, le régime d'onde de densité de spin est supprimé et tend à disparaître complètement si  $t'$  est suffisamment loin de zéro. Par contre, à partir d'un certain  $t'$ , le régime magnétique disparaît complètement.
  - Près de la frontière commensurable-incommensurable,  $T_x$  en fonction de  $n$  subit une chute drastique causée par la reconfiguration du système. L'apparition progressive d'onde de densité de spin incommensurable a pour effet de freiner l'accroissement de la longueur de corrélation de spin.
  - La température de passage vers le régime classique renormalisé marque la position d'un maximum de chaleur spécifique résultant de la chute de double occupation causée par l'entrée dans le régime classique renormalisé. Comparativement au cas tridimensionnel, où on observe un pic causé par la transition de phase antiferromagnétique tandis qu'en 2D, les fluctuations causent l'apparition de ce maximum résultant de la chute de double occupation. Il s'agit là d'une conséquence directe du respect du théorème de Mermin-Wagner dans la règle de somme sur le spin.
  - Le potentiel chimique peut être relié à l'évolution de la double occupation avec certaines approximations qui résultent en un bon accord entre le calcul du potentiel chimique fait avec la self-énergie et celui provenant de l'approximation (6.20) où l'on suppose que le dernier terme est une constante. Une anomalie dans le potentiel chimique apparaît alors à cause de la chute de double occupation. Il s'agit en quelque sorte d'une conséquence de l'uniformité thermodynamique qui établit le lien entre le potentiel chimique et la double occupation. À supposer que le potentiel chimique présente un plateau (qui implique une compressibilité électronique infinie) ou un maximum (qui implique une compressibilité électronique négative), cela impose

certaines contraintes quant à l'évolution de la double occupation dans le diagramme  $T$ - $n$ . Elle serait approximativement décroissante de façon linéaire en fonction de  $n$  entre  $n_x$  et  $n = 1$ .

- Le MCQ étant inaccessible dans la région où l'approche ACDP présente une anomalie de potentiel chimique et cette dernière donnant des résultats incertains sous  $T_x$ , il n'est pas possible d'affirmer avec complète certitude qu'il s'agit là d'une transition de premier ordre. Par contre, la compressibilité sera très grande à la frontière et il serait intéressant d'avoir recours à une autre théorie fiable sous  $T_x$  pour confirmer cette hypothèse. À tout le moins, les contraintes thermodynamiques permettent d'établir des bornes entre lesquelles la double occupation doit se trouver pour respecter ces lois.
- Dans la mesure où il s'agit bien d'une transition de premier ordre, il s'agirait d'une séparation de phase entre des domaines antiferromagnétiques et des domaines d'ondes de densité de spin incommensurables ou encore simplement le passage vers le régime classique renormalisé.
- Le diagramme de phase du modèle de Hubbard à faible couplage pour des  $t'$  variant entre 0 et  $-0.2t$  possède les caractéristiques suivantes : la longueur de corrélation croît lorsque la température décroît si le dopage n'est pas trop élevé. Si le système est commensurable, il y a apparition de domaines magnétiques commensurables ou incommensurables selon le dopage d'une taille caractéristique  $\xi_{sp}$ . Cela cause l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral et modifie l'évolution de l'énergie en fonction de la température. Cela fait apparaître un pic de chaleur spécifique ainsi qu'un changement de comportement dans l'évolution du potentiel chimique avec le dopage par l'intermédiaire de l'évolution de la double occupation. À proximité de la frontière commensurable et incommensurable et aux températures inférieures, le potentiel chimique semble montrer la présence d'un plateau qui serait causé par une séparation de phase. En deux dimensions, les fluctuations sont suffisamment grandes pour empêcher la formation d'un état ordonné, conséquence du théorème de Mermin-Wagner, mais elles ne sont pas suffisamment grandes pour empêcher l'apparition d'un état quasi ordonné magnétique antiferromagnétique ou quasi antiferromagnétique incommensurable caractérisé par un régime classique renormalisé s'étendant de la température critique magnétique  $T_c = 0$  à la température de passage. Le poids spectral, en pratique, est extrait en effectuant numériquement le progongement analytique de la self.



- La règle de somme thermodynamique pour la compressibilité électronique n'est pas respectée pour ACDP. Cela suggère que le choix d'une constante pour le vertex de charge est en cause. Dans le cas général, la compressibilité électronique est égale à la susceptibilité de charge statique à vecteur d'onde nul. Par l'intermédiaire de l'énergie libre avec interaction calculée avec l'intégrale sur l'interaction, on démontre que cette susceptibilité de charge adopte la forme RPA en général en ce point.

# Chapitre 7

## Points critiques et régime critique quantiques

Il fut présenté au chapitre 3 que la longueur de corrélation a un comportement exponentiel en température dans le régime classique renormalisé (équation (3.7)). De plus, il fut démontré que la longueur de corrélation adopte un comportement différent au voisinage d'un point critique quantique. Le comportement en température devient alors  $\xi \propto \frac{1}{\sqrt{T}} g\left(\frac{\Delta n}{T}\right)$ . Afin de mettre en évidence l'existence d'un point critique quantique induit par les interactions, le comportement d'échelle de deux quantités sera vérifié. D'abord, la mise à l'échelle de la longueur de corrélation en fonction de  $T$  et  $n$  doit être trouvée avec la forme mentionnée plus tôt. Ensuite, la susceptibilité de spin doit posséder une loi de mise à l'échelle telle que  $\chi_{sp}(\xi\mathbf{q}, 0) = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} X(\xi\mathbf{q}, 0)$  avec  $\frac{\gamma}{\nu} = 2$  en deux dimensions pour le modèle de Hubbard. En réalité, le point critique est induit par  $U$  et donc le point critique se situe à  $U_c$ . Mais  $U_c$  dépend du dopage (ou encore du potentiel chimique) et étant donné l'approche expérimentale associée aux supraconducteurs à haute température critique pour lesquelles on fait varier le dopage plutôt que l'interaction (par opposition, par exemple, aux supraconducteurs organiques où la dépendance en pression est reliée à  $U$ ), c'est  $n_c$  à  $U$  fixe qui sera étudié ici.

La première étape consiste à étudier les diagrammes de phases présentés au chapitre 6 pour identifier la position potentielle du point critique. C'est la valeur de  $n$  pour un  $U$  donné où  $T_x = 0$ . Il est suggéré à ce moment de retourner voir ces diagrammes où les valeurs des points critiques ont été ajoutées aux graphiques (figures 6.2 6.4 6.5 et 6.7). Les points aux températures nulles sont les points critiques qui seront présentés dans ce chapitre.

Dans le chapitre précédent, la possibilité que la transition de phase soit de premier ordre fut discutée dans le cas dopé aux électrons lorsque l'état normal rejoint un point où on a un ordre de densité de spin incommensurable. Dans le présent chapitre, cette possibilité sera négligée, c'est-à-dire que les fluctuations de spin telles qu'obtenues à la première étape d'ACDP sont étudiées. Dans ce cas la transition à  $T = 0$  est continue, c'est-à-dire qu'il y a un point critique.

L'expression pour la variation de la longueur de corrélation au voisinage du point critique est utilisée pour trouver la valeur de  $n_c$  telle que  $\frac{1}{\sqrt{T}}g\left(\frac{n_c-n}{T}\right)$  est une fonctionnelle universelle. Trois façons d'obtenir la longueur de corrélation furent mentionnées jusqu'à présent :  $\xi_{sp}^2 = \xi_0^2 \frac{U_{sp}}{\delta U}$  trouvée avec le développement asymptotique de la susceptibilité,  $\xi_{sp}^2 = \frac{\chi_{sp}^{max}}{\chi_0^{max}}$  et finalement  $\xi_{sp}^2 = \left(\frac{1}{q_{1/2}}\right)^2$  extraite en calculant directement la largeur à mi-hauteur.

La seconde étape consiste à vérifier qu'au voisinage du point critique,  $\frac{\chi_{sp}(\xi_{sp}\mathbf{q})}{\xi_{sp}^2} = X(\xi_{sp}\mathbf{q})$  est aussi une fonctionnelle universelle. Or, le choix d'évaluer la longueur de corrélation avec  $\xi_{sp}^2 = \frac{\chi_{sp}^{max}}{\chi_0^{max}}$  fait en sorte qu'automatiquement la fonctionnelle ne sera pas universelle. En effet :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (7.1)$$

$$\frac{\chi_{sp}(\xi_{sp}\mathbf{q})}{\xi_{sp}^2} = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \frac{\chi_0^{max}}{\chi_{sp}^{max}} \quad (7.2)$$

$$= \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) \left(1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0^{max}\right)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (7.3)$$

Si on évalue cette fonction au maximum :

$$\frac{\chi_{sp}^{max}}{\xi_{sp}^2} = \frac{\chi_0^{max} \left(1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0^{max}\right)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0^{max}} \quad (7.4)$$

$$= \chi_0^{max}. \quad (7.5)$$

Puisque  $\chi_0^{max}$  varie avec  $n$  et  $T$ , il est tout à fait impossible que cette définition de la longueur de corrélation réponde à la condition d'universalité. Par contre, cette fonction vaut à peu près un partout dans le diagramme de phase. Ainsi, en choisissant plutôt

$\xi_{sp}^2 \propto \chi_{sp}^{max}$  comme définition donne à peu près les mêmes longueurs de corrélation et la condition sera respectée au maximum. Il reste à vérifier si la dépendance en vecteurs d'onde est bien respectée. Si on utilise la définition traditionnelle  $\xi_{sp} = \xi_0 \sqrt{\frac{U_{sp}}{\delta U}}$ , la mise à l'échelle n'est pas vérifiée. Cette expression, valable dans le régime classique renormalisé, ne l'est plus dans le régime critique.

Ainsi, les expressions de longueurs de corrélation mentionnées au chapitre 3 sont valables lorsque le système se trouve dans le régime classique renormalisé. Or pour effectuer la mise à l'échelle, il faut se placer dans un régime a priori différent. Rien ne garantit que l'une ou l'autre de ces deux définitions donne une bonne estimation de la longueur de corrélation dans tout le diagramme de phase où  $\xi_{sp} < \xi_{th}$ . En fait, lorsque qu'on effectue une vérification de la mise à l'échelle avec l'une ou l'autre de ces deux définitions, elle n'est pas vérifiée. Il faudra donc soit définir une estimation précise de la longueur de corrélation ou encore trouver une autre astuce.

## 7.1 Retour sur l'invariance d'échelle

Au chapitre 4, il fut démontré que la longueur de corrélation varie comme  $\xi \sim sf(Ts^z, \Delta ns^d) \sim T^{-\frac{1}{2}} g\left(\frac{\Delta n}{T}\right)$  en deux dimensions avec l'exposant dynamique  $z = 2$ . Il fut aussi question de deux ingrédients qui prouvent l'existence d'un point critique. Il est possible de généraliser ces deux conditions.

Soit  $\nu$ ,  $\gamma$ ,  $\phi$  et  $z$ , les exposants critiques tels que :

$$\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}; \quad (7.6)$$

$$\xi \sim (n_c - n)^{-\frac{\nu}{\phi}}; \quad (7.7)$$

$$\xi_\tau \sim \xi^z \quad (7.8)$$

$$\chi_{sp}^R(T, \Delta n, q, \omega) = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi(T\xi^{\frac{1}{\nu}}, \Delta n\xi^{\frac{\phi}{\nu}}, q\xi, \omega\xi^z), \quad (7.9)$$

où  $q \equiv |\mathbf{q} - \mathbf{Q}_{max}|$  et  $T_c = 0$ . Pour la suite, on fixe  $\omega = 0$ .

De façon similaire au travail effectué dans le chapitre 4, la fonction de mise à l'échelle générale est trouvée. Avec  $T\xi^{\frac{1}{\nu}} = 1$ ,  $\Delta n = 0$  et  $q = 0$ , l'équation (7.9) prend la forme :

$$\chi_{sp}^R \sim T^{-\gamma} \chi(1, 0, 0) \equiv T^{-\gamma} X_T^0 \quad (7.10)$$

Ensuite, en fixant plutôt  $T = 0$ ,  $\Delta n = \xi^{-\frac{\phi}{\nu}}$  et  $q = 0$ , cette fonctionnelle devient :

$$\chi_{sp}^R \sim \Delta n^{-\frac{\gamma}{\phi}} \chi(0, 1, 0) \equiv \Delta n^{-\frac{\gamma}{\phi}} X_n^0. \quad (7.11)$$

De plus, en fixant maintenant  $T = 0$ ,  $\Delta n = 0$  et  $q\xi = 1$ , la fonctionnelle prend la forme :

$$\chi_{sp}^R \sim q^{-\frac{\gamma}{\nu}} \chi(0, 0, 1) \equiv q^{-\frac{\gamma}{\nu}} X_q^0. \quad (7.12)$$

Avec le développement asymptotique présenté dans l'annexe B, on montre que  $\chi_{sp} \sim q^{-2}$  au point critique (ici avec l'origine à  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ) :

$$\chi_{sp}^R(\mathbf{q}, 0) = \frac{2\xi^2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{1 + \xi^2(q_{max} - q)^2} \quad (7.13)$$

$$= \frac{2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{\xi^{-2} + (q_{max} - q)^2} \quad (7.14)$$

au point critique,  $\xi^{-2} \rightarrow 0$  et ainsi :

$$\chi_{sp}^R(\mathbf{q}, 0) = \frac{2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{(q_{max} - q)^2} \quad (7.15)$$

$$\propto \frac{1}{(q_{max} - q)^2} \quad (7.16)$$

Cela implique alors que  $\frac{\gamma}{\nu} = 2$ . Sachant déjà, selon la dérivation du chapitre 4, que la longueur de corrélation s'écrit comme  $\xi \sim sf(Ts^z, \Delta ns^d) \sim T^{-\frac{1}{2}} g\left(\frac{\Delta n}{T}\right)$ , on trouve alors que  $\gamma = 1$ ,  $\nu = \frac{1}{2}$  et que  $\phi = 1$ . Par conséquent, en fixant  $q\xi = 1$ , on trouve la fonctionnelle universelle suivante :

$$\chi_{sp}^R = q^{-2} X\left(\frac{T}{q^2}, \frac{\Delta n}{q^2}\right). \quad (7.17)$$

Il est aussi possible de conclure que le maximum de susceptibilité possède la même dépendance en température et remplissage que la longueur de corrélation au carré :

$$\chi_{sp}^R = \frac{1}{T} X_n^T\left(\frac{\Delta n}{T}\right). \quad (7.18)$$

Puisque la susceptibilité au vecteur d'onde maximum est beaucoup plus facile à calculer que la longueur de corrélation, entre autres, à cause du problème associé à la frontière entre le régime commensurable et incommensurable, c'est cette fonction qui sera utilisée pour trouver les points critiques. Pour mettre à l'échelle la susceptibilité, les résultats des règles de mise à l'échelle de la longueur de corrélation fut obtenue sans avoir à connaître l'expression de la longueur elle-même. Tout ce qui est nécessaire à la preuve, c'est qu'au point critique, la susceptibilité s'écrit comme  $\frac{1}{\Gamma|\omega|+q^2+\xi^{-2}}$ , ce qui peut être vérifié avec le développement asymptotique et que  $\chi_{sp}^R(T, \Delta n, q, \omega) = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi(T\xi^{\frac{1}{\nu}}, \Delta n\xi^{\frac{d}{\nu}}, q\xi, \omega\xi^z)$ .

Les résultats suggèrent que ces points critiques, dans le diagramme  $n - U$  à  $T = 0$ , forment une ligne critique. Idéalement, la dépendance en  $U$  serait incluse dans la dérivation ci-dessus, mais il n'est pas possible d'extraire cette dépendance de façon analogue à ce qui fut fait pour la dépendance en  $T$  et en  $n$  au chapitre 4. La dépendance implicite, plutôt qu'explicite, en  $U$  par l'intermédiaire de  $U_{sp}(U)$  rend ce travail difficile.

## 7.2 Vérification de la mise à l'échelle avec $T$ et $n$

Avant de présenter les résultats, certaines remarques méritent d'être faites. La plupart des calculs ont été faits pour des températures variant entre  $0.01t < T < 0.3t$  et pour des dopages variant entre 0 et 30 % ( $0.78 < n < 1.3$ ). Les courbes de mise à l'échelle sont effectuées pour toutes les températures effectuées mais pour des dopages variant entre  $n_c$  et 30%. Il existe deux cas particuliers.

Le premier inclut des points pour des dopages entre 0% et  $n_c$  (figure 7.3) mais pour des températures situées à une température  $T_h$  qu'on définit comme la température pour laquelle  $\xi_{sp} < \frac{\xi_{th}}{4}$ . Cette température constitue grossièrement la ligne d'horizon au-dessus de laquelle la mise à l'échelle est vérifiée<sup>1</sup>. Les points situées entre  $T_h$  et  $T_x$  pour  $n$  situé entre  $n = 1$  et  $n_c$  se trouvent dans un régime pour lequel la longueur de corrélation voit sa dépendance en température changer d'un comportement en  $T^{-1/2}$  propre au régime critique vers un comportement exponentiel propre au régime classique renormalisé.

Le second cas inclut des points pour  $0.3t < T < 10t$  (figure 7.5) pour des dopage allant de  $n_c$  à 30%. L'utilité est d'identifier la limite à haute température qui se situe au voisinage du point critique et donc la limite haute température du régime critique.

Une autre remarque se rapporte à certains points qui, malgré la discussion, semblent ne pas concorder avec cette dernière. Lorsque  $T \lesssim 0.05t$ , des problèmes numériques ap-

<sup>1</sup>Il est difficile d'extraire une gamme précise de valeur pour  $T_h$ .

$t' \backslash U$	2	3	4	5	6
0	0.926	0.875	0.840	0.816	0.795
$-0.05t$	0.900	0.840	0.810	0.780	0.763
$-0.1t$	0.850	0.800	0.760	$\sim 0.73$	$\sim 0.70$
$-0.2t$	$\emptyset$	0.750	$\sim 0.69$	$\sim 0.67$	$\sim 0.66$

TABLEAU 7.1 – Tableau des valeurs de remplissages critiques pour le dopage aux trous. Ces remplissages critiques sont tous incommensurables. Les valeurs avec le symbole  $\sim$  furent difficiles à déterminer pour des raisons numériques.

paraissent. D’abord, la forme de la fonction de Lindhard rend la correction asymptotique (discutée en annexe B) périlleuse pour deux principales raisons. D’abord, le pic de susceptibilité voit sa pente évoluer rapidement près du maximum. Au maximum, elle est nulle mais très près du maximum, elle tend à diverger. Cela provient de la présence de singularités à température nulle qui apparaissent progressivement. Par conséquent, il est possible que l’algorithme qui cherche le maximum s’en éloigne systématiquement plutôt que de s’en approcher puisque une méthode de recherche par gradient verra une grande pente. Ensuite, cette difficulté à évaluer la position du maximum fait en sorte que le calcul de  $\xi_0$  qui intervient dans la correction asymptotique est erroné. Ainsi, ces deux problèmes doublent la difficulté numérique plutôt que de l’éliminer. Une autre raison est que la correction asymptotique est appliquée systématiquement alors qu’elle devient fautive pour  $n > n_c$ . À haute température, cela n’est pas un problème puisqu’on ajoute et soustrait une même quantité facile à intégrer. À basse température, ces contributions ne sont plus faciles à intégrer et on induit alors des erreurs numériques systématiquement.

Pour ces raisons, les points qui se situent à des  $\frac{\Delta n}{T}$  petits qui respectent bien la mise à l’échelle sont les points à haute température (dénominateur grand). Ceux qui la respectent mal sont ceux à basse température (numérateur petit) et donc très près du point critique. C’est dans cette région que la précision numérique est la plus difficile à obtenir.

En traçant la fonction de mise à l’échelle de l’équation (7.18) :  $T\chi_{sp}^2 = X_n^T \left( \frac{n_c - n}{T} \right)$ , on parvient à extraire des données de susceptibilité de spin les valeurs des remplissages critiques pour la température nulle. Pour le dopage aux trous, on trouve les valeurs de  $n_c$  au tableau 7.1.

À  $U = 2$  et  $t' = -0.2t$ , aucun dopage ne permet de mettre à l’échelle la susceptibilité. Ainsi, il y a certaines possibilités : soit il n’y a pas de point critique pour ces

$t' \backslash U$	2	3	4	5	6
0	1.0739	1.125	1.160	1.184	1.205
$-0.05t$	1.059	1.100	1.135	1.160	1.180
$-0.1t$	1.060	1.100	1.130	1.150	1.170
$-0.2t$	$\emptyset$	1.130	1.140	1.160	1.170

TABLEAU 7.2 – Tableau des valeurs de remplissages critiques pour le dopage aux électrons. Les valeurs en bleu sont des remplissages critiques commensurables et ceux en noirs sont incommensurables. Ceux en rouge sont très près de la frontière. Il faudrait faire les calculs à température nulle dans ces cas pour trancher.

paramètres, soit la fonction de mise à l'échelle est affectée par la présence du trop grand  $t'$  aux faibles valeurs de  $U$ . Ou encore, les températures calculées sont trop élevées pour atteindre la proximité du point critique où la mise à l'échelle est valide. Par contre, étant donné la robustesse de la mise à l'échelle avec la température et le dopage pour les autres paramètres, on suspecte plutôt une absence de point critique qu'une disparition de l'hypothèse d'échelle. Ceci permet donc d'obtenir qu'à  $U = 2t$  et  $t' = -0.2t$ , l'état fondamental est désordonné, autrement dit, un liquide de Fermi.

Lorsque  $t' \neq 0$ , le remplissage critique pour les trous est différent de celui pour les électrons. Lorsque  $t' = 0$ , par symétrie particule-trou, le point critique pour le dopage aux trous se trouve au même dopage que pour celui des électrons. On extrait les dopages critiques pour ce cas, inclus dans le tableau 7.2 pour fins de comparaisons.

À la figure 7.1 se trouve un graphique de  $\sqrt{T\chi_{sp}^{max}}$  en fonction de  $\frac{\Delta n}{T}$  pour toutes les valeurs de  $U$  et  $t'$  des tableaux précédents. Le choix de tracer  $\sqrt{T\chi_{sp}^{max}}$  plutôt que  $T\chi_{sp}^{max}$  est adopté par analogie avec la longueur de corrélation;  $\chi_{sp} \propto \xi^2$ . Aucun paramètre ajustable n'a été utilisé. La mise à l'échelle est universelle en  $U$  et  $t'$ . Un exemple de données brutes est présenté à la figure 7.2.

Un fait important à soulever est que plusieurs de ces points critiques se trouvent en territoire incommensurable. Par ailleurs, les courbes du graphique incluent le passage de commensurable à incommensurable. Cela indique donc que la commensurabilité ne marque pas de transition de phase au-dessus de la température de passage. C'est un *crossover* du vecteur d'onde dominant d'un vecteur  $\mathbf{Q}_{max}$  incommensurable qui évolue de façon continue jusqu'à  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi)$ .

Il faut remarquer que la figure 7.1 ne comporte que les points à des dopages plus élevés que celui du point critique. La mise à l'échelle est aussi vérifiée de l'autre côté comme



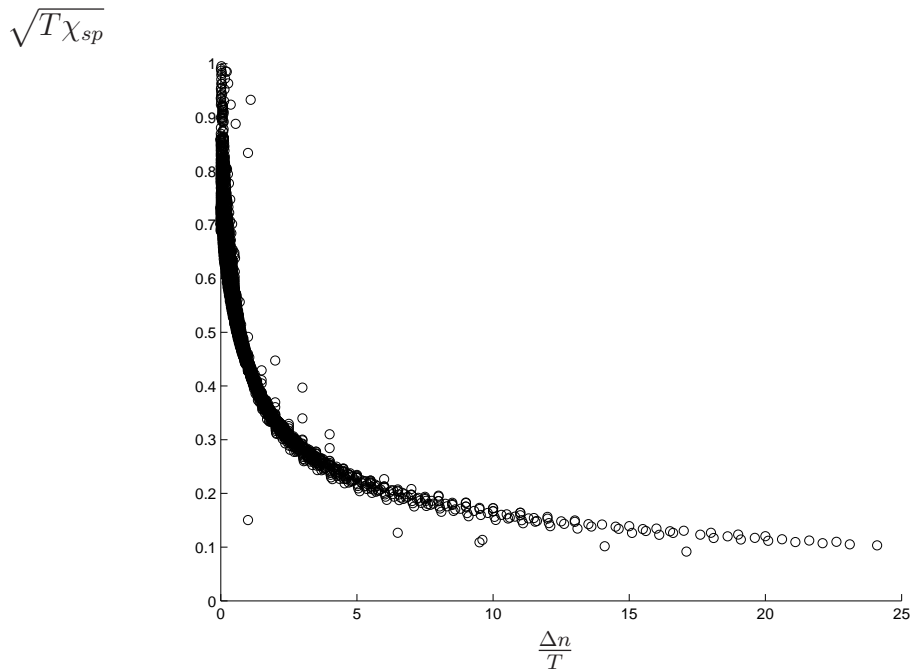


FIGURE 7.1 – Graphique que  $\sqrt{T\chi_{sp}^{max}}$  en fonction de  $\frac{|\Delta n|}{T}$  Pour  $U = 2, 4$  et  $6$ ,  $t' = 0$ ,  $-0.05t$  et  $-0.1t$  avec  $0.01t < T < 0.3t$ . Dopage aux trous ( $n_c < n < 0.7$ ) et électrons ( $n_c > n > 1.3$ ) confondus avec aucun paramètre ajustable. Autrement dit, la fonctionnelle universelle est indépendante de  $U$  et de  $t'$ . Les points rebelles sont des points pour lesquels des problèmes numériques sont apparus (principalement une mauvaise détermination du vecteur d'onde maximum pour la susceptibilité, ce qui cause une erreur systématique dans le calcul).

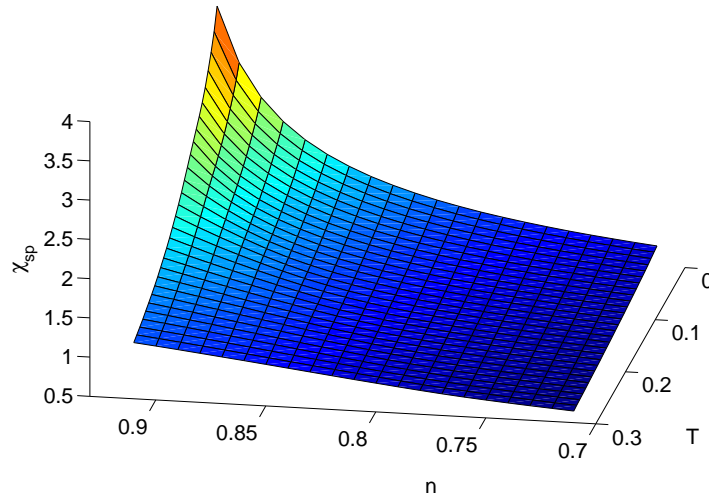


FIGURE 7.2 – Graphique de l’amplitude de susceptibilité au maximum pour  $U = 2t$  et  $t' = 0$ . Les remplissages s’étendent de  $n_c > n = 0.7$  à 0.92 et les températures de  $T = 0.01t$  à  $0.3t$ .

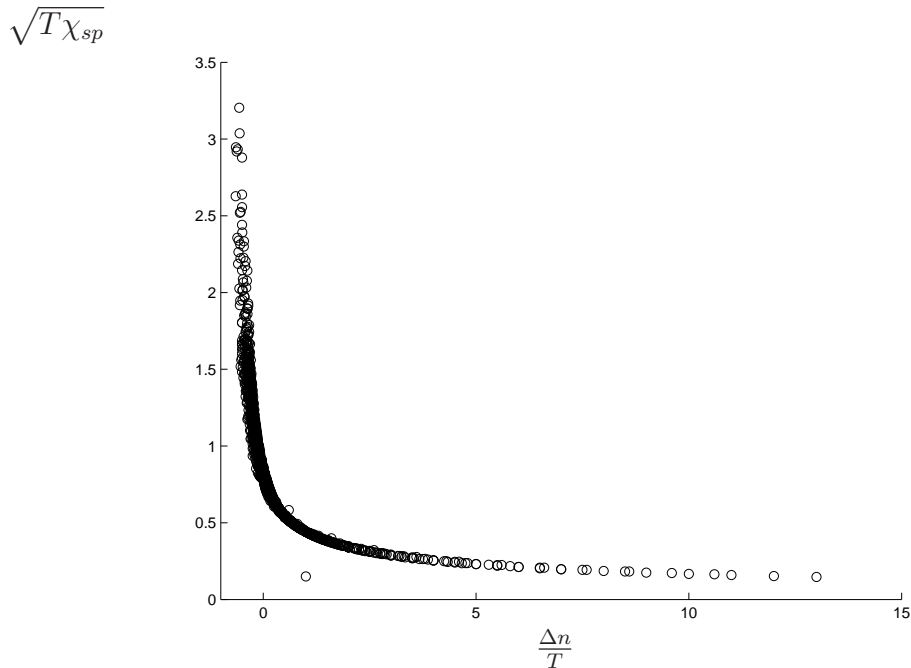


FIGURE 7.3 – Graphique de  $\sqrt{T\chi_{sp}^{max}}$  en fonction de  $\frac{|\Delta n|}{T}$  pour  $U = 4, 5$  et  $6$ ,  $t' = 0$  pour  $0.01t < T < 0.3t$ . Il s’agit du même graphique que le graphique 7.1 mais cette fois-ci pour une plus vaste gamme de dopages (tracé de  $\frac{\Delta n}{T} > -0.1$ ). Sous  $n_c$  la mise à l’échelle semble moins bonne à cause de la difficulté liée à la détermination précise de la ligne d’horizon  $T_h$ . Les points qui concordent le moins bien sont bel et bien les points les plus froids pour ces dopages donc les points se trouvant possiblement sous  $T_h$ .

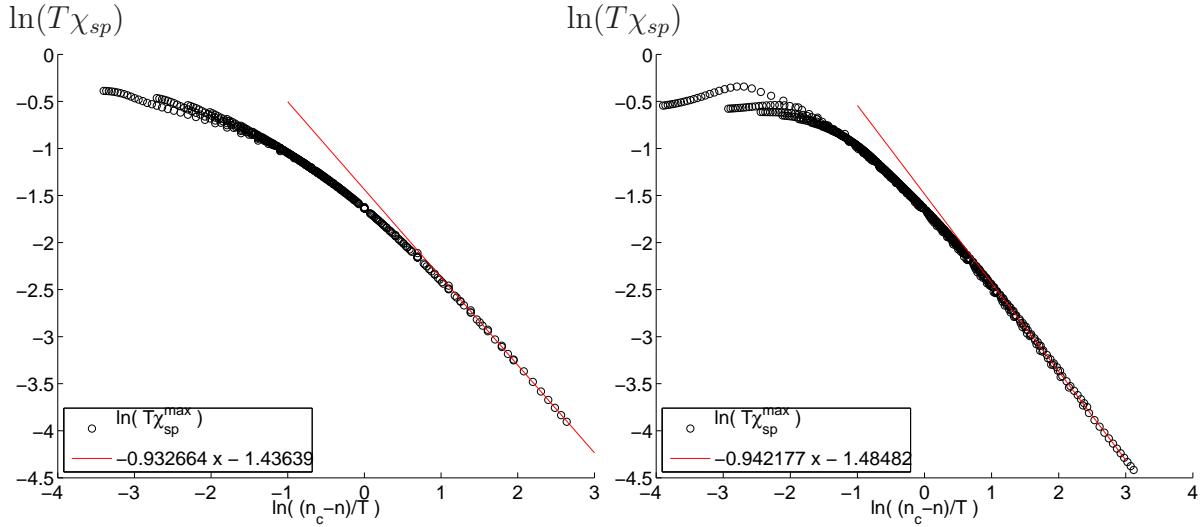


FIGURE 7.4 – Pour  $U = 4t$  à gauche et  $U = 2t$  à droite, pour  $t' = 0$ , graphique en échelle logarithmique pour vérifier que la dépendance en  $\frac{\Delta n}{T}$  est bien linéaire. Près de  $n = n_c$  (pour  $\frac{\Delta n}{T} \rightarrow 0$  du graphique de droite), les points semblent moins bien concorder car la moindre petite erreur dans le calcul de  $\chi_{sp}^{max}$  a de grande répercussion à cette échelle. Ces points se trouvent tous à très basse température très près du point critique, là où la susceptibilité de spin est très piquée. Le calcul de  $U_{sp}$  avec la règle de somme est très sensible à la précision numérique dans cette région du diagramme de phase.

le démontre la figure 7.3. Le domaine du graphique 7.1 fut restreint afin d'apprécier la précision selon laquelle la mise à l'échelle est respectée. Dans le graphique 7.3, des données près de  $T_x$  ont du être filtrées car elles ne concordent plus avec la mise à l'échelle, ce qui suggère que la ligne d'horizon du point critique ne coïncide pas avec la température de passage. Cette nouvelle température caractéristique  $T_h$  consiste grossièrement à utiliser  $\xi_{sp} \sim \frac{\xi_{th}}{4}$ . Donc, lorsque  $T > T_h$  et que  $n > n_c$ , la mise à l'échelle est vérifiée. Il est difficile d'extraire avec plus de précision la ligne d'horizon, mais cela donne une idée. Il semblerait que cette température  $T_h$  correspond au maximum local de double occupation. Autrement dit, la ligne d'horizon  $T_h$  coïnciderait au minimum local de chaleur spécifique, là où la contribution potentielle commence à devenir importante.

La figure 7.4 montre deux cas typiques de la mise à l'échelle en échelle logarithmique. On retrouve bien le bon comportement pour la dépendance en  $\frac{\Delta n}{T}$  pour des  $\frac{\Delta n}{T}$  grands qui doit être linéaire (si on utilise  $T\chi_{sp}^{max}$  plutôt que la racine).

Un autre fait absolument remarquable est l'échelle de température qui intervient sur les graphiques. La température la plus élevée sur la figure est de  $0.3t$  soit trois fois plus grande que la température de passage pour  $U = 2$ ,  $t' = 0$  à dopage nul ou encore environ

égale à  $T_x$  pour  $U = 6t$  pour le même dopage (donc la plus élevée pour ces choix de  $U$ ). D'ailleurs, pour  $t' = -0.1t$ , à  $U = 4t$  on n'enregistre pas de température de passage aux plus basses températures calculées. C'est-à-dire que pour tout  $0.7 < n < 1.3$  à  $T = 0.01t$ ,  $\xi_{th} < \xi_{sp}$ . À supposer que la température de passage maximale pour ces paramètres serait de  $0.009t$ , c'est plus de trente fois la température de passage. En unités concrètes,  $0.3t \approx 1200$  Kelvin. Partout où la mise à l'échelle est vérifiée, le système se trouve au voisinage du point critique.

En effectuant des calculs à plus haute température, il semble que la température limite pour le régime critique se trouve à  $T \sim t$ . Pour  $t' = 0$  et  $U = 2t$  et  $4t$ , on compare à la figure 7.5 la mise à l'échelle pour  $T > t$  et  $T < t$ . Il semble que pour  $T = t$ , la mise à l'échelle fonctionne encore bien, mais pour les températures plus élevées, ça ne fonctionne plus. La limite du régime critique à haute température se situe donc quelque part autour de  $T \sim t$ . Cela correspond à la position du maximum de chaleur spécifique à haute température (à ne pas confondre avec le pic à basse température situé à la température de passage). En températures réelles, cela dépend donc du choix d'échelle d'énergie pour  $t$ . Si, par exemple,  $t \sim 230$  meV, cela correspond à une température de 2667 Kelvin.

Un travail effectué à l'aide d'un simple modèle d'une chaîne d'Ising ou du modèle  $\sigma$  non linéaire [80] suggère que l'échelle pertinente pour déterminer la limite où les lois d'échelle s'appliquent se trouve autour de  $J/2$ , contrairement à ce qu'on a ici où cette limite serait reliée au paramètre de bande électronique  $t$ . L'échelle de température obtenue pour  $t$  indique que le régime critique est présent même à de très hautes températures. En contrepartie, lorsqu'il s'agit de comparer à l'expérience, Gilbert G. Lonzarich [81] commente sur l'effet d'une description plus réaliste des matériaux. Il semblerait que l'inclusion du désordre, de la présence d'une transition de premier ordre plutôt que du second ou encore l'apparition de condensats vers une autre phase réduise grandement la portée en température du régime critique. Par exemple, pour des systèmes tridimensionnels, les lois d'échelle ne seraient vérifiées qu'à une température faible comparativement à l'échelle d'énergie caractéristique du problème.

Dans le cas traité ici, le système est bidimensionnel ainsi le point soulevé à propos des matériaux 3D ne s'applique pas directement<sup>2</sup>. L'effet du désordre peut certainement modifier les résultats lorsqu'il s'agit de comparer à l'expérience. Mais ce problème n'est pas inclus dans le traitement théorique ci-présent. Ensuite, au niveau des modèles théoriques, il semblerait que la transition de phase qui cause l'apparition de ce point critique soit

<sup>2</sup>Dans un traitement réaliste, il faut effectuer le *crossover* dimensionnel.

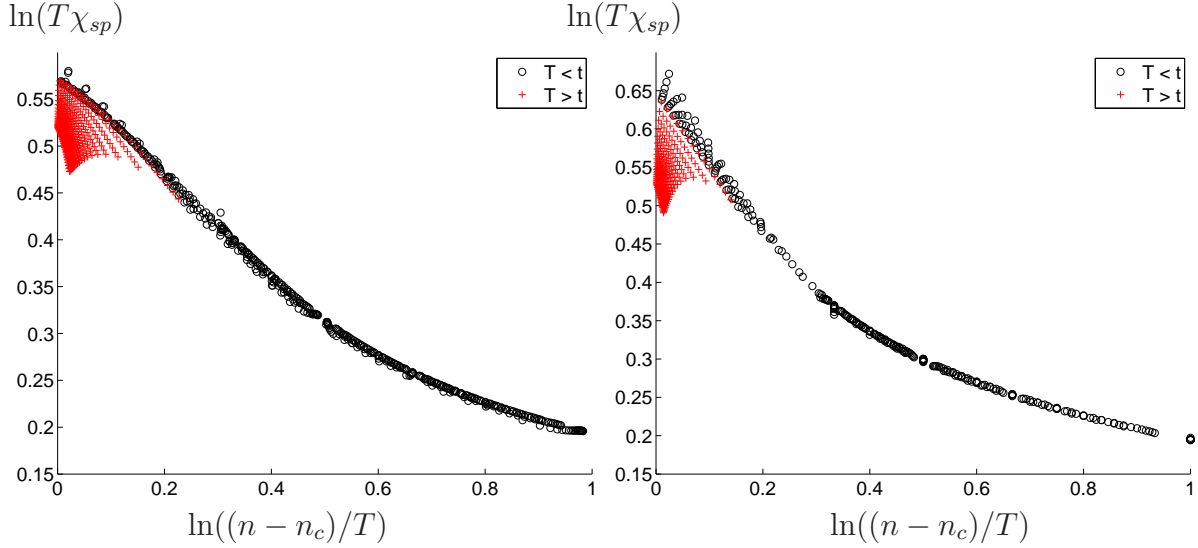


FIGURE 7.5 – Pour  $U = 2t$  (à gauche) et  $U = 4t$  (à droite) à  $t' = 0$ , comparaison de la mise à l'échelle de la susceptibilité  $\chi_{sp}^{max}$  en fonction de  $\frac{\Delta n}{T}$  ( $n_c < n < 0.7$ ) pour  $T < t$  (en noir) et pour  $T > t$  (en rouge). La mise à l'échelle ne fonctionne plus au-dessus de cette température, ce qui marque la fin du régime critique quantique. Les points noirs de la figure de droite sont asujettis aux problèmes numériques mentionnés précédemment.

du premier ordre [77, 82]. Par conséquent, le point à ce propos est déjà inclus dans le traitement. Ici on suppose que la transition est de deuxième ordre. Encore une fois, si l'expérience montre un type de transition différent de celui de la théorie, cela pourrait avoir des conséquences quant à la comparaison. Finalement, le seul point duquel la théorie n'est pas à l'abri est la possibilité de se trouver en présence d'une autre phase qui ne serait pas contenue dans la présente description. Comme par exemple la phase supraconductrice. Bien que la susceptibilité de paires de type  $d$  avec ACDP réponde au critère de Thouless [83] pour déterminer une température critique, il n'est pas évident de déterminer si la présence d'un état supraconducteur à température nulle ferait disparaître le régime critique pour des hautes températures comparativement à  $T_x$  ou  $T_h$ .

En présence d'un point critique, on trouve typiquement deux lignes d'horizon autour de la singularité. La première a déjà été identifiée. C'est la température  $T_h$ . Il est possible que la véritable ligne d'horizon soit effectivement  $T_x$  comme on s'attendrait mais il est certain qu'il faut qu'il y ait un changement de comportement entre  $T_h$  et  $T_x$ . cela se comprend par le fait que la dépendance en température de la longueur de corrélation doit être de la forme  $\xi \sim T^{-1/2}g(\Delta n/T)$  dans le régime critique et de la forme  $\xi \sim \Lambda^{-1} \exp\left(\pi\tilde{\sigma}^2\xi_0^2\frac{U_{sp}}{T}\right)$  dans le régime classique renormalisé. Dans ce cas, on interprète que

$T_h$  est la température à partir de laquelle une nouvelle fonction de passage doit être définie afin de faire passer de façon continue  $T^{-1/2}g(\Delta n/T) \rightarrow \Lambda^{-1} \exp\left(\pi\tilde{\sigma}^2\xi_0^2\frac{U_{sp}}{T}\right)$ . Les températures comprises entre  $T_x$  et  $T_h$  constituent notre ligne d'horizon pour les dopages où à  $T = 0$  l'état ordonné antiferromagnétique est l'état fondamental.

Qu'en est-il de la ligne d'horizon de l'autre côté, pour les dopages plus grands que  $n_c$ ? À température nulle, l'état du système est celui d'un liquide de Fermi. Il est possible que la ligne d'horizon soit à  $T = 0$  de sorte que tout le diagramme de phase au-dessus  $T_h$  constitue le régime critique. On considère que pour un liquide de Fermi,  $\xi_{sp}(T) \sim cte$ . Avec, comme vu au chapitre 4, pour  $d = 2$  :

$$\xi^2 \sim \frac{1}{T} \left(\frac{I_2}{\alpha}\right) \left(\frac{I_1}{\alpha} + \frac{\Delta n}{T}\right)^{-1}, \quad (7.19)$$

lorsque  $\frac{\Delta n}{T} \rightarrow \infty$ , on trouve :

$$\xi^2 \sim \frac{1}{T} \left(\frac{I_2}{\alpha}\right) \left(\frac{\Delta n}{T}\right)^{-1} \quad (7.20)$$

$$\sim \frac{1}{\Delta n} \left(\frac{I_2}{\alpha}\right), \quad (7.21)$$

qui est bien indépendant de  $T$ . Dans cette limite, on trouve le liquide de Fermi. Pour les températures les plus faibles considérées dans cette étude, on ne trouve pas de région où  $\xi(T) \sim cte$ . Autrement dit, entre  $n = 0.7$  et  $n = n_c$  pour  $T > 0.01t$ , on ne trouve pas le liquide de Fermi. La difficulté numérique qu'implique les calculs sous cette température est si prohibitive qu'on ne peut affirmer avec certitude si la limite liquide de Fermi se trouve à température finie ou nulle. La chose de certaine, c'est que la mise à l'échelle sera vérifiée de la même manière que précédemment dans cette limite étant donnée la manière dont les résultats sont tracés. En effet, on multiplie la susceptibilité par la température et on trace en fonction de  $\frac{\Delta n}{T}$ . Comme le montre l'équation 7.21, cela revient à multiplier par  $T$  les deux côtés de l'équation. On sait que  $U_{sp}(T)$  tend vers une constante à basse température pour  $n > n_c$ . Si  $\chi_0^{max}$  tend aussi vers une constante, alors  $\xi$  le sera aussi. L'autre façon d'obtenir  $\xi \sim cte$  est d'avoir  $\frac{2}{\chi_0^{max}} - U_{sp} \sim cte$ . Bien que  $U_{sp}$  tend vers une constante dans cette région, cela ne semble pas être le cas pour  $\chi_0^{max}$ .

### 7.3 Vecteur d'onde

Afin de mettre à l'échelle la susceptibilité en fonction du vecteur d'onde, on utilise l'équation  $\chi_{sp}(T, n, q) = q^{-2} X\left(\frac{T}{q^2}, \frac{\Delta n}{q^2}, q\xi = 1\right)$  avec  $q \equiv q_{max} - q$ . Cette fonction possède deux variables soit  $\frac{T}{q^2}$  et  $\frac{\Delta n}{q^2}$ . En pratique, la variable  $q$  est absorbée de la façon suivante : on trace  $q^2 \chi_{sp}(q)(T, n, q)$  en fonction de  $\frac{T}{q^2}$  et  $\frac{\Delta n}{q^2}$  de sorte que la dépendance en  $q$  devient implicite. Par contre, il demeure comme variable  $T$  et  $\Delta n$ . On pourrait choisir  $n = n_c$ , mais en pratique, c'est difficile d'être exactement à  $n = n_c$ . Pour éviter ce problème et éviter de comparer des surfaces plutôt que des courbes, on fixe  $\frac{\Delta n}{T} = cte$ , de sorte que  $\Delta n = cteT$ . En effectuant le changement de variable, on trouve  $\frac{\Delta n}{q^2} = cte \frac{T}{q^2}$  et on obtient alors une fonction de  $\frac{T}{q^2}$ .

À la figure 7.6, on trace la mise à l'échelle pour  $t' = 0$  et  $U = 4t$  pour deux valeurs de  $\frac{\Delta n}{T}$  soit 0.1 et 0.2. Les symboles noirs sont les symboles pour les valeurs de  $n$  et  $T$  telles que  $q_{max} = \pi$ . Les symboles rouges sont plutôt ceux pour  $q_{max} \neq \pi$ . Pour ce qui est de la mise à l'échelle de la susceptibilité commensurable, il n'y a pas de problèmes. La mise à l'échelle est vérifiée pour des températures variant entre  $0.01t$  et  $0.4t$ . Par contre, lorsque la susceptibilité est incommensurable, la mise à l'échelle n'est pas vérifiée pour tous les vecteurs d'ondes  $q$ . Par contre, il semble que la mise à l'échelle fonctionne mieux si on utilise la définition  $q = \pi - q$  plutôt que  $q = q_{max} - q$ .

Deux éléments sont particuliers dans ces figures. Le premier est que le fait d'utiliser toujours  $\pi$  plutôt que  $q_{max}$  donne une meilleure mise à l'échelle suggère que la nature des ondes de densité de spin n'est pas aussi simple qu'on pourrait le penser. Le second est le fait que bien que  $\chi_{sp}^{max}$  répond bien à la règle de mise à l'échelle pour  $T$  et  $n$  sans se soucier de l'incommensurabilité ce n'est pas le cas pour la mise à l'échelle en vecteur d'onde.

Dans la dérivation de l'équation (7.17), on a eu recours à la forme asymptotique de la susceptibilité pour obtenir la dépendance en  $q^{-2}$  de la susceptibilité afin de déterminer tous les exposants critiques nécessaires à la mise à l'échelle. Pour la dérivation de la dépendance en  $T$  et  $n$  de la longueur de corrélation du chapitre 4, l'incommensurabilité fut négligée. En pratique, dans le cas où le maximum est à  $(\pi, \pi)$  la dérivation du chapitre 4 s'applique comme telle. Lorsque la susceptibilité est incommensurable, les contributions provenant de chaque maximum contribuent également à l'intégrale, de sorte qu'il ne s'agirait que d'ajouter un facteur quatre dans les équations. Dans ce cas, les dépendances en température et remplissage restent inchangées, ce qui explique bien pourquoi la mise à

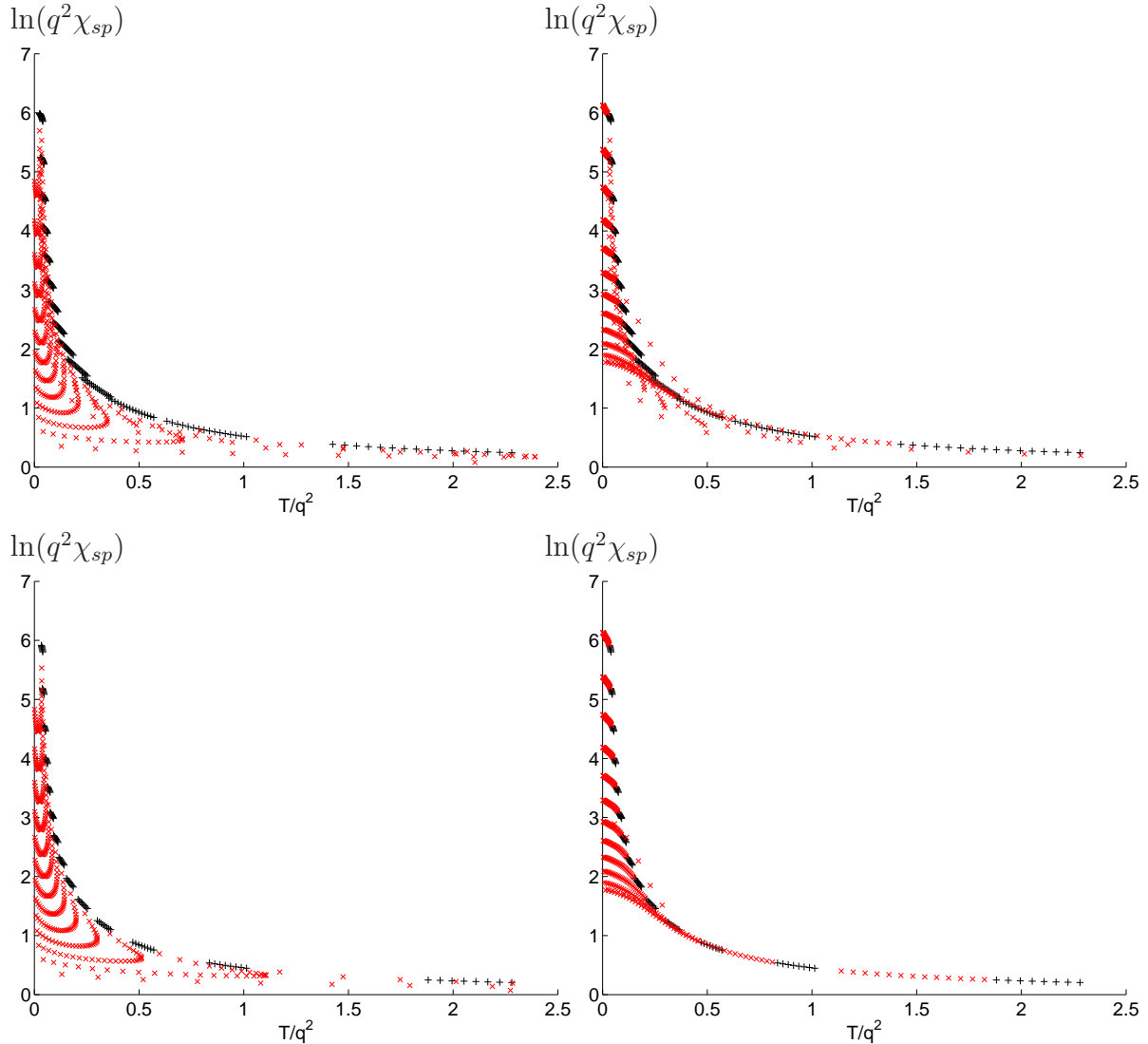


FIGURE 7.6 – Pour  $U = 4t$  et  $t' = 0$ , ces graphiques sont les graphiques de  $q^2 \chi_{sp}$  en fonction de  $\frac{T}{q^2}$ . Puisque l'axe des  $x$  varie comme l'inverse de la différence des vecteurs d'onde, les points près du maximum sont vers la droite. Les deux figures de droite ont comme définition de  $q \equiv \pi - q$  tandis que celles de gauche ont comme définition  $q \equiv q_{max} - q$ . Les deux figures du haut sont tracées à  $\frac{\Delta^n}{T} = 0.1$  et celle du bas à  $\frac{\Delta^n}{T} = 0.2$ . Les symboles noirs sont ceux pour lesquels la susceptibilité a son maximum en  $(\pi, \pi)$ . Les symboles rouges désignent les points pour lesquels la susceptibilité a un maximum à un vecteur d'onde incommensurable. Les points rouges qui coïncident avec la courbe noire sont les points le plus près de  $(\pi, \pi)$  et du maximum. Ceux qui quittent la courbe sont ceux pour les vecteurs d'onde loin de  $(\pi, \pi)$  (à droite sur le graphique car l'axe des  $x$  va comme  $\frac{T}{q^2}$ ). Les courbes du bas étant plus loin du point critique sont moins sensibles aux erreurs numériques, ce qui explique la présence de points qui concordent moins bien sur les graphiques du haut.



l'échelle de la section précédente fonctionne bien. Par contre, les résultats de la figure 7.6 suggèrent que la dépendance en vecteur d'onde change lorsque le maximum est incommensurable.

## 7.4 Nature du régime critique au voisinage du point critique

Quelles sont alors les répercussions de ce point critique sur le système à température finie? On se concentre ici sur les températures situées au-dessus de  $T_h$  et sous  $T \sim t$ . Autrement dit, comment se manifeste le régime critique.

Une suggestion intéressante est celle qu'il s'agirait d'un liquide de Fermi marginal [84]. Dans ce cas, l'étude phénoménologique faite par Varma et al. consiste à supposer que la partie imaginaire de la susceptibilité possède un comportement en  $\frac{\omega}{T}$ . Or, avec l'équation générale 7.9 :

$$\chi_{sp}^R(T, \Delta n, q, \omega) = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi(T\xi^{\frac{1}{\nu}}, \Delta n\xi^{\frac{\phi}{\nu}}, q\xi, \omega\xi^z), \quad (7.22)$$

et les exposants connus :  $\gamma = 1$ ,  $\nu = \frac{1}{2}$ ,  $\phi = 1$  et  $z = 2$ , on trouve pour la partie imaginaire :

$$\chi_{sp}''(T, \Delta n, q, \omega) = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi''(T\xi^{\frac{1}{\nu}}, \Delta n\xi^{\frac{\phi}{\nu}}, q\xi, \omega\xi^z) \quad (7.23)$$

En posant  $T\xi^{1/\nu} = 1$ , on trouve que  $\xi = T^{-\nu}$  :

$$\chi_{sp}''(T, \Delta n, q, \omega) = T^{-\gamma} X_i(\Delta n T^{-\phi}, q T^{-\nu}, \omega T^{-z\nu}). \quad (7.24)$$

Si on intègre sur le vecteur d'onde :

$$\int (dq)^2 \chi_{sp}''(T, \Delta n, q, \omega) = T^{2\nu} T^{-\gamma} \int (dq)^2 T^{-2\nu} X_i(\Delta n T^{-\phi}, q T^{-\nu}, \omega T^{-z\nu}). \quad (7.25)$$

Avec le changement de variable  $qT^{-\nu} = x$ , on trouve :

$$\int (dq)^2 \chi''_{sp}(T, \Delta n, q, \omega) = T^{2\nu-\gamma} \int (dx)^2 X_i(\Delta n T^{-\phi}, x, \omega T^{-z\nu}) \quad (7.26)$$

$$= T^{2\nu-\gamma} \Theta(\Delta n T^{-\phi}, \omega T^{-z\nu}) \quad (7.27)$$

$$= \Theta \left( \frac{\Delta n}{T}, \frac{\omega}{T} \right), \quad (7.28)$$

Qui a exactement la bonne dépendance en  $\omega$  posée par Varma et al. Il faut remarquer que cette dépendance en  $\frac{\omega}{T}$  avait déjà été obtenue avec ACDP [1] au point critique. Ici, on ajoute que cette dépendance constitue une loi de mise à l'échelle en fréquence de la susceptibilité telle qu'observée expérimentalement pour le  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  [85]. On obtient aussi en supplément, la dépendance en dopage.

Maintenant, il reste à déterminer quelles conséquences a cette forme pour la susceptibilité dans le contexte de l'approche ACDP pour les quantités discutées par Varma et al. Entre autre, le résultat pour la conductivité optique est intéressant car une étude en cours a pour but de calculer cette quantité [86]. Il faut être prudent lorsqu'on compare l'approche ACDP avec celle citée [84]. Avant de conclure que tous les résultats de cet article s'appliquent pour ACDP, il faut s'assurer que la self-énergie calculée avec l'équation (2.43) est de la même forme que celle de l'équation (2) de l'article.

## 7.5 Discussion et interprétation

La présence d'un point critique quantique semble être une caractéristique générale du modèle de Hubbard. La large gamme de paramètres couverte dans les comparaisons de mise à l'échelle montre que cette fonctionnelle est la même pour tous ces paramètres. Cela suggère que pour chaque valeur de  $U$  utilisée, le point critique est de même nature. Par conséquent, on peut conclure qu'il s'agit dans le diagramme  $n - U$  d'une ligne critique qui évolue d'une certaine façon avec  $U$  ( $n_c(U)$ ). Par contre, il n'est pas possible d'obtenir explicitement cette dépendance en  $U$  étant donnée la nature de l'approximation ACDP. En effet, la dépendance en  $U$  n'est pas explicite dans la règle de somme utilisée pour la dérivation de la fonctionnelle universelle. Cette dépendance est implicitement incluse dans la dépendance en  $U$  de la valeur de  $U_{sp}$  extraite de cette même règle de somme.  $n_c(U)$  peut être obtenu numériquement, en effectuant les calculs à  $U$  constant pour plusieurs  $U$  comme il fut fait pour obtenir les tableaux 7.1 et 7.2.

Le point critique semble bien marquer le point de terminaison des diagrammes de phase exposés dans le chapitre 6. On confirme alors l'interprétation à l'effet que ce point est la valeur de dopage pour lequel  $T_x = 0$ . À ce dopage, la longueur de corrélation varie avec la température selon  $\frac{1}{\sqrt{T}}$  contrairement à ce qu'on constate pour le régime classique renormalisé où  $\xi_{sp} \sim \Lambda^{-1} \exp\left(\pi\tilde{\sigma}\xi_0^2\frac{U_{sp}}{T}\right)$ . Ainsi, on remarque que la dépendance exponentielle se transforme progressivement en dépendance polynomiale (en  $T^{-1/2}$ ) entre  $T_x$  et  $T_h$ .

Un fait intéressant quant à cette fonctionnelle universelle pour la susceptibilité provient du fait que le comportement ne change pas lorsque le système est incommensurable. En fait, les points critiques mentionnés dans ce chapitre se situent souvent du côté incommensurable de la frontière. La fonctionnelle est donc transparente au changement avec la température, du vecteur caractéristique de l'onde de densité de spin qui constitue l'état ordonné à température nulle. Par contre, pour la mise à l'échelle en fonction du vecteur d'onde, il faudra certainement trouver de quelle manière le développement asymptotique peut être corrigé, si possible, afin d'obtenir une meilleure mise à l'échelle en  $q$ .

L'anomalie de potentiel chimique traitée dans le chapitre précédent se trouve à basse température et près de la température de passage. Bien qu'il soit impossible ici d'affirmer si la transition de phase à  $T = 0$  en fonction du dopage est du premier ou du second ordre, elle semble évoluer en une transition de premier ordre à température finie qui possède un point critique classique près de la frontière commensurable-incommensurable si le point critique est dans la zone incommensurable et que la susceptibilité de spin possède un plateau ou un important recouvrement entre les pics (voir figure 6.23 du chapitre 6). Selon d'autres études, il semblerait qu'à  $T = 0$  la transition de phase soit du premier ordre [77, 82].

Lorsqu'on regarde l'évolution de la fonctionnelle de mise à l'échelle au-dessus de la température de passage il semble que cette dernière ne concorde plus pour une certaine température  $T_h$  légèrement au-dessus de  $T_x$ . C'est de cette manière qu'il est possible d'identifier la région pour laquelle le système passe du régime quantique critique au régime classique renormalisé. Il est alors possible de tracer un diagramme de phase générique comme celui de la figure 7.7.

Il n'est pas possible de déterminer clairement la frontière entre le liquide de Fermi et le régime critique. On peut dire que si cette frontière existe, elle se situe à une température inférieure à  $0.01t$  pour  $n_c > n > 0.7$  (ou  $n_c < n < 1.3$ ) ce qui correspondrait à une température de 25 à 50K selon le choix de la valeur de  $t$  en meV.

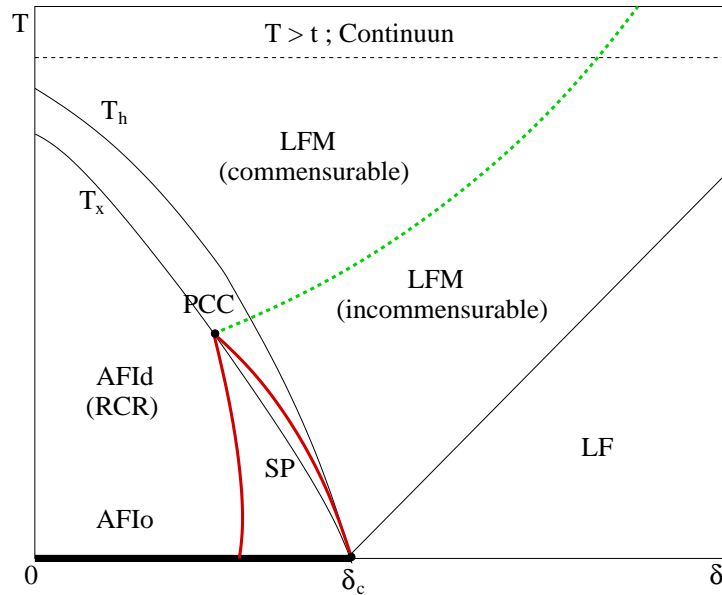


FIGURE 7.7 – Diagramme de phase générique pour le modèle de Hubbard à couplage intermédiaire en 2D. On y trouve un régime antiferromagnétique itinérant désordonné (AFId) caractérisé par la température de passage  $T_x$  et un régime classique renormalisé (RCR) qui devient l'état antiferromagnétique isolant ordonné (AFIo) à température nulle. De plus, on y trouve une valeur de température  $T_h$  en dessous de laquelle la mise à l'échelle n'est plus vérifiée, un régime quantique critique (LFM) caractérisé par un liquide de Fermi marginal au voisinage du point critique quantique  $\delta_c$  et une phase liquide de Fermi (FL). La zone entourée de rouge localise la séparation de phase (SP) marquée par la transition de premier ordre que montre le saut de potentiel chimique qui se termine par un point critique classique (PCC). La valeur de  $\delta_c$  varie avec  $U$  et  $t'$ . La ligne pointillée noire désigne la température au-dessus de laquelle on perd le comportement universel associé au point critique quantique. Cette dernière n'est pas à l'échelle, elle se trouve typiquement à une température trois fois plus grande que la température  $T_x$  pour le dopage nul. La ligne pointillée verte distingue la région où la susceptibilité est maximale à  $(\pi, \pi)$  (commensurable) de celle où il n'y est pas (incommensurable).

Au chapitre précédent, il fut mentionné qu'il était possible de décrire les propriétés du modèle de Hubbard pour une gamme de paramètres donnée avec une autre en autant que l'on renormalise  $T$  et  $n$  judicieusement. C'est la règle de mise à l'échelle qui répond à cette renormalisation.

## 7.6 Sommaire de chapitre

- Le modèle de Hubbard à une bande à faible couplage comporte un point critique quantique dans le diagramme  $T - n$ . La valeur de  $n_c$  est déterminée par les valeurs  $U$  et  $t'$  choisies. Ce point critique est présent, que la phase soit commensurable ou non, et la mise à l'échelle de la susceptibilité est possible indépendamment de la nature commensurable ou incommensurable de la phase.
- La mise à l'échelle en vecteur d'onde se fait avec le vecteur d'onde caractéristique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  même lorsque la susceptibilité est incommensurable. Dans le cas où elle est incommensurable, cette mise à l'échelle n'est respectée que pour  $\mathbf{q} \rightarrow (\pi, \pi)$ .
- La température de passage fusionne avec le point critique quantique lorsque  $T_x \rightarrow 0$ . Il s'agit aussi de la température critique pour l'ordre magnétique.
- Le régime quantique critique disparaît sous une température  $T_h$  légèrement plus élevée que la température de passage. Entre cette température et la température de passage, les exposants critiques se modifient de façon à retrouver le comportement exponentiel.
- Le régime critique se termine pour laisser place à un régime non-universel lorsque  $T \sim t$ . Cela correspond approximativement à une température de 2600 Kelvin pour un choix de  $t \sim 230\text{meV}$  comme pour les supraconducteurs à haute température critique.
- Le régime critique se caractérise par un liquide de Fermi marginal où la susceptibilité de spin varie comme  $\omega/T$ . De plus, une prédiction théorique affirme que la mise à l'échelle en dopage s'effectue avec  $\Delta n/T$ .

# Chapitre 8

## Application à un cas particulier, comparaisons avec le NCCO

Maintenant que les outils théoriques d'analyse du modèle de Hubbard à faible couplage ont été présentés, il est désormais possible de les appliquer à un cas physique intéressant. Il s'agira de comparer les résultats théoriques aux mesures pour le composé de Néodyme-Cérium-Cuivre-Oxygène (NCCO ;  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ ). Les récents résultats de diffusion par neutrons [3] ainsi que les résultats de température de pseudogap extraite par conductivité optique [73, 87] constitueront la base principale de comparaison pour ce matériau. Les courbes de  $T_x$  seront extraites pour quelques valeurs de  $U$  et  $t'$  et ces dernières seront comparées, ainsi que la longueur de corrélation calculée, aux résultats expérimentaux en question.

### 8.1 Choix des paramètres

Un des objectifs consistera à effectuer des comparaisons quantitatives. Afin de faire valoir la justesse et la pertinence de la théorie autocohérente à deux particules, il est souhaitable d'avoir le moins possible de paramètres ajustables. L'exercice visera à déterminer si le modèle de Hubbard à une bande et sa résolution par l'approche ACDP comportent les effets physiques les plus importants nécessaires pour expliquer les propriétés de ces matériaux.

Le choix de paramètres devra idéalement être tel que seul un ajustement du nombre d'électrons par site permet de faire correspondre les résultats théoriques avec les résultats expérimentaux. Pour les comparaisons effectuées ici, le choix de paramètres devrait être

fait selon les conditions suivantes :

- Tous les paramètres sauf la température et le remplissage devraient être fixes.
- Les courbes de distribution en vecteurs d’onde pour le poids spectral (*momentum distribution curve* MDC) devraient correspondre aux résultats expérimentaux pour le dopage de 15 % [11, 13].
- Les valeurs de  $U$  ne devraient pas être trop grandes ( $U \lesssim 3W/4$ ) pour s’assurer de la validité de l’approche ACDP.
- Les résultats de longueur de corrélation devraient montrer le meilleur accord quantitatif possible avec l’expérience pour les échantillons réduits [3].
- Les résultats de températures de crossover devraient correspondre aux valeurs des températures de pseudogap mesurées [73, 87] (échantillons réduits).

Avec ces contraintes, les deux paramètres de lissage restant sont la valeur de  $t$  en eV et le rapport  $U/t$ . La valeur de  $U$  sera fortement contrainte par la fenêtre qu’ouvrent les comparaisons de poids spectraux avec l’expérience. Précédemment [1], les valeurs choisies pour les intégrales de saut étaient  $t' = -0.175t$ ,  $t'' = 0.05t$ , avec  $t = 350$  meV ce qui implique alors un choix de  $U$  variant avec le dopage entre  $5.5t$  et  $6.5t$  environ. Une remarque importante est que, dans cet article, les comparaisons des résultats de poids spectral étaient faites avec des mesures sur des échantillons réduits tandis que les comparaisons pour les longueurs de corrélation étaient faites avec des mesures sur des échantillons non-réduit (*as-grown*). Ici, les comparaisons seront toutes faites avec des mesures sur des échantillons réduits.

Depuis les travaux de la référence [1], une étude de *local density approximation* (LDA) fut faite afin de trouver les meilleurs paramètres de bande pour la bande de liaisons fortes [74]. Les paramètres obtenus sont  $t' = -0.24t$ ,  $t'' = 0.15t$  et  $t''' = 0.02t$  avec  $t = 420$  meV <sup>1</sup>. Lorsqu’on utilise les paramètres de lissage de la LDA pour ACDP, même pour de très grandes valeurs de  $U$ , on n’observe pas d’ouverture de pseudogap. En fait, en comparant les résultats de la figure 6.5 à la figure 6.7 du chapitre 6, on remarque que pour  $|t'| \gtrsim 0.2t$ , le comportement du système change. Pour  $t' = -0.1t$ , on trouve, en fonction de  $U$ , une évolution qualitativement semblable à ce qu’on observe pour les valeurs de  $t'$  inférieures. Par contre, lorsque  $t' = -0.2t$ , on remarque un changement. Pour ces valeurs de  $t'$ , la frustration de l’antiferromagnétisme est trop grande.

---

<sup>1</sup>Dans l’article, on choisit arbitrairement de changer le signe de  $t'''$  et de renormaliser la valeur de  $t$  à 230 meV pour obtenir un meilleur accord avec l’expérience. Ce choix arbitraire ne tient pas compte de l’effet des interactions qui a, dans le contexte ACDP, un peu le même effet que de changer le signe de l’une ou l’autre des intégrales de saut.

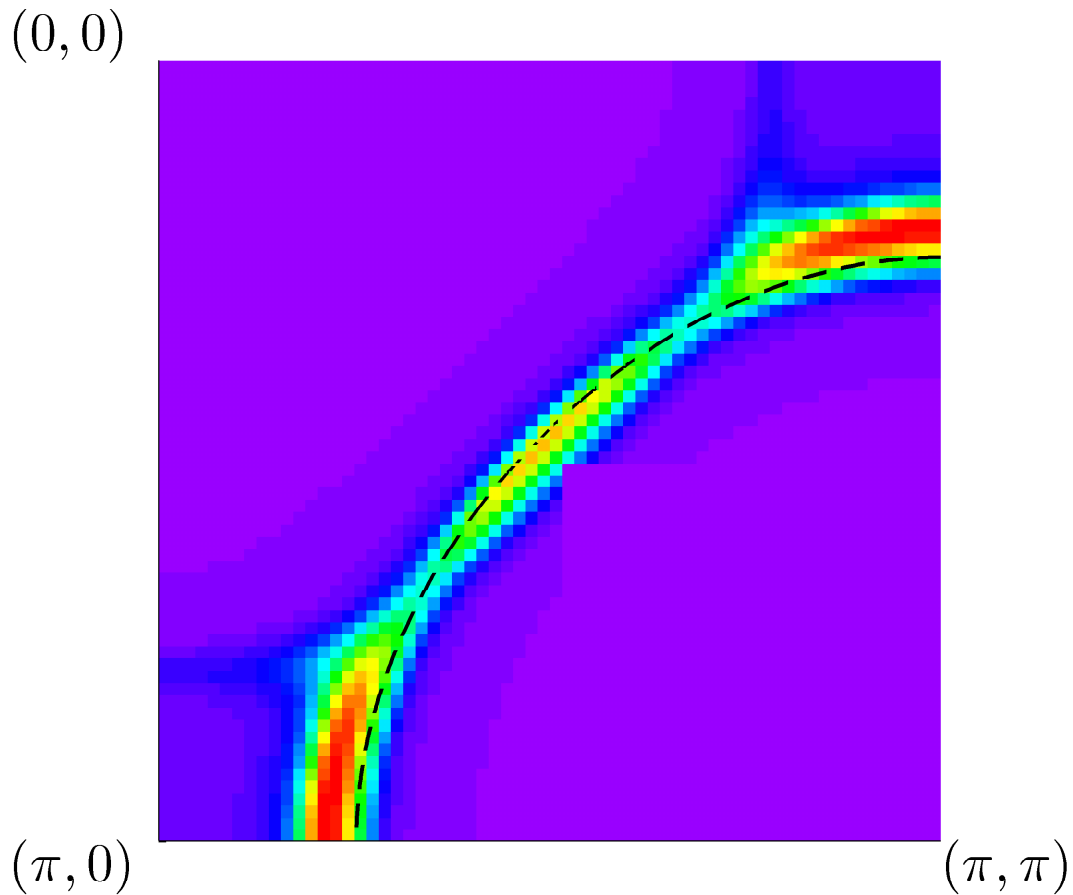


FIGURE 8.1 – La ligne pointillée noire présente le niveau de Fermi sans interaction pour  $n = 1.15$  avec  $t' = -0.175t$  et  $t'' = 0.05t$ . La courbe de densité est le poids spectral ACDP pour  $T = 0.05t$  à  $U = 5.75t$ . Le niveau de Fermi sans interaction est systématiquement à côté des zones de forte densité avec interaction.



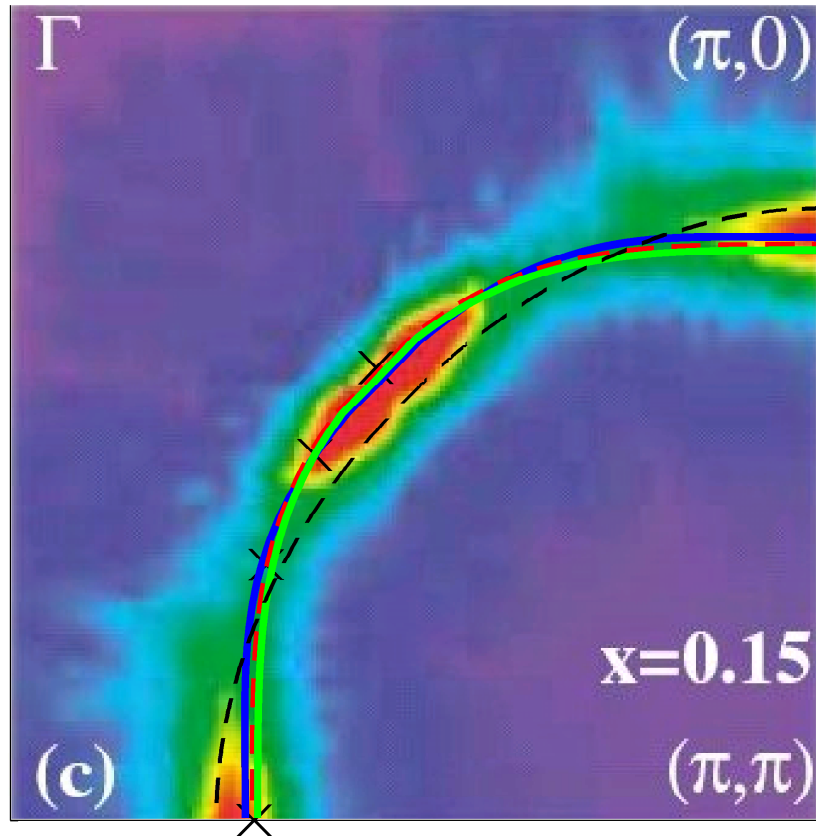


FIGURE 8.2 – À  $n = 1.15$ , MDC expérimentale pour le NCCO [13]. La courbe pointillée noire est celle pour le niveau de Fermi sans interaction avec  $t' = -0.175t$  et  $t'' = 0.05t$ . La courbe verte montre le niveau de Fermi à  $U = 0$  pour les résultats LDA lissés sur un modèle tight-binding à une bande [74]. La courbe rouge est le niveau de Fermi sans interaction pour le lissage fait sur les croix noires. On remarque l'erreur systématique qui va dans la mauvaise direction pour la courbe pointillée noire. La courbe bleue montre un choix de valeurs d'intégrales de sauts à priori raisonnable soit  $t' = -0.125t$ ,  $t'' = 0.122t$  et  $t''' = 0.077t$ .

Tout d'abord, on recherche le meilleur choix d'intégrales de saut en comparant les résultats de poids spectral avec les spectres de spectroscopie par photoémission résolue en angle (*angle resolved photoemission spectroscopy* ARPES) [10–13]. Lorsqu'on compare le niveau de Fermi sans interaction avec la MDC avec interaction, on remarque que qualitativement la surface de Fermi avec interaction tombe systématiquement à côté de la surface de Fermi sans interaction (voir figure 8.1 à 8.3). Cela implique que si on choisit des paramètres qui, comme les résultats de lissage LDA [74], génère une surface de Fermi qui coïncide avec le niveau de Fermi expérimental, lorsqu'on ajoutera les interactions dans le système, les MDC théoriques résultantes seront systématiquement erronées. En s'inspirant de la modification apportée par les interactions sur le niveau de Fermi à  $U = 0$ , comme le montre la figure 8.1, il est possible de deviner les valeurs que pourraient prendre les intégrales de saut pour obtenir le meilleur accord quantitatif possible avec les résultats de poids spectraux obtenues avec l'ARPES.

La figure 8.1 montre que les régions rouges dans la courbe se trouvent entre la frontière de la zone de Brillouin magnétique et le niveau de Fermi sans interaction à ce dopage. Autrement dit, la tache centrale se trouve au-dessus du niveau de Fermi sans interaction et celles aux extrémités en dessous. Ainsi, il est possible de tracer plusieurs courbes différentes pour le niveau de Fermi sans interaction qui concordent qualitativement avec le spectre expérimental, de façon analogue à ce que montre le calcul théorique, comme le suggère la figure 8.2. Afin de discriminer parmi ces choix possibles, la stratégie suivante sera employée. D'abord, physiquement, les points chauds théoriques sont ceux qui correspondent aux points où le niveau de Fermi sans interaction croise la frontière de la zone de Brillouin magnétique. Ensuite, les régions où le poids spectral est maximal sur les spectres théoriques devront correspondre aux résultats expérimentaux. Selon la manière dont les courbes sans interaction s'insèrent sur les courbes avec interaction, les points suivants seront choisis : un point sur la tache centrale à l'extérieur, un point sur la tache adjacente à la frontière, un point sur le point chaud et un autre point à l'extrémité de la tache centrale (Ces points sont les croix noires de la figure 8.2).

Une fois ces points déterminés, un lissage avec le niveau de Fermi sans interaction est effectué sur ces quatre points en utilisant :

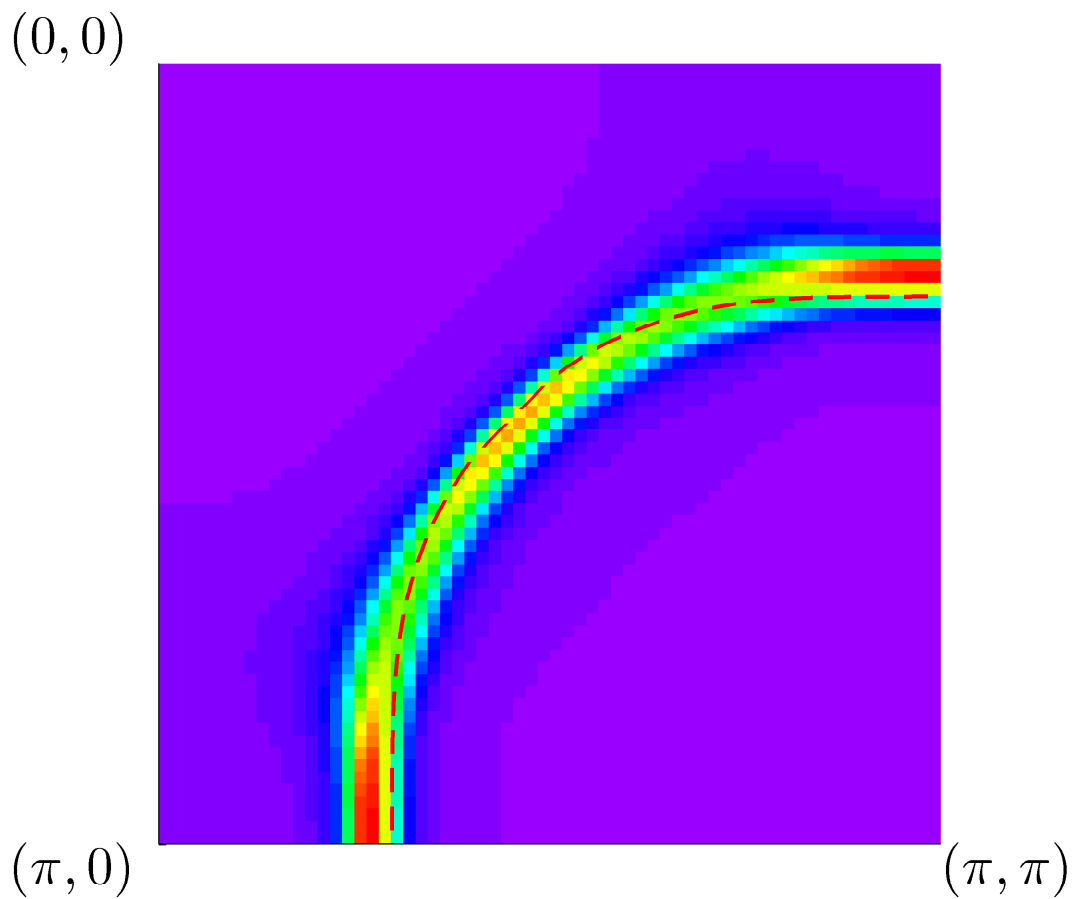


FIGURE 8.3 – La ligne rouge présente le niveau de Fermi sans interaction pour  $n = 1.15$  avec  $t' = -0.21t$ ,  $t'' = 0.16t$  et  $t''' = 0.02t$ . La courbe de densité est le poids spectral ACDP pour  $T = 0.05t$  à  $U = 5.4t$ .

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) \quad (8.1)$$

$$-2t''(\cos(2k_x) + \cos(2k_y)) \quad (8.2)$$

$$-4t'''(\cos(2k_x) \cos(k_y) + \cos(k_x) \cos(2k_y)) - 4t'''' \cos(2k_x) \cos(2k_y) \quad (8.3)$$

Le potentiel chimique à  $n = 1.15$  correspond à environ  $\mu \approx 0$ . En inversant l'équation ci-haut, il est possible de faire un lissage de la courbe de manière à la faire passer par les quatre points mentionnés plus tôt. En effectuant ce lissage, on obtient  $t' = -0.21t$ ,  $t'' = 0.16t$ ,  $t''' = 0.02t$  et  $t'''' = 1 \times 10^{-30}t$ . Ces paramètres sont très semblables à ceux du lissage LDA. À la figure 8.2 on compare le résultat de ces lissages avec les résultats expérimentaux et la figure 8.3 montre le résultat théorique ACDP. Le potentiel chimique calculé pour  $n = 1.15$  avec ces paramètres est de  $\mu_0 = 0.0795t$ . Pour tracer la figure théorique 8.3, il fut nécessaire de trouver la valeur de  $U$  qui permet d'obtenir le meilleur lissage. De cette façon, tous les paramètres sont fixés.

Il faut remarquer une chose lorsqu'on compare les résultats ACDP de MDC aux mesures expérimentales. D'abord, les mesures ont été effectuées à de plutôt basses températures, soit des températures de l'ordre de 20 à 40 Kelvin. Tant que la valeur de  $t$  en eV n'est pas fixée, il n'est pas évident que la température choisie pour le calcul théorique correspond à la valeur de température de la mesure expérimentale. Puisque qu'il fut établi par des travaux précédents que l'ouverture du pseudogap dans le poids spectral se produit dans le régime classique renormalisé ( $T \sim T_x$ ), il est fort possible que les mesures aient été prises bien en dessous de  $T_x$ . Ce point délicat sera révisé un peu plus tard.

## 8.2 Longueur de corrélation et diagramme de phase

Maintenant que les valeurs des intégrales de saut et la valeur de  $U/t$  ont été déterminées par comparaison entre les MDC expérimentales et les théoriques, le seul paramètre ajustable restant est la valeur de  $t$  en eV. Afin de fixer cette valeur, une comparaison des calculs de longueurs de corrélation sera effectuée avec des résultats expérimentaux [3]. On reporte le diagramme de phase expérimental tiré de cet article à la figure 8.4.

Avec les intégrales de sauts déterminées dans la section précédente, il n'est pas possible de lisser les longueurs de corrélation expérimentales. En fait, les longueurs de corrélations respectent bien le critère  $\xi_{sp} > \xi_{th}$  mais  $\xi_{sp} \sim 10a$  pour  $T \sim T_x$ , c'est-à-dire suffisamment

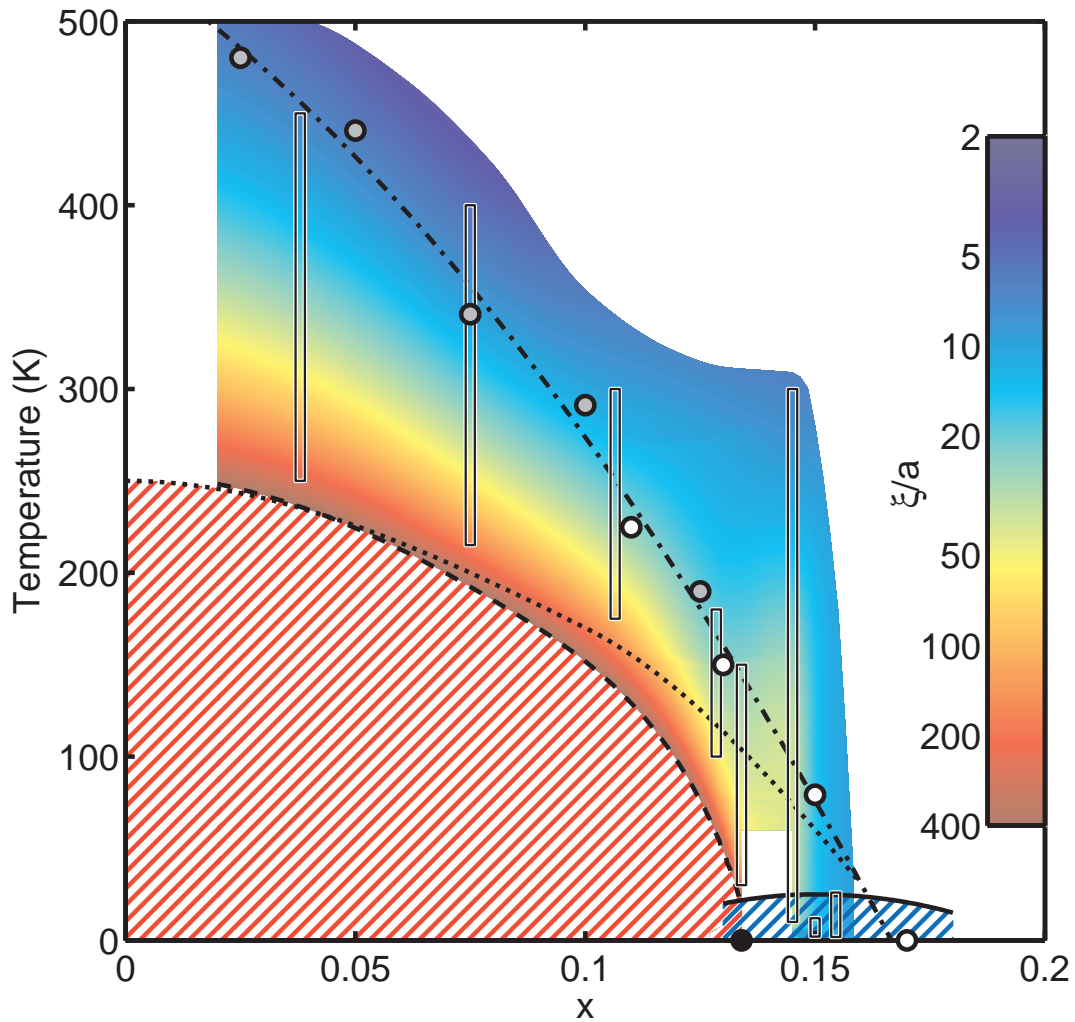


FIGURE 8.4 – Diagramme de phase pour le NCCO/PCCO tiré de la référence [3]. La zone hachurée en rouge correspond à l'état ordonné antiferromagnétique. La zone hachurée en bleu est la région supraconductrice. La ligne pointillée ( $\cdot \cdot \cdot$ ) correspond à la température de néel extrapolée (voir [3]). Il se trouve que que température correspond à celle trouvée par les mesures de transports [88–91]. Finalement, la ligne en tirets ( $- -$ ) correspond à la température de pseudogap tel que, expérimentalement,  $\xi_{sp} > \xi_{th}$  et donc correspond à ce qu'on nomme  $T_x$  dans cette thèse.

grandes pour faire apparaître le pseudogap dans le poids spectral, mais pas suffisamment pour concorder avec les résultats de diffraction de neutrons. Si on utilise plutôt les paramètres de l'article [1], soit  $t' = -0.175t$ ,  $t'' = 0.05t$  et  $U \sim 6t$ , il est possible d'effectuer le lissage en choisissant  $t \sim 230$  meV plutôt que  $t \sim 350$  meV. Pour la suite de ce chapitre, ces derniers paramètres seront utilisés.

À la figure 8.5 et 8.6 se trouvent les courbes de  $\xi_{sp}(T)$  obtenues avec l'approche ACDP comparées aux résultats expérimentaux [3]. Il faut d'abord préciser que le désaccord à basse température s'explique par le fait que ces données (théoriques) se trouvent loin sous  $T_x$ , là où la validité de l'approche ACDP peut être remise en cause. En fait, la longueur de corrélation doit adopter le comportement exponentiel conformément à l'équation (3.7), valide dans le régime classique renormalisé. Il serait alors possible d'extrapoler les données sous  $T_x$ , ce qui donnerait un meilleur accord quantitatif sous cette température. Pour  $T \sim T_x$ , l'accord quantitatif est impressionnant, compte tenu du fait qu'un seul paramètre ajustable est utilisé. Ce paramètre est fixé pour toutes les courbes, ce qui fait que seul le changement de dopage modifie les résultats. Le paramètre ajustable est la valeur d'énergie en eV attribué à  $t$  qui est de 230 meV.

Une caractéristique importante qui émane du choix des paramètres  $t' = -0.175t$ ,  $t'' = 0.05t$  et  $t''' = 0$  est que pour le dopage aux électrons, partout où la longueur de corrélation respecte le critère  $\xi_{sp} > \xi_{th}$ , la susceptibilité est commensurable. Le dopage à  $T = 0.01t$  qui marque la frontière commensurable-incommensurable est 0.2 donc un remplissage de  $n = 1.2$ . Cette valeur est indépendante de  $U$  comme il fut démontré dans les chapitres 3 et 6. À  $U = 8t$ , le dopage qui marque la fin du régime magnétique (la position du point critique) se situe à la frontière commensurable-incommensurable. Ainsi pour les valeurs de  $U$  pertinentes dans les comparaisons, le point critique est toujours commensurable.

Si on trace le diagramme de phase  $(T_x, n_x)$  pour divers  $U$ , on trouve que pour des valeurs de  $U$  inférieures à  $U \leq 6t$ ,  $\xi_{sp} < \xi_{th} \forall T, n$  calculées (voir figure 8.7). Ces diagrammes sont obtenus à la manière de ceux du chapitre 6. C'est-à-dire qu'on compare  $\xi_{th}$  à  $\xi_{sp}$ , où  $\xi_{sp}$  est obtenue par la définition de la longueur pondérée conforme à l'équation (3.9). Par contre, les températures les plus faibles considérées ici ont été  $T \geq 0.01t$ . En Kelvin, cela correspond à une température d'environ 27 Kelvin. Il est possible d'obtenir le point critique sans avoir détecté la température de passage vers le régime classique renormalisé parce que  $n_c$  est déterminé à partir des résultats de mise à l'échelle à température finie pour la susceptibilité de spin. On note qu'on trouve un point critique pour  $U \geq 4t$ . La

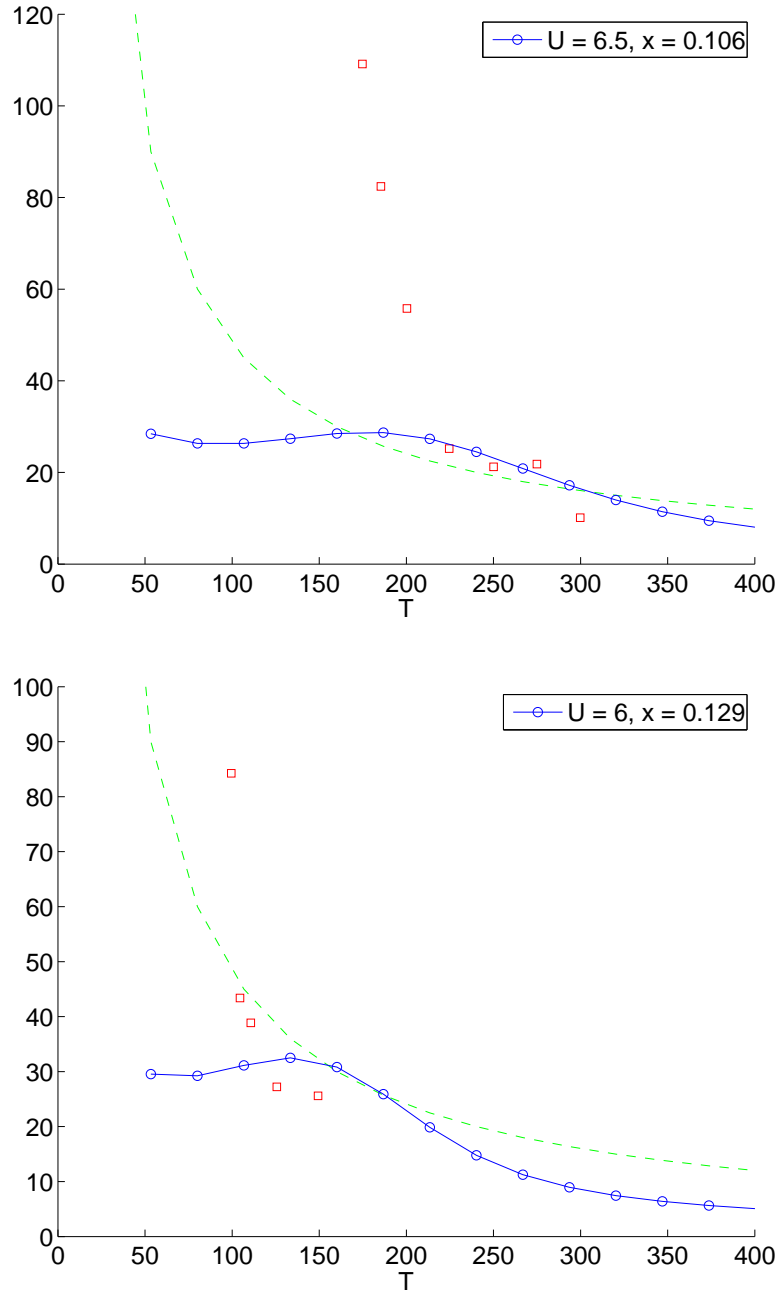


FIGURE 8.5 – Comparaison des résultats théoriques avec les résultats expérimentaux de la référence [3] pour la longueur de corrélation en fonction de  $T$  pour divers dopages ( $x$ ). Les valeurs de  $U$  furent ajustées de manière à obtenir le meilleur accord. La courbe verte est la longueur d'onde thermique.

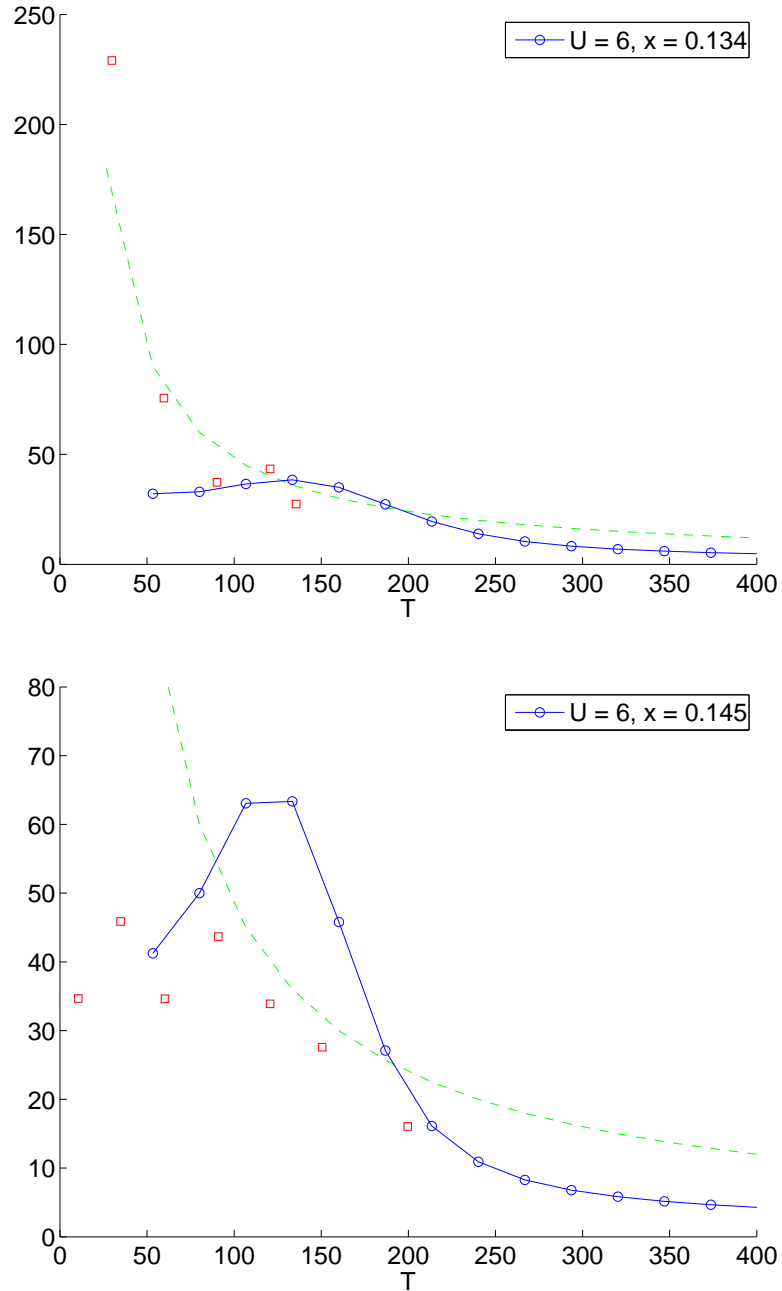


FIGURE 8.6 – Comparaison des résultats théoriques avec les résultats expérimentaux de la référence [3] pour la longueur de corrélation en fonction de  $T$  pour divers dopages ( $x$ ). Les valeurs de  $U$  furent ajustées de manière à obtenir le meilleur accord. La courbe verte est la longueur d’onde thermique.



valeur du point critique pour  $U = 4t$  est de  $n_c = 1.159$ .

Sur la figure 8.7, on trouve aussi les résultats pour certaines valeurs de  $t'$  différentes de  $t' = -0.175t$  afin de développer une intuition sur l'effet de ce paramètres dans le contexte d'une comparaison avec le NCCO. Un changement de  $U$ , avec les intégrales de saut fixes, change la position du point critique et les températures de passage. Un changement de  $t'$  a le même effet (réduire  $t'$  donne qualitativement le même effet qu'augmenter  $U$ ) mais cela change aussi la frontière commensurable-incommensurable.

Si on compare nos résultats à des études de conductivité optique [73], on trouve pour  $U = 6t$  un excellent accord avec la température de pseudogap  $T^*$ . Par contre, leurs données s'arrêtent à un dopage d'environ 13%. Les données pour le  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$  sont disponibles pour une plage de dopage allant de 11 à 17% [87] et les données semblent montrer un accord quantitatif avec celles de NCCO comme le montre la figure 1 de l'article [3] de Motoyama et al. ainsi qu'avec les résultats de la figure 8.7.

L'étude de diffraction de neutrons [3] illustre une relation intéressante entre la longueur de corrélation de spin à la température de passage :

$$\frac{\xi^*}{a} = \frac{C}{x_c - x}, \quad (8.4)$$

où  $x$  représente le dopage,  $x_c = 0.171$  et  $C = 0.96$ . Selon leurs résultats, l'évolution de  $\xi^*$  n'est pas monotone et elle présente un maximum à  $x = 0.145$ . Les valeurs expérimentales de  $T_x$  sont obtenues pour  $\xi_{AF} > 2.6\xi_{th}$ , où le facteur 2.6 est introduit pour obtenir les mêmes résultats que pour la conductivité optique. Pour les valeurs théoriques de  $T_x$ , on prend la valeur de  $2.2 \times 10^7 \text{ cm/s}$  expérimentale [3] qu'on compare à  $\sqrt{\chi_{sp}^M/\chi_0^M}$ . La valeur de  $\xi_{sp}$  mesurée à  $x = 0.15$  est de  $15a$  ce qui correspond exactement à la valeur trouvée avec l'approche ACDP pour  $t' = -0.175t$ ,  $t'' = 0.05$  et  $U = 6t$ . Les comparaisons se trouvent au graphique 8.8. Sur cette figure, la valeur de  $C$  est la même pour les deux courbes. L'accord quantitatif dans la détermination de  $C$  pour les données théoriques avec le choix fait par [3] est cependant fortuit, car même si les formes fonctionnelles sont les mêmes, les valeurs de  $x_c$  est différente dans les deux résultats.

Il ne faut pas oublier que les résultats expérimentaux ont nécessité, pour certains dopages, des extrapolations des données de longueur de corrélation vers des températures plus élevées. Cela implique certainement une plage d'erreur relativement grande compte tenu que le nombre de données disponibles pour le lissage est plutôt restreint, compte tenu aussi des incertitudes expérimentales et compte tenu du choix de la fonction pour

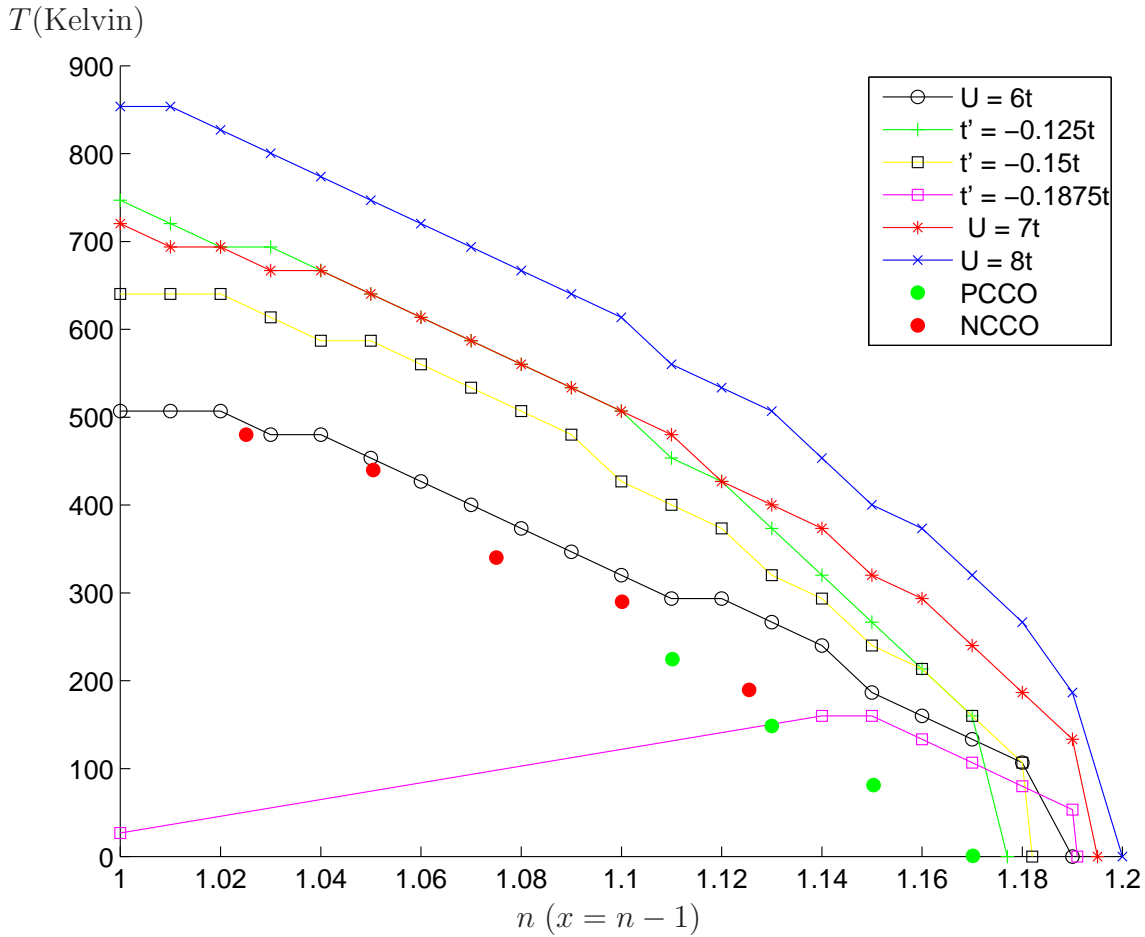


FIGURE 8.7 – Diagramme de passage vers le régime classique renormalisé pour  $t' = -0.175t$  et  $t'' = 0.05t$  pour quelques valeurs de  $U$  en fonction de  $n$  et  $T$ . Les courbes pour  $t' = -0.125t$ ,  $-0.15t$  et  $-0.1875t$  furent calculées à  $U = 6t$ . La valeur de  $t$  en Kelvin est de 2667 K ce qui correspond à une valeur de  $t \sim 230$  meV.

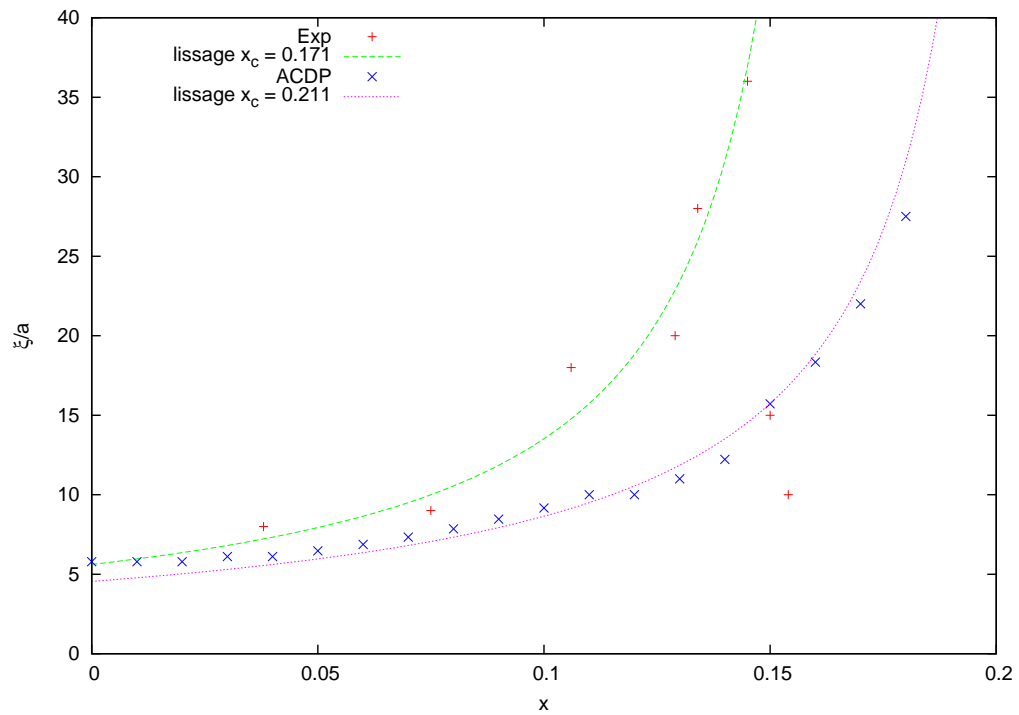


FIGURE 8.8 – Comparaison des résultats théoriques avec les résultats expérimentaux de la référence [3] pour la longueur de corrélation à  $T_x$  en fonction du dopage. Le second lissage est effectué en utilisant la même forme que l'équation 8.4 mais en utilisant  $x_c = 0.211$ .

$t' \backslash U$	5	5.5	6	7	8
$-0.175t$	1.165	1.17	1.19	1.195	1.2

TABLEAU 8.1 – Tableau des valeurs de points critiques pour les paramètres du graphique 8.7 en fonction de  $U$ .

$U \backslash t'$	$-0.225t$	$-0.1875t$	$-0.175t$	$-0.15t$	$-0.125t$
$U = 6t$	1.195	1.191	1.19	1.182	1.177

TABLEAU 8.2 – Tableau des valeurs de points critiques pour les paramètres du graphique 8.7 en fonction de  $t'$ .

l'extrapolation qui est délicat. On note que l'extrapolation fut effectuée avec une variation  $\xi_{AF} \propto \frac{1}{T}$  alors que la théorie ACDP suggère plutôt  $\xi_{sp} \propto e^{C/T}$  dans le régime classique renormalisé.

### 8.3 Point critique quantique

En appliquant les règles de mise à l'échelle énoncées dans le chapitre précédent, il est possible de déterminer la position des points critiques pour les courbes tracées à la figure 8.7. Il est aussi possible d'extraire les points critiques pour des  $U$  plus faibles. Les valeurs sont reportées aux tableaux 8.1 et 8.2.

Bien que les valeurs de dopages critiques ne varient pas énormément lorsqu'on change  $t'$  et  $U$ , elles varient suffisamment par rapport à la résolution expérimentale. La valeur établie de  $U$  pour un dopage de 15% est de  $5.75t$  dans le contexte de ACDP pour le choix de  $t' = -0.175$ . On établit une limite inférieure à la valeur que  $U$  peut prendre pour des dopage plus élevés, à supposer qu'elle soit égale ou inférieure à  $5.75t$ . À  $U < 4t$ , on ne trouve pas de point critique. Donc la valeur minimale de  $U$  pour les dopage plus élevés se situe entre  $4t$  et  $5.75t$ . À  $U = 4t$ , le point critique se trouve à 15.9% et à  $U = 5.75t$  à 19%. Ainsi, il est possible de prédire que le point critique pour le NCCO se situe entre ces deux valeurs de dopage. Puisque ce point critique se situe très près de la limite de dissolution du matériaux, on s'attend à n'être qu'en présence du régime critique dans l'état normal, c'est-à-dire partout dans le diagramme de phase au-dessus de la température de pseudogap.

Le point critique expérimental de 13.4% n'est pas de même nature que le point critique

extrapolé dans cette section. Le point critique ACDP correspond à la valeur de dopage où  $T_x = 0$ . Ce sont les valeurs du tableau 8.1 et du tableau 8.2. Expérimentalement, cela correspond, pour le PCCO à un dopage de 17% [87]. Des mesures de propriétés de transport suggèrent qu'il serait situé à un dopage en Cérium de 16.5% [88–91] pour le PCCO. La valeur de 13.4% trouvée par Motoyama et al. est certainement influencée par la compétition entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité de type  $d$ , qui n'est pas prise en compte dans l'approche ACDP.

## 8.4 Chaleur spécifique et potentiel chimique

Tel que mentionné plus tôt, le régime antiferromagnétique pour ces matériaux selon les calculs théoriques est situé loin de la frontière incommensurable. Par conséquent, on ne s'attend pas à observer l'anomalie de potentiel chimique à la séparation de phase. Les calculs confirment cette hypothèse. Il est possible que l'anomalie apparaisse à une très basse température, mais la gamme de paramètres où cet effet semble se produire est trop restrictive en terme de précision de calcul pour obtenir des résultats confirmant ou infirmant cette hypothèse. Mais l'analyse de l'évolution de cette anomalie faite dans le chapitre 6 indique qu'il n'y en aura pas puisque le point critique est commensurable.

Par contre, la présence d'une chute de double occupation et son pic de chaleur spécifique résultant semblent bien être présents et toute la discussion précédente à ce sujet demeure pertinente ici. Bien que l'évolution de la position en température du pic de chaleur spécifique à basse température suit la température de passage, conformément à ce qui fut traité dans le chapitre 6, il semble que le pic soit plus évasé à  $n = 1$  et plus pointu aux forts dopages. Autrement dit, l'amplitude du pic à basse température pour la chaleur spécifique est plus élevée près du dopage critique  $n_c$  qu'au demi-remplissage comme le montre la figure 8.9.

Étant donnée la présence de moment magnétique associés aux atomes de Néodyme, la chaleur spécifique électronique n'est pas facile à mesurer. Il n'est donc pas question de comparer les résultats théoriques de chaleur spécifique aux résultats expérimentaux. Par contre, il est utile de présenter que la discussion du chapitre 6 est toujours pertinente avec le choix de paramètres du NCCO.

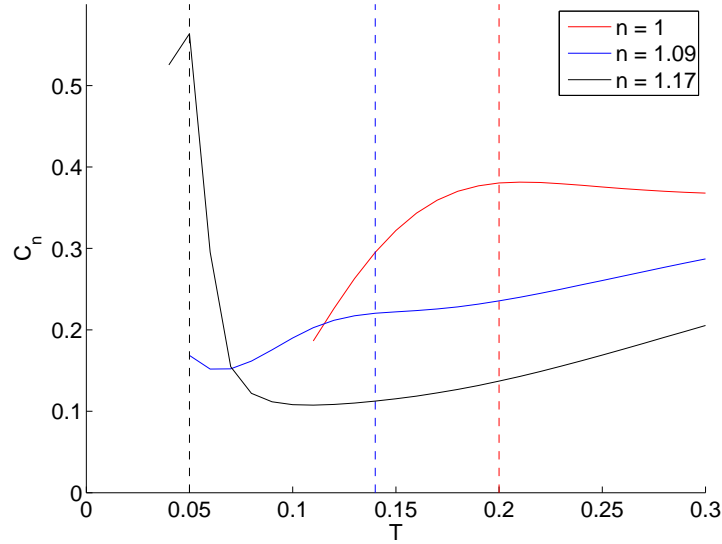


FIGURE 8.9 – Chaleur spécifique totale  $C_n$  pour  $U = 6t$ ,  $t' = -0.175t$ ,  $t'' = 0.05t$  en fonction de la température pour  $n = 1$ ,  $n = 1.09$  et  $n = 1.17$ . L'amplitude du pic ne varie pas de façon monotone contrairement aux cas plus simples étudiés dans le chapitre 6. Cette évolution semble correspondre à l'évolution du plateau pour  $\chi_0$ .

## 8.5 Discussion

Les principales comparaisons avec l'expérience impliquent la comparaison des températures de passage vers le régime classique renormalisé  $T_x$  avec les températures de pseudogap enregistrées avec les mesures de conductivités optiques [73, 87]. Dans ce cas, un accord quantitatif appréciable est observé lorsque les paramètres utilisés sont  $t' = -0.175t$ ,  $t'' = 0.05t$ , avec  $t = 230$  meV. De plus, une comparaison directe de la mesure de la longueur de corrélation par diffraction inélastique de neutron [3] avec les résultats expérimentaux montre un excellent accord.

Dans le contexte de l'approche ACDP, on trouve une position du point critique située entre 16 et 19 % de dopage. Dans le contexte de l'approche ACDP toujours, au voisinage de ce point, le système possède les propriétés décrites dans le chapitre précédent. Il serait donc intéressant de vérifier expérimentalement la présence du comportement en  $\omega/T$  pour des températures supérieures à la température de pseudogap. Il sera intéressant également de vérifier la mise à l'échelle en  $\Delta n/T$ , ce qui confirmerait la position exacte du point critique. L'étendue du régime critique, selon les résultats du chapitre 7 suggère que ce matériau ne posséderait pas de propriétés de liquide de Fermi, ou du moins une zone liquide de Fermi très restreinte, puisque le point critique serait situé très près de la

limite de dissolution du matériau. Si le point critique se situe à 16% de dopage, il serait possible d'observer le liquide de Fermi pour  $x > 0.16$  pour une température basse.

Ces accords quantitatifs surviennent lorsqu'on utilise les paramètres  $t' = -0.175t$  et  $t'' = 0.05t$ . Or dans la première section de ce chapitre, il fut illustré en quoi ces paramètres laissent à désirer pour les résultats des poids spectraux. Plusieurs hypothèses peuvent être énoncées alors.

La première consiste à supposer que les arguments ACDP soient vrais et à analyser les données expérimentales en ce sens. C'est un peu ce qui est effectué dans l'article de référence [3]. Les auteurs concluent que  $\xi_{AF} > \xi_{th}$  à  $T = T_x$ , où  $T_x$  est mesuré par conductivité optique. Pour obtenir ces résultats, il doivent renormaliser  $\xi_{th}$  par un facteur 2.6. Cela implique que pour  $x \sim 0.15$ ,  $T_x \sim 80$  K. Et donc les mesures d'ARPES ont été prises à des températures trop basses en ce qui concerne le domaine de validité de l'approche ACDP. Il ne faut donc pas se concentrer sur un lissage quantitatif exact pour les mesures d'ARPES mais plutôt sur un lissage des longueurs de corrélations. Par contre, seules les mesures d'ARPES peuvent donner des indices sur le choix des intégrales de sauts. Il existe donc un certain jeu à ce niveau et, par conséquent, il ne sera pas possible d'obtenir un accord quantitatif plus grand avec l'expérience à moins d'avoir accès à des mesures d'ARPES pour des températures plus élevées.

La seconde hypothèse consiste à vérifier si des effets de couplage fort ne devraient pas intervenir, ce qui suggérerait que l'approche ACDP n'est pas appropriée pour un lissage quantitatif meilleur que celui déjà obtenu. Il est plutôt particulier de constater la présence des points chauds pour  $t' = -0.21t$ ,  $t'' = 0.16t$  et  $t''' = 0.02t$  alors que la longueur de corrélation demeure relativement petite ( $\sim 10a$ ). Il faut aussi mentionner que pour ces paramètres, le point critique se situe à un dopage d'environ 30%, tout comme la frontière commensurable-incommensurable <sup>2</sup>. La forme de la susceptibilité est plutôt particulière dans cette région, ce qui cause une évolution des températures de passage de la figure 6.7 du chapitre 6 qui diffère qualitativement de celle pour des valeurs de  $t'$  plus petites en amplitude, ainsi que pour les paramètres en question dans cette section.

Dans ce contexte, que faut-il penser des résultats ACDP ? Les valeurs de  $U_{sp}$  obtenues avec la règle de somme font en sorte que, pour les paramètres de saut choisis, jamais la susceptibilité ne prend une forme lorentzienne à fréquence de Matsubara nulle puisque les

---

<sup>2</sup>En fait, il existe une région incommensurable à basse température entre le demi remplissage et un remplissage qu'environ 1.1. Puisque cette région est située loin sous  $T_x$ , on ne la considère pas dans la discussion.

longueurs de corrélation, bien que plus grandes que  $\xi_{th}$  demeurent relativement faibles. Ce qui cause cela est le même effet que celui discuté à propos de l'équation (6.9) dans la section 6.3 du chapitre 6. Est-ce un signe de la limite fort couplage qui apparaît ? Il est aussi possible de remettre en cause le choix de l'ansatz  $U\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = U_{sp}\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$ . Malheureusement, le MCQ est inaccessible dans cette région du diagramme de phase étant donné le problème de signe, ce qui ne permet pas de trancher.

Une autre hypothèse remettrait en question la justesse du choix du modèle. Est-ce qu'un modèle à une bande peut permettre autre chose qu'un simple accord qualitatif ? Est-ce que l'effet du dopage sur un modèle simplifié à une bande rend bien compte de l'effet du dopage en Cérium ? Il ne faut pas oublier que l'idée d'utiliser un modèle à une bande comme approximation suggère que l'essentiel de la physique y est contenu. Dans ce contexte, il ne serait potentiellement pas possible d'obtenir un meilleur accord quantitatif que celui déjà obtenu, et ce même avec une théorie exacte. Il n'est pas évident que les paramètres  $t - U$  permettent, à  $t - U$  fixe, de bien reproduire la structure de bande du matériau en fonction du dopage. Il est même clair qu'à demi-rempli il faut des valeurs de  $U$  plus grandes que celles proposées ici puisqu'on a affaire à un isolant de Mott. Il est possible, en laissant ces paramètres comme ajustables, que pour chaque dopage on obtienne un accord quantitatif appréciable, mais utiliser ces paramètres comme des paramètres de lissage ne permet pas d'effectuer une discrimination satisfaisante sur la justesse d'une théorie plutôt qu'une autre. Par contre, le modèle de Hubbard étant un modèle effectif, on s'attend à ce que les paramètres du modèle varient au moins légèrement avec le dopage.

Compte tenu de cela, si le modèle de Hubbard à une bande ne constitue qu'une grossière caricature de la réalité expérimentale, il ne sera pas possible d'obtenir des comparaisons quantitatives plus précises que ce qu'on trouve ici.

Dans ce contexte, quel critère utilise-t-on pour répondre aux questions suivantes ? La première étant : est-ce que le modèle de Hubbard à une bande contient l'essentiel de la physique de ces matériaux. Pour la seconde, on demande quelle méthode résout le modèle le plus précisément possible ? Pour cette dernière, les comparaisons avec les méthodes exactes, tel que le Monte Carlo Quantique, permettent de faire le tri du côté purement théorique. Autrement dit, établir un intervalle de confiance quant à la résolution du modèle en soit. À cet effet, l'approche autocohérente à deux particules ne cesse d'accumuler les succès. Afin de répondre à la première, il faut considérer l'ensemble des résultats. Avec l'approche ACDP, il est possible de reproduire l'évolution de la température de pseu-



dogap mesurée par conductivité optique. Pour ce faire, les paramètres ajustables sont la valeur de  $t$  en meV et la valeur de  $U/t$ . En gardant  $U$  fixe, pour les dopages où  $T_x$  est petit et  $T_N$  absent ( $0.129 < x < 0.15$  environ), la longueur de corrélation calculée montre un excellent accord quantitatif avec l'expérience, et ce à  $U$  fixe. Bien que l'accord quantitatif avec les résultats d'ARPES ne soit pas parfait, il est qualitativement acceptable pour deux dopages (10 et 15%). Sachant que les mesures expérimentales ont fort probablement été effectuées à des températures inférieures à  $T_x$ , ce désaccord quantitatif n'est pas inquiétant.

Ces comparaisons permettent alors de conclure qu'effectivement le modèle de Hubbard à une bande est pertinent et que l'approche ACDP permet de mettre ce fait en évidence par l'intermédiaire de comparaisons semi-quantitatives avec l'expérience.

## 8.6 Sommaire de chapitre

- Les paramètres de bande pour le lissage des données expérimentales du NCCO peuvent être améliorés. Il semblerait que les résultats du lissage de la bande *tight-binding* sur les résultats LDA donnent de bons résultats lorsqu'on ne fait qu'ajouter  $U$  et effectuer le calcul avec interactions.
- Il est possible d'obtenir un accord quantitatif raisonnable pour les résultats de longueur de corrélation avec comme seul paramètre ajustable la valeur en eV attribué à l'intégrale de saut  $t$ .
- La température de passage peut être reliée à la température de pseudogap avec un accord quantitatif raisonnable.
- Le point critique quantique entre la phase d'onde de densité de spin (antiferromagnétiques) et la phase de liquide de Fermi se situe quelque part entre  $\sim 16.5\%$  et  $19\%$  de dopage.
- Les résultats pour les paramètres de ce chapitre suggère qu'il n'y a pas de saut de potentiel chimique pour ces matériaux et que l'état normal (pour des température supérieures à la température de pseudogap) du système pour la majeure partie diagramme de phase est celui du régime critique. Seule une petite région, pour  $\delta > \delta_c$  et  $T < \delta - \delta_c$ , est un liquide de Fermi.

# Conclusion

Une étude détaillée de l'évolution de la surface de Fermi sans interaction et de la fonction de Lindhard permet, dans le contexte de l'approche ACDP, d'avoir une idée des résultats avec interaction qui seront obtenus suite aux calculs des interactions effectives. Par exemple, la présence et la position dans le diagramme  $T - n$  de la frontière commensurable-incommensurable peut être déterminée directement à  $U = 0$ . L'évolution de la température de passage au régime classique renormalisé  $T_x$  au voisinage de cette frontière résulte en une saturation de la longueur de corrélation en fonction de la température et affecte la forme de la zone où se trouve le régime classique renormalisé des fluctuations magnétiques.

L'effet du  $t'$  sur la nature des fluctuations varie aussi selon que le dopage est effectué avec des trous ou avec des électrons. Le dopage aux trous en présence d'un  $t'$  négatif repousse le dopage critique à des valeurs de dopage plus élevées pour le régime d'onde de densité de spin incommensurable et donc renforce les fluctuations magnétiques incommensurables. Par contre, cette intégrale de saut a pour effet de réduire les températures de passage associées au régime antiferromagnétique. Pour le dopage aux électrons, c'est le contraire.

Lorsque la température diminue, la longueur de corrélation de spin augmente et le système entre dans le régime classique renormalisé caractérisé par une phase magnétique ordonnée à température nulle. Dans tous les cas, la présence d'une température  $T_x$ , pour laquelle on montre l'ouverture du poids spectral [2], induit une chute de double occupation qui induit un pic de chaleur spécifique, caractéristique unique de la bidimensionnalité à faible couplage. Ce pic s'apparente à la singularité qu'on observe en trois dimensions à la température de Néel pour la chaleur spécifique. À une dimension à couplage faible, il n'y a pas de pic de chaleur spécifique.

La chute de double occupation induit une anomalie de potentiel chimique lorsque le système présente des fluctuations magnétiques incommensurables. Par contre, cette ano-

malie disparaît si la susceptibilité de spin avec interaction ne présente pas de plateau. Il s'agit donc d'une anomalie liée à un mélange d'ondes de densité de spin commensurables antiferromagnétiques et d'ondes de densité de spin incommensurables. La nature de l'approche ACDP ne permet pas d'affirmer avec certitude qu'il s'agit bel et bien d'une séparation de phase marquée par une transition de premier ordre. Mais puisque le maximum local de potentiel chimique se situe au-dessus de la température de passage, ce scénario semble probable.

Le point critique quantique est caractérisé par une fonction universelle pour la susceptibilité :

$$\chi_{sp} = q^{-2} X \left( \frac{T}{q^2}, \frac{\Delta n}{q^2}, 1 \right) \equiv q^{-2} f \left( \frac{T}{q^2}, \frac{\Delta n}{q^2} \right). \quad (8.5)$$

La courbe de  $T_x$  se termine à  $n_c$  lorsque  $T_x \rightarrow 0$ . En ce point,  $T_x$  se confond avec la température critique  $T_c$  et en ce point à température nulle et en fonction du dopage se trouve la transition de phase entre un métal paramagnétique et un état ordonné d'onde de densité de spin.

Un phénomène particulièrement intéressant apparaît lorsqu'on étudie les fonctions d'échelle au voisinage du point critique quantique d'origine magnétique. D'abord, la mise à l'échelle est vérifiée jusqu'à des températures de l'ordre de  $T \sim t$  qui correspondent grossièrement à des températures de l'ordre de 2500K. Ensuite, la dépendance en fréquence en  $\omega/T$  observée expérimentalement [85] est reproduite théoriquement, bien qu'elle n'ait pas été vérifiée ici explicitement sur les données numériques. S'ajoute une prédiction théorique d'une dépendance en  $\Delta n/T$  ou  $\Delta n = |n_c - n|$ . La mise à l'échelle en fonction du vecteur d'onde nécessite l'utilisation du vecteur caractéristique  $(\pi, \pi)$  comme référence, ce qui renforce l'hypothèse du mélange énoncée dans le précédent paragraphe. Afin d'obtenir une confirmation de cette hypothèse, il faudrait avoir recours à une théorie robuste sous  $T_x$ .

Antérieurement, la justesse de l'approximation ACDP fut établie par des comparaisons avec les résultats Monte Carlo Quantique, une méthode exacte. Le complément à cette étude quant à l'uniformité thermodynamique fut présenté à la figure 5.1. Il ne fait plus aucun doute que pour  $T \geq T_x$  l'approche ACDP est d'une fiabilité exceptionnelle. Des études avec cette approche [1] dont celle-ci permettent de faire des comparaisons quantitatives raisonnables avec des résultats expérimentaux.

Une comparaison directe avec l'expérience au niveau de la température de pseudo-

gap extraite de la conductivité optique et au niveau de l'évaluation de la longueur de corrélation extraite par la diffraction de neutrons montrent d'autres succès de l'approche ACDP quant à la comparaison quantitative de données expérimentales avec le calcul. Un certain raffinement au niveau du choix des paramètres  $t - t' - t'' - U$  pourrait sans doute conduire à un meilleur accord. Bien qu'il soit possible que le modèle de Hubbard à une bande soit trop caricatural pour conduire à un accord quantitatif parfait avec l'expérience, il est tout de même possible d'avoir un accord quantitatif raisonnable même sans paramètre qui varie avec le dopage et d'extraire de l'information physique pertinente sur la physique de ce système qu'est le NCCO.

Le résultat le plus remarquable concerne les résultats de mise à l'échelle. Ces derniers montrent que la loi d'échelle persiste jusqu'à des températures de l'ordre de  $T \sim t$  près du point critique quantique, indépendamment des paramètres microscopiques. Cela constitue un résultat original important. En utilisant les échelles d'énergie trouvées dans le dernier chapitre pour le NCCO, c'est-à-dire  $t \sim 230$  meV, cela correspond à une température de  $\sim 2700$ K, ce qui est considérablement élevé.

Une suite intéressante à ce projet inclurait plusieurs éléments. D'abord, une vérification de la prédiction théorique sur la dépendance en  $\Delta n/T$  au voisinage du point critique constituerait une autre confirmation de la justesse de l'application de la théorie auto-cohérente à deux particules sur les matériaux tel que le NCCO. Des calculs numériques sur la dépendance en  $\omega/T$  pourraient aussi sans doute permettre une comparaison avec l'expérience. Ensuite, un calcul de la susceptibilité de paire de type  $d$  au voisinage des points critiques pourrait être intéressant. Particulièrement dans le cas des paramètres du NCCO puisque les précédents calculs ont été effectués à  $t' = 0$  [92](REF jslandry). Il sera donc intéressant de voir l'effet des sauts aux seconds et troisièmes voisins sur la susceptibilité de paire pour une gamme de paramètres telles que celles utilisées dans le chapitre 8. Finalement, une exploration plus détaillée des propriétés du régime critique, entre autres son influence sur les propriétés de transport, pourrait s'avérer fructueuse. Si un accord quantitatif raisonnable est obtenu pour ces quantités avec des valeurs de paramètres relativement semblables à ceux utilisés dans le chapitre 8, cela consolidera davantage l'idée que le modèle de Hubbard à une bande et l'approximation ACDP constitue une piste de solution judicieuse quant à la physique des supraconducteurs de la classe des cuprates dopés aux électrons.

# Annexe A

## Calculs thermodynamiques pour une self-énergie quelconque

Dans cette annexe, on traite de la dérivation générale de fonctions thermodynamiques avec une self-énergie quelconque. Les facteurs de convergence seront implicitement inclus dans les expressions des fonctions de Green :

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \equiv \frac{e^{ik_n 0^+}}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)} \quad (\text{A.1})$$

### A.1 Potentiel chimique

Afin de calculer le potentiel chimique, il existe plus d'une approche. Soit  $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)$  la self exacte pour le modèle de Hubbard en fonction des fréquences de Matsubara et  $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)$  la fonction de Green correspondante. Cette dernière dépend explicitement du potentiel chimique comme le montre l'expression (2.9) du chapitre 2. En supposant que le remplissage est fixé, il est possible de calculer directement le potentiel chimique en inversant l'équation :

$$n = \text{Tr} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n). \quad (\text{A.2})$$

Une autre possibilité consiste à utiliser la relation suivante pour l'énergie libre :

$$F(T, n, U) = F^0(T, n) + \int_0^U dU' \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle, \quad (\text{A.3})$$

et de dériver par rapport au remplissage :

$$\mu = \left( \frac{\partial F(T, n)}{\partial n} \right)_T = \mu_0 + \int_0^U dU' \left( \frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial n} \right)_T, \quad (\text{A.4})$$

où

$$\frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial n} = \frac{1}{2U} \frac{\partial}{\partial n} \left( T \sum_{ik_n, \sigma} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) e^{ik_n 0^+}}{ik_n - \epsilon(\mathbf{k}) + \mu - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)} \right) \quad (\text{A.5})$$

$$= \frac{T}{2U} \sum_{ik_n, \sigma} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[ \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{\partial n} \right)_{T,U} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \right] \quad (\text{A.6})$$

$$+ \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \left[ \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{\partial n} \right)_{T,U} - \frac{\partial \mu}{\partial n} \right]_{T,U} (G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n))^2. \quad (\text{A.7})$$

Si la self est exacte, il y a uniformité thermodynamique et donc, à l'aide de :

$$n = T \sum_{ik_n, \sigma} \int_{ZB} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n), \quad (\text{A.8})$$

il s'agit d'écrire la dérivée du potentiel chimique en fonction de la self en dérivant les deux côtés de l'équation précédente par rapport à  $n$  :

$$\left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_{T,U} = \frac{\left( T \sum_{ik_n, \sigma} \int_{ZB} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n))^2 \left( \frac{\partial \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{\partial n} \right)_{T,U} \right) - 1}{T \sum_{ik_n, \sigma} \int_{ZB} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n))^2}, \quad (\text{A.9})$$

et remplacer dans l'équation (A.7).

## A.2 Chaleur spécifique et entropie

Encore une fois, pour calculer la chaleur spécifique, plus d'une approche peut être utilisée. L'une d'entre elles consiste à extraire la chaleur spécifique du potentiel thermodynamique. Pour l'énergie libre, par exemple :

$$C_n(T, n) = T \left( \frac{\partial S(T, n)}{\partial T} \right)_{n,U} = -T \left( \frac{\partial^2 F(T, n)}{\partial T^2} \right)_{n,U}. \quad (\text{A.10})$$

Avec l'énergie libre calculée par la double occupation :

$$\left( \frac{\partial^2 F(T, n)}{\partial T^2} \right)_{n,U} = \left( \frac{\partial^2 F^0(T, n)}{\partial T^2} \right)_n + \int_0^U dU' \left( \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} \right)_{n,U}, \quad (\text{A.11})$$

qui donne, pour la chaleur spécifique :

$$C_n(T, n, U) = C_n^0(T, n) - T \int_0^U dU' \left( \frac{\partial^2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T^2} \right)_{n,U}. \quad (\text{A.12})$$

L'expression ci-dessus montre de quelle façon la double occupation modifie la chaleur spécifique par rapport au cas sans interaction. De façon similaire pour l'entropie, la différence avec le cas sans interaction est donnée par :

$$\Delta S(T, n, U) = - \int_0^U dU' \left( \frac{\partial \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\partial T} \right)_{n,U}. \quad (\text{A.13})$$

En général, avec l'expression de la self exacte :

$$C_n(T, n, U) = C_n^0(T, n) - T \int_0^U \frac{dU'}{U'} \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[ T \sum_{ik_n, \sigma} \int_{ZB} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left( \frac{\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \right) \right]_{n,U}, \quad (\text{A.14})$$

Une autre façon d'obtenir la chaleur spécifique consiste à dériver directement l'énergie interne

$$E(T, n, U) = K + U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle = Tr \left[ \left( \epsilon(\mathbf{k}) + \frac{\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{2} \right) G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \right] \quad (\text{A.15})$$

et le résultat dans ce cas est :

$$C_n(T, n, U) = \frac{\partial}{\partial T} \left[ Tr \left[ \left( \epsilon(\mathbf{k}) + \frac{\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{2} \right) G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \right] \right]_{n,U} \quad (\text{A.16})$$

$$= \frac{\partial}{\partial T} [Tr [\epsilon(\mathbf{k}) G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)]]_{n,U} + \frac{\partial}{\partial T} \left[ Tr \left[ \frac{\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_n)}{2} G_\sigma(\mathbf{k}, ik_n) \right] \right]_{n,U} \quad (\text{A.17})$$

Où on reconnaît dans le premier terme la contribution cinétique  $C_n^K(T, n, U)$  et dans le second la contribution potentielle  $C_n^U(T, n, U)$ . Il est intéressant de noter que le second terme de l'équation A.17, lorsque divisé par  $U$  et intégré sur  $U$  donne la correction à l'entropie de l'équation (A.13). Il s'ensuit la relation de Maxwell :

$$-\left(\frac{\partial S(T, n, U)}{\partial U}\right)_{T, n} = \left(\frac{\partial \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\partial T}\right)_{n, U}. \quad (\text{A.18})$$



# Annexe B

## Calcul de $U_{sp}$ et de la longueur de corrélation

La méthode autocohérente à deux particules (ACDP) repose, de façon pratique, sur l'évaluation des règles de somme sur la susceptibilité de spin et de charge. Avec l'ansatz à l'effet que l'énergie potentielle peut être exprimée à l'aide du produit de la double occupation sans interaction et de l'interaction de spin effective  $U_{sp}$ , il est possible de déduire les interactions effectives de spin et de charge en calculant ces règles de somme. Lorsque la gamme de paramètres physiques (La température, le remplissage,  $U$ ,  $t$ ,  $t'$ , etc) est telle que le système se situe dans le régime classique renormalisé [2, 68], le maximum en vecteurs d'onde et en fréquences de la susceptibilité devient très sensible à la précision numérique. Il en est de même lorsque les paramètres conduisent près de la frontière entre la région commensurable et incommensurable. De plus, lorsque la température devient petite, la fréquence à partir de laquelle la somme est tronquée doit être de plus en plus grande.

### B.1 Corrections en fréquences de Matsubara

#### B.1.1 Règle de somme sans interaction

La règle de somme en fréquences de Matsubara implique une somme discrète infinie. Bien entendu, il est hors de question d'exécuter numériquement une telle somme. Il faut donc tronquer la somme ou trouver un moyen de faire cette somme autrement. Dans notre contexte, la précision numérique sur cette somme peut être vérifiée en calculant la

règle de somme sans interaction dont le résultat est connu :

$$T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = n - 2\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle, \quad (\text{B.1})$$

où  $n$  est le remplissage,  $T$  est la température, et  $d = 2$  est la dimensionnalité. Il sera pour l'instant question de cette règle de somme.

Il est possible, en principe, d'utiliser la formule d'Euler-MacLaurin [93] pour remplacer la somme discrète par une intégrale qui peut alors être faite soit numériquement, soit analytiquement :

$$\sum_{j=0}^n f(x_0 + jh) = \frac{1}{h} \int_{x_0}^{x_0+nh} f(y) dy + \frac{1}{2} [f(x_0 + nh) + f(x_0)] \quad (\text{B.2})$$

$$+ \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k-1} [f^{(2k-1)}(x_0 + nh) - f^{(2k-1)}(x_0)] + E, \quad (\text{B.3})$$

où les  $B_{2k}$  sont les nombres de Bernoulli, les  $f^{(n)}$  sont les dérivées nièmes de  $f(x)$  et  $E$  est l'erreur provenant de la troncature de la somme sur  $k$ . Dans notre cas, l'intégrale ne peut être faite analytiquement. Il faut donc se rabattre sur une approche numérique. Par contre, la somme sur  $k$  est une série alternée qui est instable numériquement pour notre somme en question. Il semble que de calculer une somme discrète tronquée donne une meilleure précision que l'utilisation de la formule d'Euler-MacLaurin pour un même temps de calcul.

Un critère grossier pour choisir la fréquence de troncature consiste à prendre  $2n\pi T = aW$  fréquences, où  $a$  est un certain facteur (typiquement 10) et  $W$  la largeur de bande. Ainsi, la valeur numérique de la fréquence elle-même est à peu près constante, de sorte que la valeur de  $\chi_0^R(\mathbf{q}, iq_n)$  à la fréquence maximale est suffisamment faible pour contribuer faiblement à la somme. Par contre, lorsque la température diminue, le nombre de contribution de cette fonction à la somme entre la fréquence maximale et l'infini augmente. Lorsque la température est très faible, on remarque qu'une fréquence de troncature trop petite induit une divergence en  $1/T$  dans les résultats. Pour contrer ce problème, on utilise alors un développement à haute fréquence pour  $\chi_0^R(\mathbf{q}, iq_n)$ .

Soit  $|q_N| = 2N\pi T$  une valeur de fréquence telle que  $\epsilon(\mathbf{k})/q_N \rightarrow 0$ . La partie réelle de la susceptibilité sans interaction prend alors la forme suivante :

$$\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) = -2 \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q}))(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{(q_n)^2 + (\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^2} \quad (\text{B.4})$$

$$= \frac{-2}{(q_n)^2} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q}))(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{1 + \left(\frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{q_n}\right)^2} \quad (\text{B.5})$$

$$= \frac{-2}{(q_n)^2} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q}))(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \times \quad (\text{B.6})$$

$$\left( \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \left( \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{q_n} \right)^{2j} \right) \quad (\text{B.7})$$

$$= \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \frac{2}{(q_n)^{2j}} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q}))(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))^{2j-1}, \quad (\text{B.8})$$

de sorte que l'intégrale sur les vecteurs d'onde devient indépendante de la fréquence. Par contre, cette intégrale dépend de  $j$ , l'ordre du développement en  $1/q_n$ . Il s'agit donc de choisir une valeur de fréquence  $N$  telle que le développement à l'ordre choisi donne des résultats acceptables. Ensuite, la somme sur les fréquences devient une simple opération algébrique et il est possible de sommer sur un très grand nombre de fréquence (10000 et plus) en des temps de calcul raisonnables. On se rend à l'ordre quatre en  $j$ .

De cette façon, avec seulement l'équivalent, en temps de calcul, d'une dizaine ou d'une centaine de fréquences, on obtient une précision sur la règle de somme sans interaction de l'ordre du centième de pourcent.

Cette erreur donne une très bonne estimation de l'erreur numérique obtenue pour le cas avec interaction.

### B.1.2 Règle de somme avec interaction pour ACDP

Lorsque les interactions sont prises en compte, la règle de somme est modifiée. Dans le cadre de l'approche ACDP, les règles de somme de spin et de charge prennent les formes suivantes :

$$n - 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) \quad (\text{B.9})$$

$$n + 2\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle - n^2 = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) \quad (\text{B.10})$$

où

$$\chi_{sp}^{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 \pm U_{sp}^{ch} \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{2}} \quad (\text{B.11})$$

et  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle = \frac{U_{sp}n^2}{4U}$ . Bien entendu, le développement pour  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  demeure valide. Donc pour trouver les valeurs de  $U_{sp}^{ch}$ , il s'agit de calculer le membre de gauche de la règle de somme sur le spin en fonction de  $U_{sp}$  et de calculer le membre de droite aussi en fonction de ce paramètre. Le point de croisement est la solution. Le membre de gauche est une fonction linéaire et le membre de droite est une fonction monotone croissante avec un pôle à  $U_{sp}^{max} \equiv \frac{2}{\chi_0(\mathbf{Q}_{max}, iq_n=0)}$ . Ainsi les solutions physiquement valables sont confinées dans le domaine  $[0, U_{sp}, U_{sp}^{max}]$ .

Or, pour obtenir numériquement la valeur de  $U_{sp}$  qui constitue la solution à la règle de somme, il faut évaluer cette règle de somme pour plusieurs valeurs de  $U_{sp}$ , ce qui peut nécessiter un temps de calcul considérable, surtout si le nombre de fréquences de Matsubara est élevé. D'abord, inutile de recalculer  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  puisque cette fonction est préservée dans un tableau lors de la vérification de la règle de somme à  $U = 0$ . Ensuite, il faut trouver une astuce qui permet de s'affranchir de répéter la somme jusqu'à la fréquence maximale choisie pour la règle de somme.

Soit  $|q_M| = 2M\pi T$  tel que  $\frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_M) \rightarrow 0$ . Il est alors possible de réécrire la susceptibilité de spin de la sorte :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \quad (\text{B.12})$$

$$= \chi_0(\mathbf{q}, iq_n) \left( \sum_{j=0}^{\infty} \left( \frac{U_{sp}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n) \right)^j \right), \quad (\text{B.13})$$

de sorte que l'intégrale sur les vecteurs d'ondes ainsi que la somme sur les fréquences de Matsubara ne dépend plus de  $U_{sp}$  puisqu'on peut le factoriser. Il est alors possible

d'exécuter cette intégrale une seule fois par ordre  $j$  et de réutiliser le résultat pour chaque valeur de  $U_{sp}$ . Il est possible aussi d'utiliser ce résultat pour la susceptibilité de charge, mais dans ce cas, puisque  $U_{ch}$  peut en principe être de n'importe quelle grandeur entre zéro et l'infini, il faut porter une attention particulière au choix de  $M$ .

En pratique, il semble que la valeur de  $q_M$  soit environ deux à quatre fois plus petite que  $q_N$ , ce qui fait que le temps de calcul pour le cas avec interaction nécessite le même temps de calcul que celui sans interaction (si on ne considère pas le temps qu'il faut pour évaluer  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  comme tel). Typiquement, on choisit  $q_M \sim 8t$  et  $q_N \sim 24t$ . Pour tous les calculs, on utilise 10000 fréquences. Le calcul de  $\chi_{sp}$  exact comprend alors  $M = \frac{4}{\pi T}$  fréquences et le calcul de  $\chi_0$  exact comprend  $N = \frac{12}{\pi T}$  fréquences. Ici encore, on se rend à l'ordre quatre en  $j$ .

### Règle de somme avec interaction pour ACDP, convergence en fréquence

La susceptibilité sans interaction  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  converge en  $1/q_n^2$  comme le montre l'équation (B.4). Le premier terme de la somme de l'équation (B.13) montre que la susceptibilité avec interaction converge aussi en  $1/q_n^2$ . De plus, le premier terme de la somme est strictement égal à  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ . Il est donc possible de soustraire la contribution en  $1/q_n^2$  en soustrayant  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  dans la règle de somme. Puisque le résultat de cette somme est connu exactement, la précision se trouve augmentée puisque le reste converge maintenant en  $1/q_n^4$ .

### Fréquence nulle et définition de la longueur de corrélation

Le maximum absolu de la susceptibilité de spin est exactement au même endroit que le maximum absolu de la fonction de Lindhard étant donné la forme de  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n)$ . Il est alors possible de faire un développement autour du maximum pour accélérer la convergence de l'intégrale sur les vecteurs d'ondes à fréquence nulle. Pour  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ , en coordonnées sphériques et en supposant qu'il n'y a pas de dépendance en  $\theta$  :

$$\chi_0(\mathbf{q}, 0) \approx \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(q_{max} - q)^j}{j!} \left[ \frac{d^j}{dq^j} \chi_0(\mathbf{q}, 0) \right]_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{max}} \quad (\text{B.14})$$

En remplaçant dans l'expression de la susceptibilité et en conservant le premier terme au numérateur :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \approx \frac{\chi_0(\mathbf{Q}_{max}, 0)}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(q_{max}-q)^j}{j!} \left[ \frac{d^j}{dq^j} \chi_0(\mathbf{q}, 0) \right]_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{max}}}, \quad (\text{B.15})$$

$$\chi_0(\mathbf{Q}_{max}, 0) \equiv \chi_0^{max}. \quad (\text{B.16})$$

En conservant seulement les deux premiers termes de la somme au dénominateur, la susceptibilité prend la forme suivante :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \approx \frac{2\xi^2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{1 + \xi^2(q_{max} - q)^2} \equiv \chi_{sp}^{as}(\mathbf{q}, \omega = 0), \quad (\text{B.17})$$

$$\frac{2\xi^2}{U_{sp}\xi_0^2} \frac{1}{1 + \xi^2(q_{max} - q)^2} = \frac{\chi_{sp}^{max}}{1 + \xi^2(q_{max} - q)^2} \equiv \chi_{sp}^{as}(\mathbf{q}, 0) \quad (\text{B.18})$$

où  $\xi^2 = \xi_0^2 \frac{U_{sp}}{U_{sp}^{max} - U_{sp}}$  et  $\xi_0^2 = -\frac{U_{sp}^{max}}{4} \left[ \frac{d^2}{dq^2} \chi_0(\mathbf{q}, iq_n) \right]_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{max}}$  et  $\chi_{sp}^{max} = \chi_{sp}(\mathbf{Q}_{max}, 0)$ .

Ce développement est intéressant pour deux raisons principales. La première est qu'il donne de l'information physique sur l'importance des fluctuations de spin dans le système. La largeur à mi-hauteur du pic correspond à la longueur de corrélation de spin du système. La seconde réside en ce fait que ce pic devient très grand lorsque les fluctuations sont importantes et alors l'intégrale devient difficile à exécuter numériquement. Avec une bonne approximation de la susceptibilité qui serait intégrable analytiquement, il serait possible de faire une intégrale numérique plus précise :

$$\int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) = \int_{\circlearrowleft} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) - \chi_{sp}^{as}(\mathbf{q}, 0)) + \int_{\circlearrowleft} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{sp}^{as}(\mathbf{q}, 0) \quad (\text{B.19})$$

$$+ \int_{ZB-\circlearrowleft} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \quad (\text{B.20})$$

$$= \int_{\circlearrowleft} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) - \chi_{sp}^{as}(\mathbf{q}, 0)) + \int_{ZB-\circlearrowleft} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \chi_{sp}(\mathbf{q}, 0) \quad (\text{B.21})$$

$$+ \frac{\chi_{sp}^{max}}{4\pi\xi^2} \ln(1 + \xi^2 q_{max}^2) \quad (\text{B.22})$$

où l'intégrale  $\int_{bigcirc}$  est effectuée sur un cercle de rayon  $q_{max}$  centré sur le maximum de  $\chi_{sp}^{as}(\mathbf{q})$ .

Lorsque la forme approximative ci-dessus est comparée au résultat exact de  $\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n)$ , il semble que le développement soit rigoureusement exact pour les  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}_{max}$  (voir par exemple la figure 3.8 du chapitre 3). Par contre, le calcul de  $\xi$  tel que défini ici ne permet pas au développement d'avoir le résultat exact lorsque  $\mathbf{q}$  s'éloigne trop du maximum. En pratique, la susceptibilité de spin est très piquée près du maximum et la forme asymptotique ne correspond plus lorsqu'on s'éloigne du sommet du pic. Une estimation de la largeur à mi-hauteur  $l_{sp}$  montre qu'elle correspond à l'amplitude du maximum :

$$l_{sp} = \frac{1}{\xi} \sim \sqrt{\frac{\chi_0^{max}}{\chi_{sp}^{max}}}. \quad (\text{B.23})$$

En fait, cette estimation semble être celle qui permet de mieux lisser la susceptibilité de spin par une forme lorentzienne hors demi-remplissage. Cette estimation montre une mauvaise dépendance en  $q$  très près du maximum, mais le comportement global de la fonction est mieux rendu (voir la figure 3.8 du chapitre 3). En fait, obtenir un résultat précis pour cette région n'est pas notre objectif autant que d'obtenir une évaluation précise de la longueur de corrélation physique et de soustraire les contributions importantes de la susceptibilité à fréquence nulle pour assurer la stabilité du calcul.

En ajoutant toutes les corrections numériques voulues, la règle de somme sur la susceptibilité de spin prend finalement la forme suivante :

$$n - \frac{U_{sp} n^2}{2U} = T \int_{\circ} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{U_{sp} (\chi_0(\mathbf{q}, 0))^2}{2 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, 0)} - \frac{\chi_0^{max}}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0^{max} + \xi_0^2 (\mathbf{Q}_{max} - \mathbf{q})^2} \right] \quad (\text{B.24})$$

$$+ T \int_{ZB-\circ} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{U_{sp} (\chi_0(\mathbf{q}, 0))^2}{2 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, 0)} \right] + T \frac{\chi_0^{max}}{4\pi} \ln \left( 1 + \frac{q_{max}^2}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0^{max}} \right) \quad (\text{B.25})$$

$$+ T \sum_{i q_n \neq 0, |i q_n| \leq |i q_N|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{U_{sp} (\chi_0(\mathbf{q}, i q_n))^2}{2 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, i q_n)} \right] \quad (\text{B.26})$$

$$+ T \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{U_{sp}}{2} \right)^j \sum_{|i q_N| \leq |i q_n| \leq |i q_{max}|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\chi_0(\mathbf{q}, i q_n))^{(j+1)} \right] \quad (\text{B.27})$$

$$+ n - \frac{n^2}{2}, \quad (\text{B.28})$$

où on utilise dans la dernière somme le développement de  $\chi_0(\mathbf{q}, i q_n)$  pour  $|i q_n| > |i q_M|$ . Il serait possible aussi d'inclure le développement asymptotique en fréquence. Alors en regroupant les termes, on obtient une fonction de  $U_{sp}$  qui prend la forme :

$$\Xi(U_{sp}) = T \int_{\circ} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{U_{sp} (\chi_0(\mathbf{q}, 0))^2}{2 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, 0)} - \frac{\chi_0^{max}}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0^{max} + \xi_0^2 (\mathbf{q}_{max} - \mathbf{q})^2} \right] \quad (\text{B.29})$$

$$+ T \int_{ZB-\circ} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{U_{sp} (\chi_0(\mathbf{q}, 0))^2}{2 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, 0)} \right] + T \frac{\chi_0^{max}}{4\pi} \ln \left( 1 + \frac{q_{max}^2}{1 - \frac{U_{sp}}{2} \chi_0^{max}} \right) \quad (\text{B.30})$$

$$+ T \sum_{i q_n \neq 0, |i q_n| \leq |i q_N|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{U_{sp} (\chi_0(\mathbf{q}, i q_n))^2}{2 - U_{sp} \chi_0(\mathbf{q}, i q_n)} \right] \quad (\text{B.31})$$

$$+ T \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{U_{sp}}{2} \right)^j \sum_{|i q_N| \leq |i q_n| \leq |i q_{max}|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\chi_0(\mathbf{q}, i q_n))^{(j+1)} \right] \quad (\text{B.32})$$

$$+ \left( \frac{U_{sp}}{U} - 1 \right) \frac{n^2}{2}. \quad (\text{B.33})$$

qui, lorsque égale à zéro donne la solution pour  $U_{sp}$ .

La règle de somme pour la charge est plus simple puisqu'elle ne requiert pas la correction asymptotique. Tout ce qu'elle nécessite, c'est que l'interaction effective de spin



soit calculée en premier :

$$n + \frac{U_{sp}n^2}{2U} - n^2 = T \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{-U_{ch} (\chi_0(\mathbf{q}, 0))^2}{2 + U_{ch}\chi_0(\mathbf{q}, 0)} \right] + \quad (\text{B.34})$$

$$+ T \sum_{iq_n \neq 0, |iq_n| \leq |iq_M|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{-U_{ch} (\chi_0(\mathbf{q}, iq_n))^2}{2 + U_{ch}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \right] \quad (\text{B.35})$$

$$+ T \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{-U_{ch}}{2} \right)^j \sum_{|iq_M| \leq |iq_n| \leq |iq_{max}|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\chi_0(\mathbf{q}, iq_n))^{(j+1)} \right] \quad (\text{B.36})$$

$$+ n - \frac{n^2}{2}, \quad (\text{B.37})$$

qui se réduit à :

$$\Lambda(U_{ch}) = T \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{-U_{ch} (\chi_0(\mathbf{q}, 0))^2}{2 + U_{ch}\chi_0(\mathbf{q}, 0)} \right] + \quad (\text{B.38})$$

$$+ T \sum_{iq_n \neq 0, |iq_n| \leq |iq_M|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[ \frac{-U_{ch} (\chi_0(\mathbf{q}, iq_n))^2}{2 + U_{ch}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)} \right] \quad (\text{B.39})$$

$$+ T \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \left( \frac{-U_{ch}}{2} \right)^j \sum_{|iq_M| \leq |iq_n| \leq |iq_{max}|} \int_{ZB} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\chi_0(\mathbf{q}, iq_n))^{(j+1)} \right] \quad (\text{B.40})$$

$$+ \left( 1 - \frac{U_{sp}}{U} \right) \frac{n^2}{2}, \quad (\text{B.41})$$

qui ne comporte qu'une seule solution. Par contre, si le développement en fréquence est inadéquat, la valeur de  $U_{ch}$  peut diverger vers des valeurs non physiques. Cela survient lorsque la température est grande, de sorte que le terme  $\frac{U_{ch}}{2}\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$  ne tend pas vers zéro ou encore lorsque  $U_{ch}$  devient très grand lorsque  $T \rightarrow T_x$ .

## B.2 Intégrale sur les vecteurs d'ondes

### B.2.1 Choix d'une méthode d'intégration

Les méthodes de calculs numériques pour le modèle de Hubbard, tel que le Monte Carlo Quantique, sont sensibles aux effets de tailles finies du réseau. L'approche ACDP n'y échappe pas. Lorsque la température diminue, ces effets deviennent plus importants. Puisqu'un des objectifs de ce travail est de calculer des propriétés du modèle de Hubbard pour les températures les plus basses possible, les calculs nécessitent une grande précision aussi dans ce domaine.

Parmi les choix de méthodes d'intégration qui s'étendent au-delà de l'intégrale par trapèze ou encore la simple somme discrète, on retrouve les intégrales polynomiales desquelles découle l'intégration Romberg. On retrouve aussi les méthodes de Runge-Kutta ainsi que les intégrales Gaussiennes. Dans la mesure où le choix est fait afin de fixer la précision, ces méthodes dépendent de la densité de points utilisée. Par contre cela a des conséquences sur le temps de calcul. Dans le cas du calcul des règles de somme, il est possible de doubler la densité de points autour du maximum. Ainsi, en doublant simplement le nombre de points sur le quart de chaque quadrant de la zone de Brillouin, on obtient la précision du carré du nombre de points. De plus, bien que la position du maximum en vecteur d'onde à des fréquences de Matsubara différentes varie, elle varie peu. Ainsi cette précision est obtenue pour toutes les fréquences. Les intégrales seront faites avec la méthode de Gauss-Legendre car elle offre une très bonne précision pour des temps de calcul plutôt courts.

Pour ce qui est du calcul de la fonction de Lindhard, les structures se situent à des positions qui varient selon la valeur du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  pour laquelle l'intégrale est calculée. Il faudra donc ajuster le nombre de points de manière à obtenir convergence. Typiquement, le calcul de la règle de somme sera fait avec un grillage de  $3 \times 3$  intégrales à environ  $10 \times 10$  points avec le même sous-grillage dans le carré englobant le maximum. Autrement dit,  $30 \times 30$  évaluations de la fonction  $\chi_0$ . Pour le calcul de  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ , l'intégrale sera faite sur une grille de  $20 \times 20$  intégrales à  $10 \times 10$  points. Donc  $200 \times 200$  évaluations de l'intégrand de  $\chi_0(\mathbf{q}, iq_n)$ .

### B.3 Incommensurabilité de la susceptibilité et de la surface de Fermi

À température nulle et à demi-remplissage, pour  $t' = 0$ , la position du maximum est à  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi)$ . Aussitôt que le remplissage est différent de 1, le pic se divise en quatre pics situés à  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi \pm \delta, \pi)$  et  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi \pm \delta)$ . De plus, ces pics n'ont plus les mêmes propriétés de symétrie que le pic unique. On désigne un pic comme étant incommensurable lorsque sa position n'est plus une fraction rationnelle du vecteur du réseau réciproque  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . En pratique, la position d'un des pics incommensurables se déplace de façon continue sur la frontière  $q_x^{max} = \pi$  à partir de  $q_y^{max} = \pi$  jusqu'à  $q_y^{max} = 0$  (parallèlement et par symétrie un second pic se dirige de  $q_y^{max} = \pi$  à  $q_y^{max} = 2\pi$  et les deux autres aux mêmes positions en inversant  $q_x^{max}$  et  $q_y^{max}$ ). Lorsque le maximum atteint  $q_y^{max} = 0$ , le pic se déplace maintenant le long de cette direction pour  $q_x^{max} = \pi$  vers  $q_x^{max} = 0$  de sorte qu'à remplissage nul ou complet, le maximum se trouve à  $\mathbf{Q}_{max} = \mathbf{0}$ .

Puisque le pic se déplace de façon continue en variant le remplissage (ou encore en variant la température), il se peut que le maximum tombe accidentellement sur une valeur de vecteur d'onde commensurable, on désignera d'*incommensurable* un pic qui ne se trouve pas à  $\mathbf{Q}_{max} = (\pi, \pi)$ .

Lorsqu'on applique la correction asymptotique, il faut maintenant appliquer la correction pour chacun des pics afin de préserver la symétrie. Il faut donc soustraire sur quatre cercles centrés chacun autour d'un des quatre maximums. De plus, puisque le pic est désormais symétrique dans une direction et asymétrique dans l'autre, il faut en tenir compte dans le calcul de la longueur de corrélation et aussi dans l'écriture de  $\chi_{sp}^{as}(\mathbf{q}, 0)$ . Heureusement, la longueur de corrélation physique reste reliée à l'amplitude du maximum et pour les valeurs de remplissage d'intérêt, utiliser cette longueur de corrélation pour une forme symétrique de la correction permet d'obtenir de bons résultats. Ainsi, la seule différence avec le cas commensurable dans le calcul des règles de sommes tient au fait qu'il faut tenir compte des quatre corrections plutôt que d'une seule.

# Annexe C

## Calcul de la self-énergie avec des systèmes de taille finie

Les calculs avec interaction faisant intervenir la fonction de Green à une particule font intervenir l'évaluation de la self-énergie. Cette dernière comporte une somme sur les fréquences de Matsubara (ou une intégrale sur les fréquences) et une intégrale sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$ . Dans le cas de l'évaluation des règles de somme, les fonctions sont paires en fréquence, de sorte qu'il est possible d'intégrer de zéro à l'infini et de multiplier par deux. Par contre, ce n'est plus le cas pour la self.

Ensuite, puisque le calcul de la self fait intervenir les susceptibilités avec interaction, il n'est pas possible en pratique d'avoir recours à des méthodes d'intégration qui fixent la précision et qui choisissent elle-mêmes le nombre d'évaluation de la fonction aux points nécessaires. Pour ces raisons, un système de taille finie sera privilégié. Par ailleurs, l'utilisation de la fonction de Green dans les calculs fait intervenir aussi des intégrales sur les vecteurs d'onde et les fréquences. Puisque la self intervient à diverses étapes du calcul et qu'elle est relativement longue à calculer, il est souhaitable de réutiliser les résultats obtenus et donc de mettre ces résultats dans un tableau.

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{Un_{-\sigma}}{2} + \frac{UT}{8} \sum_{iq_m} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} 3U_{sp}\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_m)G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, iq_m + ik_n) \quad (\text{C.1})$$

$$+ \frac{UT}{8} \sum_{iq_m} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} U_{ch}\chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_m)G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, iq_m + ik_n) \quad (\text{C.2})$$

L'intégrale sur les vecteurs d'onde est une convolution. Il est alors possible de calculer la transformée de Fourier du produit des transformées de Fourier pour accélérer le calcul. Avec les algorithmes existant pour les transformées de Fourier rapides, le gain en temps de calcul est considérable. Par contre, ces techniques imposent l'utilisation d'une grille uniforme en vecteurs d'onde. D'un autre côté, l'utilisation d'une grille uniforme permet de profiter davantage des propriétés de symétrie des fonctions. Ensuite, tel que mentionné plus tôt, le calcul de la self fait intervenir une somme sur les fréquences de Matsubara. En pratique, il apparaît avantageux au niveau de la précision des résultats d'utiliser deux fois plus de fréquences pour le calcul de la self que pour le calcul *avec* la self.

Pour ce qui est des calculs faisant intervenir la fonction de Green avec interaction  $G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ , à cette étape du calcul, les données sont contenues dans un tableau. À partir de là, seul le nombre de fréquences multiplié par le nombre de sites influence le temps de calcul.

Pour le calcul du potentiel chimique, il faut inverser l'équation suivante :

$$n(\mu) = \frac{2T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n), \quad (\text{C.3})$$

où  $N$  est le nombre de sites et le facteur deux provient du fait que  $G_{-\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ . Habituellement, il faut introduire un facteur de convergence  $e^{ik_n 0^+}$  pour la convergence en fréquence. La nature de l'approche ACDP est telle qu'il faut fixer le remplissage et calculer le potentiel chimique sans interaction correspondant pour extraire les valeurs de susceptibilité sans interaction. Alors :

$$n(\mu) = \frac{2T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{2T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} G_0(\mathbf{k}, ik_n). \quad (\text{C.4})$$

En soustrayant les deux équations, on obtient :

$$0 = \frac{2T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} (G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_0(\mathbf{k}, ik_n)), \quad (\text{C.5})$$

qui converge adéquatement.

Pour le calcul de l'énergie totale, il faut calculer :

$$E = \frac{2T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \left( \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{\Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)}{2} \right) G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n), \quad (\text{C.6})$$

où  $\Sigma_{-\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) = \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n)$ . Il est plus simple de calculer ces deux contributions séparément. D'abord pour la double occupation :

$$\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(2)} = \frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) (G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_0(\mathbf{k}, ik_n)) + \frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) G_0(\mathbf{k}, ik_n) \quad (\text{C.7})$$

$$= \frac{T}{N} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \Sigma_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) (G_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}, ik_n) - G_0(\mathbf{k}, ik_n)) + U_{sp} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle \quad (\text{C.8})$$

Puisque les fonctions de Green avec ou sans interaction ont le même comportement en fréquence à haute fréquence, la somme converge beaucoup plus rapidement. De plus, au-dessus de  $T_x$ , typiquement  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(1)} = \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle^{(2)}$  de sorte que la somme s'annule pratiquement. Par contre près de  $T_x$ , ce n'est plus le cas et il faut donc faire le calcul au long.

Pour la partie cinétique maintenant, on utilise exactement la même astuce à la différence que le terme ajouté nécessite une somme sur les vecteurs d'ondes. Cela nécessite une intégrale supplémentaire, contrairement à la double occupation, mais la convergence en fréquences est meilleure. En pratique toutes ces intégrales sont faites en même temps dans la même boucle de sorte que l'ajout de somme ne ralentit pas le calcul.

Pour le calcul de la chaleur spécifique, cela est fait numériquement en calculant l'énergie à deux températures voisines et en effectuant une simple dérivée aux différences finies.

# Annexe D

## Récents développements

Cette annexe regroupe divers résultats qui méritent une plus grande attention dans l'avenir. Il s'agit de travaux incomplets ou de compléments aux résultats présentés dans la thèse. D'abord, il sera question de problèmes soulevés quant aux phénomènes critiques, problèmes qui ont été constatés lors de la rédaction de l'article lié aux chapitre 4 et 7. Ensuite, il sera question de certains éléments observés qui peuvent être relié directement à certaines anomalies dans le régime critique. Ils peuvent aussi, certainement, avoir des répercussions dans le régime classique renormalisé puisque que ces caractéristiques sont principalement lié à la commensurabilité du système.

### D.1 Retour sur l'invariance d'échelle

Lors de l'analyse des données de mise à l'échelle, il fut observé des oscillations dans les données de mise à l'échelle. On a d'abord cru à des problèmes numériques causés par les calculs aux plus basses températures ainsi que des problèmes de précision au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable. Après une analyse approfondie, il fut mis en évidence que ce problème ne concerne pas les données à basse température mais bien uniquement les données au voisinage de la frontière commensurable-incommensurable.

Ces oscillations ont induit une certaine ambiguïté au niveau de l'extraction de la limite à haute température. La différence entre la déviation causé par la température, déviation qui marque la température limite supérieure du régime critique, tient du fait que la déviation en température est systématique. La susceptibilité mise à l'échelle dévie systématiquement sous la courbe et ce pour tous les dopages, comme le montre la figure 7.5 du chapitre 7. Par contre, les déviation causé par la frontière commensurable-

incommensurable montre une oscillation autour de ce qui semble être la véritable fonction universelle comme le montre la figure ???. Sur la figure, on observe deux graphiques : le graphique principal montre la fonction mise à l'échelle et la sous-figure montre les données brutes tracées en fonction de  $\frac{\Delta n}{T}$ . Pour ces paramètres ( $U = 4, t' = 0$ ), on remarque que certaines portions de la courbe dévient à des températures intermédiaires mais ne dévient pas à haute (petit  $\frac{\Delta n}{T}$ ) et à basse température (grand  $\frac{\Delta n}{T}$ ).

Une observation systématique des résultats pour divers paramètres montre que ces oscillations sont présente pour les température voisines de la frontière. Une manière manifeste de présenter cet effet sous forme graphique consiste à tracer en échelle logarithmique la susceptibilité de spin en fonction de la température au dopage critique. À ce dopage,  $\chi_{sp} \sim 1/T$  et ce pour toutes les températures. On remarque sur la figure ??? que la déviation se situe de part et d'autre de la frontière commensurable-incommensurable.

Une comparaison numérique des termes du développement asymptotique pour  $\chi_0$  montre que le terme en  $q^2$  domine toujours bien que son amplitude passe par 0 exactement à la frontière. Cela confirme que l'exposant dynamique  $z = 2$  même en ce point. Par contre, le développement asymptotique ne peut plus être d'aucune utilité puisque qu'il suggère que  $\chi_0$  ne dépend plus de  $q$  pour une grande plage de vecteur d'onde :

$$\chi_0(q \rightarrow 0, iq_n = 0) = \chi_0^{max} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi_0(q)}{\partial q^2} q^2 + \frac{1}{24} \frac{\partial^4 \chi_0(q)}{\partial q^4} q^4 + \dots \quad (\text{D.1})$$

Les termes impaires sont nuls par symétrie du réseau carré. Exactment à la frontière, le premier terme est nul. L'analyse numérique des autres dérivées montre que les termes suivants sont plus petits encore. Cela suggère que toutes les dérivées seraient nulle exactement à la frontière. Cette hypothèse mérite d'être explorée et ses consécquence sur les résultats de cette thèse aussi.

Les questions qui demeurent sont les suivantes : Est-ce qu'il existe une correction aux lois d'échelles qui permettent de généraliser les lois dérivées dans la thèse au tout le régime critique, y compris la frontière commensurable-incommensurable ? Est-il possible que cette région ne soit pas universelle ? Il s'agit de question qui méritent qu'on leur porte une attention particulière.

Ainsi on ne peut porter le blâme de cette déviation sur un changement de classe d'universalité de  $z = 2$  vers  $z = 4$ . Une possibilité serait qu'il manque des corrections aux lois d'échelle qui viendraient de la dépendance en vecteur d'onde  $q_m ax$ .

Il est possible de s'affranchir, du moins en partie, du problème de commensurabilité



lorsqu'on a recours à un  $t'$  non nul. En effet, il fut démontré au chapitre 7 que certains points critique pour des valeurs particulières de  $U$  à un  $t'$  donné que le point critique se situe dans la région commensurable. Comme par exemple lorsque  $U = 3t$  et  $t' = -0.2t$ . Dans ce cas, on peut refaire le graphique ?? avec ces paramètres et vérifier qu'il n'y a pas de déviation. C'est ce qu'on constate à la figure ??.

# Bibliographie

- [1] B. Kyung, V. Hankevych, A.-M. Daré, et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147004 (2004).
- [2] Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay. *J. Phys.* **7**, 1309 (1997).
- [3] E.M. Motoyama, G. Yu, I.M. Vishik, O.P. Vajk, P.K. Mang, et M. Greven. *Nature* **445**, 186 (2006).
- [4] Sébastien Roy. Mémoire de Maîtrise, Université de Sherbrooke, (2000).
- [5] J. Hubbard. *Pros. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [6] J. M. Luttinger. *Journal of Mathematical Physics* **4**, 1154 (1963).
- [7] N. D. Mermin et H. Wagner. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [8] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, (2001).
- [9] Y. Tokura, H. Takagi, et S. Uchida. *Nature* **337**, 345 (1989).
- [10] N. P. Armitage, D.H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, F. Ronning, D. L. Feng, P. Bogdanov, X. J. Zhou, W. L. Yang, Z. Hussain, P. K. Mang, N. Kaneko, M. Greven, Y. Onose, Y. Taguchi, et Y. Tokura. *Phys. Rev. B* **68**, 064517 (2003).
- [11] N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, D. L. Feng, H. Eisaki, Z.-X. Shen, P. K. Mang, N. Kaneko, M. Greven, Y. Onose, Y. Taguchi, et Y. Tokura. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257001 (2002).
- [12] N. P. Armitage, D. H. Lu, D. L. Feng, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, F. Ronning, Z.-X. Shen, Y. Onose, Y. Taguchi, et Y. Tokura. *Phys. Rev. Lett* **86**, 1126 (2001).
- [13] N. P. Armitage, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, F. Ronning, D. L. Feng, P. Bogdanov, Z.-X. Shen, Y. Onose, Y. Taguchi, Y. Tokura, P. K. Mang, N. Kaneko, et M. Greven. *Phys. Rev. Lett* **87**, 147003 (2001).
- [14] Andrea Damascelli, Zhi-Xun Shen, et Zahid Hussain. *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
- [15] P. W. Anderson. *Science* **235**, 1196 (1987).
- [16] F.C. Zhang et T. M. Rice. *Phys. Rev. B.* **32**, 3759 (1988).
- [17] J.E. Hirsch. *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).
- [18] N. Bickers et D. Scalapino. *Ann. Phys.* **193**, 206 (1989).

- [19] Tôru Moriya. *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*. Springer-Verlag, Berlin, (1985).
- [20] S. Moukouri, S. Allen, F. Lemay, and B. Kyung, D. Poulin, Y. M. Vilks, et A. M. S Tremblay. *Phys. Rev. B* **61**, 7887 (2000).
- [21] A. Veilleux, Liang Chen, Anne-Marie Daré, Y.M. Vilks, et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **52**, 16255 (1995).
- [22] G. Baym et P. Kadanoff. *Phys. Rev.* **124**, 287 (1961).
- [23] G. Baym et P. Kadanoff. *Phys. Rev.* **127**, 1391 (1962).
- [24] Thereza Paiva, R.T. Scalettar, Carey Huscroft, et A.K. McMahan. *Phys. Rev. B* **63**, 125116 (2001).
- [25] Antoine Georges et Werner Krauth. *Phys. Rev. B* **48**, 7167 (1993).
- [26] D. Vollhardt. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1307 (1997).
- [27] N. Chandra, M. Kollar, et D. Vollhardt. *Phys. Rev. B* **59**, 10541 (1999).
- [28] H. Shiba et P. A. Pincus. *Phys. Rev. B* **5**, 1966 (1972).
- [29] Joachim Schulte et Michael C. Böhm. *Phys. Rev. B* **53**, 15385 (1996).
- [30] J. Schulte et M. C. Böhm. *phys. stat. sol.* **199**, 59 (1997).
- [31] Tudor D. Stanescu et Philip Phillips. *Phys. Rev. B* **64**, 235117 (2001).
- [32] Fabrizio Dolcini et Arianna Montorsi. *Phys. Rev. B* **65**, 155105 (2002).
- [33] R.T. Scalettar, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, et D. Toussaint. *Phys. Rev. B* **39**, 4711 (1989).
- [34] R. Staudt, M. Dzierzawa, et A. Muramatsu. *European Physical Journal B* **17**, 411 (2000).
- [35] F. Mancini, D. Villani, et H. Matsumoto. *J. Phys. Studies* **4**, 474 (1999).
- [36] C. A. Macedo et M. C. de Souza. *Phys. Rev. B* **65**, 153109 (2002).
- [37] Jongbae Hong et Hae-Young Kee. *Phys. Rev. B* **52**, 2415 (1995).
- [38] T. Brugger, T. Schreiner, G. Roth, P. Adelmann, et G. Czjzek. *Phys. Rev. B* **71**, 2481 (1993).
- [39] A. Moreo, D. Scalapino, et E. Dagotto. *Phys. Rev. B* **43**, 11442 (1991).
- [40] A. Macridin, M. Jarrell, et Th. Maier. *Phys. Rev. B* **74**, 085104 (2005).
- [41] F. Becca, F. Capone, et S. Sorella. *Phys. Rev. B* **62**, 12700 (2000).
- [42] G. Montambaux et M. Heritier ans P. Lederer. *J. Low Temp. Phys.* **47**, 39 (1982).
- [43] M. Marder ands N. Papanicolaou et G. Psaltakis. *Phys. Rev. B* **41**, 6920 (1990).
- [44] F. Nori, E. Abrahams, et G. Zimanyi. *Phys. Rev. B* **41**, 7277 (1990).
- [45] V. J. Emery, S. A. Kivelson, et H. Q. Lin. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 475 (1990).
- [46] C. S. Hellberg et E. Manousakis. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4609 (1997).

- [47] J. H. Han, Q. H. Wang, et D. H. Lee. *Int. J. Mod. Phys. B* **15**, 1117 (2001).
- [48] Tae-Hyoung Gimm et Sung-Ho Suck Salk. *Phys. Rev. B* **62**, 13930 (2000).
- [49] W. O. Putikka et M. U. Luchini. *Phys. Rev. B* **62**, 1684 (2000).
- [50] C. T. Shih, Y. C. Chen, et T. K. Lee. *Phys. Rev. B* **57**, 627 (1998).
- [51] G. Kotliar, Sahana Murphy, et M. J. Rozenberg. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 046401 (2002).
- [52] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, et M. Rozenberg. *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [53] John A. Hertz. *Phys. Rev. B* **14**, 1165 (1976).
- [54] A. Georges et G. Kotliar. *Phys. Rev. B* **45**, 6479 (1992).
- [55] G. Kotliar, S. Savrasov, G. Palsson, et G. Biroli. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001).
- [56] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, et H. Krishnamurthy. *Phys. Rev. B* **58**, R7475 (1998).
- [57] M. Hettler, M. Mukherjee, M. Jarrell, et H. Krishnamurthy. *Phys. Rev. B* **61**, 12739 (2000).
- [58] C. Gros et R. Valenti. *Phys. Rev. B* **48**, 418 (1993).
- [59] D. Sénéchal, D. Perez, et M. Pioro-Ladrière. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).
- [60] D. Sénéchal, D. Perez, et D. Plouffe. *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
- [61] M. Potthoff, M. Aichhorn, et C. Dahnen. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 206402 (2003).
- [62] Y.M. Vilks, Liang Chen, et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **49**, 13267 (1994).
- [63] J. M. Luttinger et J.C. Ward. *Phys. Rev.* **119**, 1153 (1960).
- [64] Singwi K.S. et Tosi M.P. *Solid State Physics*.
- [65] François Lemay. *Des propriétés de l'état normal du modèle de Hubbard bidimensionnel*. Thèse de Doctorat, Université de Sherbrooke, (2000).
- [66] V. Hankevych, B. Kyung, et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **68**, 214405 (2003).
- [67] David Sénéchal et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126401 (2004).
- [68] Y.M. Vilks Anne-Marie Daré et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **53**, 14236 (1996).
- [69] H.J. Schulz. *Phys. Rev. L.* **64**, 1445 (1990).
- [70] Pierre Bénard et Liang Chen. *Phys. Rev. B* **52**, 1152 (1995).
- [71] Sergey Pankov, Serge Florens, Antoine Georges, Gabriel Kotliar, et Subir Sachdev. *Phys. Rev. B* **69**, 054426 (2004).
- [72] S. Allen, A.-M. Tremblay, et Y. M. Vilks. *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*. édition par D. Sénéchal and C. Bourbonnais and A.-M. Tremblay, CRM Series in Mathematical Physics, Springer, (2003).
- [73] Y. Onose, Y. Taguchi, K. Ishizaka, et Y. Tokura. *Phys. Rev. B* **69**, 24504 (2004).
- [74] R.S. Markiewicz, S. Sahrakorpi, M. Lindroos, Hsin Lin, et A. Bansil. *Phys. Rev. B* **72**, 54519 (2005).

- [75] D. Sénéchal et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126401 (2004).
- [76] Shigeki Onoda et Masatoshi Imada. *Phys. Rev. B* **67**, 161102 (2003).
- [77] Hisatoshi Yokoyama, Masao Ogata, et Yukio Tanaka. *Journal of the Physical Society of Japan* **75**, 114706 (2006).
- [78] Charles Brillon. Mémoire de Maîtrise, Université de Sherbrooke, (2007).
- [79] F. Reif. *Fundamentals of statistical and thermal physics, p.307*. Mc-Graw Hill Series in Fundamentals of physics, (1965).
- [80] Angela Kopp et Sudip Chakravarty. *Nature Physics* **1**, 53 (2005).
- [81] Gilbert G. Lonzarich. *Nature Physics* **1**, 11 (2005).
- [82] W. Hofstetter et D. Vollhardt. *Ann. Physik* **7**, 48 (1998).
- [83] Bumsoo Kyung, Jean-Sébastien Landry, et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **68**, 174502 (2003).
- [84] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams, et A. E. Ruckenstein. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1996 (1989).
- [85] B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau, A. Cassanho, C. Y. Chen, M. Greven, M. A. Kaster, A. Aharony, Y. Endoh, R. W. Erwin, et G. Shirane. *Phys. Rev. B* **46**, 14034 (1992).
- [86] Dominic Bergeron. Thèse de Doctorat.
- [87] A. Zimmers, J.M. Tomczak, R.P.S. M. Lobo, N. Bontemps, C.P. Hill, M.C. Barr, Y. Barr, Y. Dagan, R. L. Greene, A. J. Millis, et C.C. Homes. *Europhys. Lett.* **70**, 225 (2005).
- [88] Y. Dagan, M.M. Qazilbash, C. P. Hill, V.N. Kulkarni, et R. L. Greene. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 167001 (2004).
- [89] Y. Dagan, M. C. Barr, W. M. Fisher, R. Beck, T. Dhakal, A. Biswas, et R. L. Greene. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057005 (2005).
- [90] Pengcheng Li, K. Behnia, et R. L. Greene. *Phys. Rev. B* **75**, 020506 (2007).
- [91] W. Yu, J. S. Higgins, P. Bach, et R. L. Greene. *cond-mat* , 0705.4489 (2007).
- [92] Bumsoo Kyung, Jean-Sébastien Landry, et A.-M.S. Tremblay. *Phys. Rev. B* **68**, 174502 (2003).
- [93] Daniel Zwillinger. *Standard Mathematical Tables and Formulae*, chapter 8, 776. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, Florida (2003).