



**HAL**  
open science

# Sur les fluctuations de phase et d'amplitude dans les supraconducteurs avec appariement précurseur

Lorenzo Tripodi

► **To cite this version:**

Lorenzo Tripodi. Sur les fluctuations de phase et d'amplitude dans les supraconducteurs avec appariement précurseur. Matière Condensée [cond-mat]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2002. Français. NNT: . tel-00004246

**HAL Id: tel-00004246**

**<https://theses.hal.science/tel-00004246>**

Submitted on 21 Jan 2004

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1  
SCIENCES ET GÉOGRAPHIE**

**THÈSE**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER**  
**Discipline : Physique**

présentée et soutenue publiquement par

**Lorenzo TRIPODI**

le 25 octobre 2002

**SUR LES FLUCTUATIONS DE PHASE ET D'AMPLITUDE  
DANS LES SUPRACONDUCTEURS AVEC  
APPARIEMENT PRÉCURSEUR**

Composition du jury :

M. R. Maynard, Président  
M. J. Ranninger, Directeur de thèse  
M. P. Schuck, Rapporteur  
M. P. Pfeuty, Rapporteur  
M. H. Godfrin, Examineur

Thèse préparée au sein du **Centre de Recherche sur les Très Basses Températures**  
CNRS-Grenoble



# Remerciements

Je tiens à remercier sincèrement toutes les personnes qui ont permis la réalisation de ce travail qui s'est déroulé au Centre de Recherches sur les Très Basses Températures de Grenoble.

Tout d'abord je voudrais remercier B. Hebral, ex directeur du laboratoire, pour son soutien et son accueil et H. Godfrin, directeur actuel du CRTBT, qui a bien voulu accepter de faire partie du jury de cette thèse. C'est grâce à M. Rasetti, professeur au Politecnico di Torino, que je remercie vivement, que j'ai pu connaître le CRTBT et établir la démarche pour y travailler.

Ce travail n'aurait pas pu être réalisé sans le support de R. Maynard, professeur de l'Université Joseph Fourier, G. Chouteau, chargé de mission aux études doctorales et B. Fourcade, ex directeur de l'école doctorale de physique qui ont cru en mes capacités et qui ont fait confiance, au moment de défendre mon dossier pour obtenir une bourse, à l'équipe qui devait m'accueillir. À eux vont toute ma gratitude et ma sympathie.

Je remercie les rapporteurs P. Schuck et P. Pfeuty pour avoir accepté de juger mon travail et merci encore à R. Maynard pour avoir bien voulu être le Président du Jury.

Je remercie vivement mon directeur de thèse J. Ranninger pour tout ce qu'il a fait pour moi au cours de ces dernières années et pour le soutien apporté à mon dossier de bourse pour me donner la possibilité de travailler avec lui. Je lui suis reconnaissant pour tout le temps qu'il m'a consacré pour discuter les détails de ce travail. J'ai appris de lui une grande quantité de "trucs" en physique qu'on peut rarement apprendre dans les livres. C'est une chance que j'ai appréciée.

Je remercie aussi B. Chakraverty pour les nombreuses discussions que j'ai eues avec lui et pour ses conseils avisés. C'est à travers lui que j'ai pu recevoir pendant ces années une certaine dose de philosophie orientale qui restera associée de manière indélébile avec mon expérience à Grenoble.

Un remerciement va encore à tous les visiteurs de notre groupe et spécialement à T. Domanski et G. Jackeli, non seulement pour l'aide qu'ils m'ont apportée au début

de mon travail pour découvrir des techniques sophistiquées en physique théorique et calcul numérique, mais aussi pour la possibilité qu'ils m'ont donnée de voyager et de connaître leur pays sans bouger de Grenoble.

Je tiens également à remercier J.C. Anglès D'Auriac, P. Butaud, B. Maire-Amiot et G. Vermeulen avec lesquels j'ai eu de nombreuses discussions en informatique et K. Matho pour ses suggestions sur les continuations analytiques.

De façon plus générale, je remercie tous les membres du CRTBT pour leur sympathie et pour leur cordialité. Un grand merci à tous les membres de l'Association des Doctorants et Docteurs en Physique de Grenoble qui ont participé, avec moi, à la création de cette association qui m'a tant apporté et qui, je l'espère vivement, apportera quelque chose aussi aux futurs étudiants de l'école doctorale de physique.

Je remercie particulièrement Julie Verleyen pour sa présence, ses encouragements et son support dans les moments difficiles. Son aide en français et le temps qu'elle a consacré à la correction de ce manuscrit, ont été précieux au cours de la rédaction de ce dernier.

Un remerciement spécial va à mes parents et à ma soeur. La confiance et le soutien qu'ils m'ont toujours démontrés ont été essentiels pendant les trois ans de travail sur cette thèse. Un grand merci pour tout.

# Table des matières

<b>1. Introduction</b>	<b>7</b>
<b>2. Le modèle Boson-Fermion : généralités</b>	<b>15</b>
2.1. Polarons et bipolarons . . . . .	15
2.2. L'hamiltonien du modèle . . . . .	18
2.3. Résumé des principaux résultats dûs au BFM . . . . .	22
2.4. Étude du BFM par la technique des fonctions de Green avec des opérateurs de pseudospin . . . . .	24
2.4.1. Calcul des équations du système . . . . .	25
2.4.2. Solutions des équations . . . . .	28
2.4.3. Le modèle XY sur deux sites . . . . .	31
2.5. Conclusion . . . . .	32
<b>3. Effet de coeur dur dans le BFM</b>	<b>35</b>
3.1. La symétrie particule-trou . . . . .	35
3.2. Densité d'états fermioniques du BFM . . . . .	38
3.2.1. Comparaison avec la limite atomique . . . . .	44
3.3. Densité des particules . . . . .	47
3.3.1. Densité par site . . . . .	47
3.3.2. Nombres d'occupation . . . . .	53
3.4. Température d'ouverture du pseudogap $T^*$ . . . . .	56
3.5. Conclusion . . . . .	57
<b>4. Étude des Propriétés Spectrales</b>	<b>59</b>
4.1. Mécanisme de dopage . . . . .	59
4.2. Fonctions spectrales . . . . .	61
4.2.1. Étude des fonctions spectrales bosoniques . . . . .	62
4.2.2. Masse effective des bosons . . . . .	63

4.3.	Propagateur des cooperons . . . . .	68
4.3.1.	Fluctuation de phase et d'amplitude . . . . .	71
4.4.	Détermination du diagramme de phase . . . . .	74
4.4.1.	Rigidité de phase . . . . .	75
4.4.2.	Calcul de champ moyen . . . . .	79
4.4.3.	Effet du pseudogap sur la température $T_c^{MF}$ . . . . .	81
4.5.	Densité d'états bosonique . . . . .	82
4.6.	Chaleur spécifique et entropie . . . . .	82
4.7.	Conclusion . . . . .	88
<b>5.</b>	<b>Conclusion générale</b>	<b>89</b>
<b>A.</b>	<b>Développement en cumulants des fonctions de Green</b>	<b>91</b>
A.1.	Méthode de développement en cumulants : généralités . . . . .	91
A.1.1.	Le théorème de Wick pour les opérateurs de spin . . . . .	93
A.1.2.	Représentation graphique . . . . .	97
A.2.	Méthode de développement en cumulants : application au BFM . . . . .	99
A.2.1.	Calcul de la fonction de Green fermionique . . . . .	99
A.2.2.	Calcul de la fonction de Green bosonique . . . . .	104
A.2.3.	Resommation des diagrammes . . . . .	105
A.2.4.	Fonction spectrale pour les bosons de coeur dur . . . . .	108
A.3.	Calcul du propagateur des Cooperons . . . . .	112
<b>B.</b>	<b>Calculs Numériques</b>	<b>115</b>
B.1.	Solution des équations intégrales du BFM . . . . .	115
B.1.1.	Description de l'algorithme . . . . .	115
B.1.2.	Calcul des self-énergies . . . . .	117
B.1.3.	Calcul des fonctions non habillées et des densités des particules . . . . .	118
B.1.4.	Continuations analytiques . . . . .	124
B.2.	Calcul de la chaleur spécifique . . . . .	126
B.2.1.	Calcul de $C_V$ pour un gaz de bosons et fermions sans interaction . . . . .	128
<b>C.</b>	<b>Le modèle XY sur deux sites</b>	<b>129</b>

# 1. Introduction

La découverte de la supraconductivité à haute température critique en 1986 [?], a été à l'origine d'un effort de recherche considérable, dans le domaine expérimental ainsi que dans celui théorique. En ce qui concerne la recherche fondamentale, ce phénomène promettait une vraie révolution, car la physique en jeu était très différente de celle des métaux et, pour en comprendre les mécanismes, toute une nouvelle théorie restait à inventer. En même temps, dans le domaine de l'application, la possibilité d'obtenir la supraconductivité en refroidissant en-dessous de la température de l'azote liquide au lieu de celle de l'hélium permettait d'imaginer une vaste commercialisation des dispositifs basés sur ces nouveaux matériaux supraconducteurs. Plus de quinze ans après cette découverte, ce phénomène reste un défi pour les physiciens et une source de propositions de nouveaux concepts en physique du solide. Les supraconducteurs à haute température critique (HTSC) ont trouvé une large application dans les domaines de la technologie avancée. Les filtres à micro-ondes basés sur les HTSC sont largement utilisés dans les stations d'émission pour la téléphonie mobile [?] et les multiplexeurs semblent être très indiqués dans le domaine spatial grâce à leurs poids et volume réduits [?]. Dans le domaine de l'imagerie médicale, les supraconducteurs en général et le SQUID en particulier, améliorent de façon considérable les performances des instruments et sont souvent aujourd'hui jugés indispensables. Les circuits numériques basés sur la RSFQ-logic (rapid single flux quantum logic) ont déjà démontré au niveau expérimental la possibilité d'obtenir des circuits logiques fonctionnant à 100 GHz, c'est-à-dire presque 100 fois plus rapidement que leur contrepartie sur silicium [?].

Les HTSC ont tous une structure similaire formée par des parties diélectriques séparées par des plans de cuivre et d'oxygène caractérisés par une physique largement bi-dimensionnelle à cause du faible couplage existant entre ces plans. Le diagramme de phase schématique des supraconducteurs à haute température critique (figure 1.1) montre la grande variété de comportement que manifestent ces matériaux. Pour de basses valeurs de dopage et de température, les plans  $CuO_2$  sont dans un état isolant

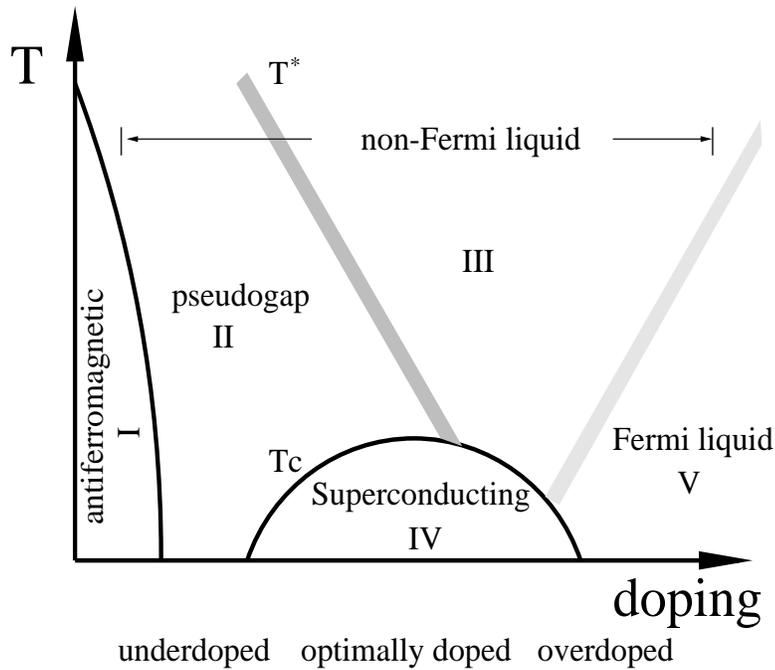


FIG. 1.1. – Diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique (HTSC). La température  $T^*$  ne représente pas une transition de phase, mais plutôt un cross-over.

antiferromagnétique à cause de l'interaction d'échange entre les électrons sur des sites de cuivre proches voisins (région I). En augmentant le dopage, on passe à un état caractérisé par un pseudogap (une diminution de la densité d'états autour du potentiel chimique) et par des propriétés qui se distinguent nettement de celles d'un liquide de Fermi ; la température caractéristique  $T^*$  indique le passage graduel de cet état (région II) à un état où le pseudogap est absent mais où les propriétés restent différentes de celle du liquide de Fermi (région III). La partie où le matériau est supraconducteur est délimitée par une transition de phase à la température  $T_c$  (région IV). Enfin, pour des dopages très élevés le système semble devenir un liquide de Fermi standard (région V). Nous pouvons reconnaître un dopage optimal où la température critique  $T_c$  est maximale ; en-dessous on parle de sous-dopage et au-dessus de sur-dopage. Ce diagramme de phase est très différent de celui des supraconducteurs à basse température critique (LTSC) pour plusieurs raisons. Dans les LTSC, la température critique  $T_c$  sépare la phase supraconductrice, caractérisée par l'expulsion du champ magnétique (effet Meissner) et par l'ouverture d'un gap dans la densité d'états (DOS), d'une phase où le matériau se comporte comme un liquide de Fermi. De plus, la température  $T_c$  varie très peu avec la concentration des porteurs à cause du fait qu'elle est déterminée

par la DOS au niveau de Fermi qui, en général, ne change pas trop avec le dopage. Aujourd'hui il semble clair que le mécanisme BCS n'est pas suffisant pour expliquer cette énorme différence de comportement et de plus, le pseudogap devient la clé de la compréhension de la physique sous-jacente.

Le fait que le diagramme de phase ait clairement montré un état antiferromagnétique et isolant proche d'un état supraconducteur caractérisé par des températures critiques très élevées, a suggéré l'idée, sur laquelle une grande partie de la recherche théorique s'est ensuite concentrée, que les corrélations magnétiques ou, plus généralement, les corrélations électroniques sont à la base du mécanisme microscopique de la phase supraconductrice. Le défi pour les chercheurs était principalement de découvrir un mécanisme d'appariement électronique dans un système où il y a une répulsion intrinsèque entre les porteurs de charge. Les résultats les plus populaires de ces efforts théoriques sont le scénario RVB [?] et le modèle t-J (pour une revue voir [?]). Ces travaux étaient motivés par l'observation expérimentale, par NMR [?, ?] et par diffusion de neutrons [?], de ce qu'on a ensuite appelé le *spin gap*. En 1996, la résolution des techniques de photo-émission résolues en angle a été suffisante pour vérifier l'existence d'un pseudogap de charge dans la structure électronique de la phase normale au-dessus de  $T_c$  [?, ?]. Ces vérifications expérimentales du phénomène du pseudogap de charge, prévu sur une base purement théorique auparavant [?], ont changé de façon importante la direction des recherches, en déplaçant l'attention vers une explication du pseudogap au-dessus de la température critique basée sur un appariement électronique précurseur de la phase superfluide. Le phénomène du pseudogap dans la phase dite normale de ces matériaux pose un problème théorique qui va bien au-delà de la question des HTSC et concerne un nouvel état métallique qui n'est pas caractérisé par les propriétés du liquide de Fermi standard. Plusieurs tentatives ont été réalisées pour expliquer microscopiquement ce type d'appariement sur la base d'un point critique quantique, vu comme l'extrémité d'une ligne critique d'une instabilité thermodynamique liée à un ordre caché lié à son tour aux inhomogénéités du système et en compétition avec l'ordre supraconducteur [?]. Des propositions très discutées de cet ordre sont celles d'ordre dynamique de spin à courte portée [?] et celle d'ordre de charge combiné avec des déformations du réseau [?], éventuellement induits par une transition topologique électronique impliquant des changements qualitatifs dans la surface de Fermi [?].

Récemment, une proposition concrète d'une expérience pour vérifier l'une des théories qui appartient à ce groupe a été faite [?]. À la base de cette théorie (dite du liquide marginal de Fermi [?]) se trouve l'hypothèse selon laquelle la self-énergie de la fonction de Green  $G(k, \omega)$  est presque indépendante de l'impulsion  $k$  et est proportionnelle à la

quantité la plus grande entre la température  $T$  et le module de la fréquence  $|\omega|$ . Cette simple hypothèse permet d'expliquer plusieurs propriétés de la région III et prévoit que, près du point critique quantique, la maille élémentaire dans les plans  $ab$  se divise en quatre *plaquettes* où circulent des courants en directions alternativement opposées. Pour confirmer cette idée, l'utilisation de la technique de photo-émission ARPES avec de la lumière polarisée circulairement est envisagée.

À part cette tentative semi-phénoménologique pour comprendre le phénomène des HTSC et les scénarios purement microscopiques mentionnés plus haut (RVB, t-J), il y avait aussi, dès que les cuprates ont été découverts, plusieurs descriptions phénoménologiques de la phase pseudogap en termes d'un appariement précurseur lié, dans le cadre de ces théories, à un *cross-over* entre un état BCS de paires de Cooper et un état superfluide de paires électroniques préformées.

Essentiellement deux modèles phénoménologiques liés à ces théories ont été étudiés en détail :

- le modèle de Hubbard attractif, où l'appariement électronique est induit par une interaction locale attractive d'origine indéfinie dans le régime d'un couplage intermédiaire ou fort (pour une revue voir [?])
- le modèle Boson-Fermion (BFM), où l'appariement électronique est induit par le couplage des électrons avec des déformations locales du réseau. La proposition du modèle [?] découle directement du concept de supraconductivité bipolaronique proposé auparavant [?] qui s'applique dans le régime anti-adiabatique avec couplage très fort mais qui, jusqu'à présent, n'a pas été vérifié expérimentalement et n'est sûrement pas applicable dans le cas des HTSC [?].

La complexité d'un scénario où des états résonants à deux particules sont les précurseurs d'un ordre de phase à basse température (comme la phase supraconductrice dans les HTSC), réside dans la transition vers cet état qui implique une interférence mutuelle entre la formation locale de paires, qui caractérise l'état pseudogap et l'appariement délocalisé sous la forme de paires de Cooper qui caractérise la phase supraconductrice. Plusieurs études expérimentales montrent clairement cette interférence qui présente une compétition entre fluctuation de phase et d'amplitude du paramètre d'ordre :

- la conductivité optique à fréquences de l'ordre du THz montre, à des températures plus élevées de quelques dizaines de degrés que  $T_c$ , qu'une expulsion du champ magnétique est encore évidente sous la forme d'un effet Meissner transitoire [?]. Ce phénomène a été considéré comme la manifestation de fluctuations diamagnétiques qui ont été attribuées à leur tour autant à la présence de vortex diffusifs avec des temps de vie longs [?], qu'à des régions diamagnétiques

dé-corrélées en phase qui anticipent le vrai effet Meissner présent en-dessous de  $T_c$  [?]. D'autres expériences, qui montrent une augmentation de la conductance tunnel dans la phase pseudogap et qui s'appuient sur la théorie des réflexions d'Andreev, indiquent la possible existence d'un appariement dé-corrélé en phase au-dessus de  $T_c$  [?, ?].

- l'appariement électronique local, présent dans la phase pseudogap et mis en évidence par des mesures de réponse optique le long de l'axe  $c$  (orthogonal aux plans  $CuO_2$  dits aussi plans  $ab$ ), est encore visible dans la phase supraconductrice [?]. De même, en rentrant dans la phase supraconductrice, la composante le long de l'axe  $c$  de l'énergie cinétique est réduite si l'état normal montre un pseudogap [?]. Le fait que la dépendance en dopage de la longueur de pénétration le long de l'axe  $c$  est qualitativement similaire à celle dans les plans  $ab$  suggère que toute les deux sont fortement influencées par les caractéristiques du pseudogap de la phase normale [?]. Des mesures tunnels indiquent aussi qu'un résidu du pseudogap coexiste avec le gap supraconducteur en-dessous de la température  $T_c$  [?].

Ces résultats suggèrent l'hypothèse séduisante, mais à l'origine d'un long débat encore en cours, que le pseudogap et le gap sont deux manifestations différentes d'un même mécanisme d'appariement [?, ?].

Pour toutes les raisons données jusqu'ici, dans les différentes théories des HTSC on a essayé d'extraire les caractéristiques des fluctuations de phase dans des systèmes fermioniques avec de fortes résonances à deux particules. Le point de départ usuel pour ce type d'étude est de décrire cette situation par un hamiltonien décrivant les fluctuations de phase d'un superfluide en utilisant une formulation hydrodynamique pour les variations de la phase et de la densité superfluide  $n_s$ . L'hamiltonien effectif est [?, ?] :

$$H = \frac{1}{2}D_\phi (\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2\chi n_s^2} (\delta n_s)^2$$

où  $D_\phi = \hbar \frac{n_s}{m_s}$  est la rigidité de la phase superfluide,  $\chi$  la compressibilité et  $m_s$  la masse des porteurs de charges superfluides. La température qui contrôle l'ordre de la phase dans un tel système est donnée par  $k_B T_\phi \simeq D_\phi a$ , avec  $a$  égal à la longueur de cohérence  $\xi$  dans les systèmes tridimensionnels ou égal à la distance entre les plans dans les HTSC. Comme nous l'avons déjà dit ci-dessus, le scénario des fluctuations de phase est souvent discuté dans le cadre d'un cross-over BCS-BEC [?], où, en fonction de

l'attraction entre particules, on passe d'un état de type BCS pour de faibles attractions à une condensation de Bose-Einstein (BEC) des particules liées pour des attractions fortes. Ce type de physique a été largement étudié dans le cadre du modèle de Hubbard attractif sur réseau dont l'hamiltonien est :

$$H = -t \sum_{i,j;\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. - |U| \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} + \mu \sum_{i;\sigma} n_{i\sigma}. \quad (1.1)$$

$t$  représente le terme de saut électronique entre sites proches voisins et  $|U|$  l'attraction sur site. En introduisant *ad hoc* la variation du paramètre  $U$ , on peut obtenir un diagramme de phase (voir la figure 1.2) similaire à celui des supraconducteurs à haute température critique avec, pour de faibles couplages, la température  $T^*$  de formation de paires qui augmente en fonction de  $|U|$  [?]; dans la limite  $|U|/t \ll 1$  la physique est essentiellement celle décrite par le modèle BCS et la température de création des paires  $T^*$  est égale à la température  $T_c$  où la phase est bloquée. Dans la limite opposée  $|U|/t \gg 1$  par contre, l'état fondamental est un condensat de bosons de coeur dur qui, à températures plus grandes que  $T_c$ , se transforme en liquide de Bose normal formé par des paires fortement liées. À la température beaucoup plus élevée  $T^*$  seulement, ces paires se dissocieront. Des études de type Monte Carlo quantique appliquées à l'hamiltonien 1.1 dans le domaine de couplage intermédiaire [?, ?, ?], ont permis non seulement d'analyser la phase pseudogap, mais aussi de vérifier le comportement de non-liquide de Fermi de certaines quantités physiques telles que la susceptibilité de spin et le taux de relaxation NMR. D'autres études [?, ?] montrent que, contrairement à ce qui arrive dans le diagramme de phase en fonction du couplage, les températures  $T_c$  et  $T^*$  varient dans la même direction en fonction du dopage. Cette situation, clairement opposée à celle de la réalité expérimentale des HTSC, ne peut pas être corrigée par d'éventuels changements de dimensionnalité liés au passage de matériaux sous-dopés à d'autres sur-dopés, car la  $T^*$  est essentiellement déterminée par la physique au niveau local et elle est donc indépendante de tout aspect dimensionnel. Par ailleurs, en ce qui concerne  $T_c$ , même en imaginant un passage, dans le domaine de sous-dopage, à une physique de type Kosterlitz-Thouless avec une température de transition  $T_c \sim T_{KT}$ , le comportement de cette dernière suivrait quand même celui de  $T^*$  [?, ?]. De là, on déduit que les effets de corrélation sont indispensables pour déterminer la dépendance en dopage des deux températures  $T^*$  et  $T_c$ .

Nous explorerons tout au long de la thèse ces effets des corrélations, sur la base du modèle boson-fermion (BFM) qui décrit un scénario de paires électroniques localisées

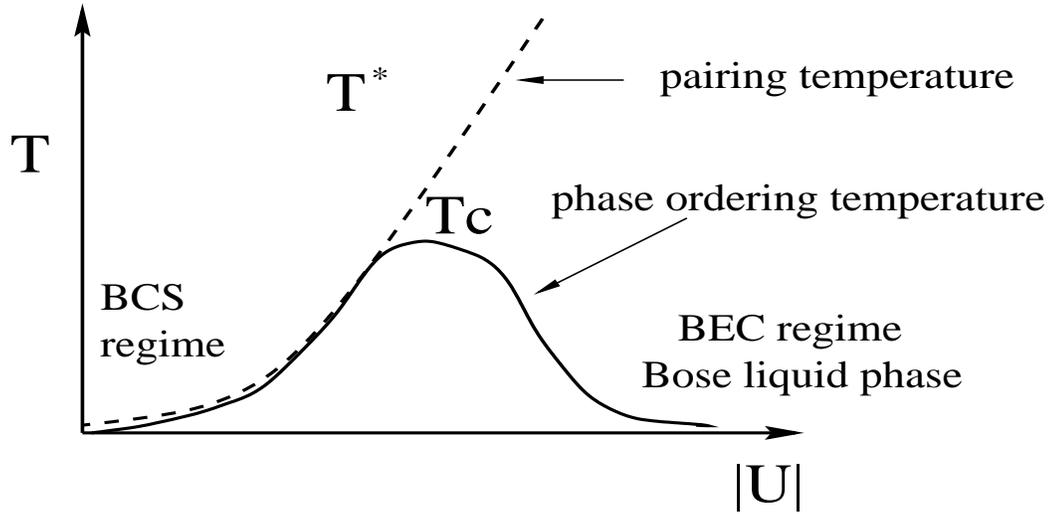


FIG. 1.2. – Diagramme de phase du modèle de Hubbard attractif (figure adaptée de réf. [?])

en interaction d'échange avec des électrons libres. Grâce à cette interaction, les paires localisées, qui ont une nature de boson de coeur dur, deviennent itinérantes et induisent un appariement dans le sous-système électronique correspondant à la formation de Cooperons. Ces paires de Cooper avec impulsion finie ainsi formées ont la possibilité, en étant bosons, de condenser et de former une phase supraconductrice contrôlée (comme on le verra) par le spectre d'excitation des cooperons itinérants plus que par leur dissociation.

Le BFM a des similitudes avec le modèle de Hubbard attractif dans le sens qu'il peut être vu comme un système à deux fluides de paires pré-formées et d'électrons non-appariés [?]. Les états des paires pré-formées ont des caractéristiques qui rappellent celles des états résonnants des impuretés qu'on voit dans les HTSC en remplaçant les atomes de *Cu* avec des atomes non magnétiques tels que *Zn*.

Dans le chapitre suivant, nous décrirons plus en détails le modèle Boson-Fermion, en résumant les principaux résultats qu'il a permis d'obtenir. Nous discuterons précisément (en partie dans le texte principal et en partie dans les appendices) la technique de développement en diagrammes de Feynman qui nous a permis d'étudier le BFM en fonction du dopage. Ce dernier point était l'objectif central de la thèse car, par rapport aux études précédentes, il nous permettait de vérifier l'importance des corrélations de coeur dur des paires pré-formées. En appliquant la technique diagrammatique nous avons déterminé les équations auto-cohérentes qui gèrent le système de bosons et fermions en interaction. Les résultats de la solution numérique des équations sont reportées dans le chapitre 3 où nous comparons le comportement du BFM aux

résultats obtenus par des études précédant la nôtre. Les résultats présentés dans le chapitre 4 ont pour but d'éclaircir le mécanisme microscopique à la base de la phase pseudogap. Nous avons pu déterminer le diagramme de phase qui s'est révélé être en bon accord avec la réalité expérimentale des HTSC. Le scénario des fluctuations de phase est invoqué, mais nous lui apportons une justification nouvelle par rapport à celle déjà proposée dans la littérature.

## 2. Le modèle Boson-Fermion : généralités

Dans ce chapitre nous introduisons le modèle Boson-Fermion (BFM) et la technique utilisée pour l'étudier.

Avant d'illustrer l'hamiltonien du système, nous expliquons le concept de bipolaron qui, historiquement, a joué un rôle essentiel pour le développement de l'idée qui est à la base de ce modèle.

Pour décrire le contexte dans lequel notre étude évolue, nous résumons ensuite brièvement les résultats les plus importants que le BFM a permis d'obtenir. À partir de ceux-ci, nous montrons pourquoi notre étude, basée sur une technique de développement des fonctions de Green assez différente de celle traditionnelle utilisée pour les bosons et les fermions, était nécessaire et comment elle pouvait enrichir l'ensemble des résultats déjà obtenus.

Dans la dernière partie du chapitre, nous exposons les lignes générales de la méthode de développement en question en laissant les détails plus techniques pour l'appendice.

### 2.1. Polarons et bipolarons

Un polaron est une quasi-particule constituée par un électron et par la déformation du réseau qui l'entoure due à l'interaction électron-phonon. Selon le type de solide ou, plus précisément, selon la nature de l'interaction, nous distinguons deux types de ces quasi-particules : les *polarons de Fröhlich*, dans le cas d'interaction à longue portée et les *petits polarons* dans le cas d'interaction à courte portée.

Un polaron de Fröhlich est aussi dit *grand polaron* car la déformation est étendue à plusieurs sites du réseau. Cela a permis à Fröhlich de formuler un hamiltonien  $H_{Fr}$  pour les polarons, qui néglige la structure atomique du solide. De nombreuses études

effectuées à partir des années cinquante ont permis de déterminer, grâce à  $H_{Fr}$ , l'énergie de l'état fondamental et la masse efficace des grands polarons en fonction de la constante de Fröhlich  $\alpha$  (voir [?] pour un résumé de ces résultats).

Les petits polarons sont par contre constitués d'une déformation locale du réseau limitée à une seule ou à un très petit nombre de mailles élémentaires. Dans ces cas d'interaction faible à courte portée, les configurations correspondant aux polarons localisés ne sont plus stables et se recouvrent avec des états d'électrons itinérants et sans interaction avec le réseau. Ces entités de charge sont piégées par la barrière de potentiel due à la déformation du réseau et peuvent se libérer par activation thermique ou par effet tunnel en générant d'amples oscillations du réseau autour d'eux. Les électrons ainsi devenus libres peuvent se propager dans le solide tant qu'ils ne sont pas à nouveau piégés.

D'un point de vue expérimental, la présence de polarons semble être bien vérifiée dans plusieurs matériaux comme KCl, LiF, NiO, MnO et d'autres encore. En particulier, dans le composé  $WO_{3-x}$ , une transition de phase entre un état à bas dopage, caractérisé par une conductivité activée thermiquement (hopping conductivity), et un autre état, à dopage élevé, caractérisé par une conductivité métallique, a été imputée à la nature polaronique du solide en question. Pour de basses densités des porteurs de charges, on a la formation de petits polarons qui peuvent contribuer à la conductivité grâce aux processus de saut uniquement ; cependant, en augmentant la densité, quand tous les sites où des polarons peuvent être formés sont occupés, une augmentation ultérieure du dopage génère un autre type de porteur de charge. En effet, quand le nombre de polarons est suffisamment élevé, la déformation du réseau qui constitue un polaron dans un site va se superposer à la déformation du réseau du polaron dans un site voisin en créant ainsi des polarons de Fröhlich qui sont caractérisés par une conductivité métallique [?, ?].

Une description théorique, devenue ensuite une approche standard des petits polarons, a été développée par Holstein en 1959 [?]. L'hamiltonien du système est le suivant :

$$\begin{aligned}
 H = & (D - \mu) \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - t \sum_{i \neq j, \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\
 & - \bar{\alpha} \hbar \omega_0 \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} (a_i + a_i^+) + \sum_i \hbar \omega_0 \left( a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned}$$

où  $c_{i\sigma}^{(+)}$  indique l'opérateur fermionique d'annihilation (création) d'un électron de spin

$\sigma$  dans le site  $i$ . Ce dernier doit être vu comme un site effectif qui peut être constitué par un ensemble d'atomes ou de molécules.  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  est l'opérateur de densité des électrons et  $a_i^{(+)}$  indique l'opérateur d'annihilation (création) des phonons, lié à la déformation locale du réseau  $X_i = \frac{(a_i + a_i^\dagger)}{\sqrt{2M\omega_0\hbar^{-1}}}$  où  $M$  indique la masse atomique effective du site  $i$  et  $\omega_0$  la fréquence des déformations locales.  $t$  représente l'intégrale de saut et, en indiquant avec  $z$  le nombre de proches voisins du site  $i$  dans le réseau,  $D = tz$  est la moitié de la bande électronique. L'interaction entre les électrons et les phonons est  $\bar{\alpha}$  alors que  $U$  est la répulsion coulombienne effective entre les électrons dans les sites effectifs.  $\mu$  est le potentiel chimique. Comme cela l'a déjà été mentionné, les charges décrites par cet hamiltonien peuvent être libres ou piégées. Dans ce dernier cas, la partie locale de  $H$  peut être transformée par une redéfinition des opérateurs bosoniques :  $a_i^{(+)} \rightarrow a_i^{(+)} + \bar{\alpha}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})$  et devenir :

$$H_{loc} = (D - \mu - \varepsilon_p) \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - (2\varepsilon_p - U) \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_i \hbar\omega_0 \left( a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) \quad (2.1)$$

où  $\varepsilon_p = \bar{\alpha}^2 \hbar\omega_0$  représente l'énergie gagnée par le système en formant un polaron. Cette forme de l'hamiltonien est particulièrement intéressante car elle nous permet de mettre en évidence la possibilité que les polarons ont de former des paires spatialement proches. En effet, si l'interaction électron-phonon  $\bar{\alpha}$  est suffisamment élevée par rapport à l'interaction coulombienne tel que  $(2\varepsilon_p - U) > 0$ , le système peut encore gagner de l'énergie par rapport à l'état polaronique en formant des bipolarons, des quasi-particules décrites par l'opérateur :

$$\rho_i^+ X_i^+ \equiv c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger e^{-2\bar{\alpha}(a_i - a_i^\dagger)}$$

et formées par deux électrons plus la déformation du réseau qui les entoure et les piège. Plus généralement, les deux électrons peuvent être piégés sur deux sites différents et former un état triplet ou singulet. Les bipolarons décrits par cette formulation où l'interaction électron-phonon est locale sont de *petits bipolarons*, mais on a spéculé aussi sur l'existence de *bipolarons de Fröhlich* décrits par un hamiltonien dans la limite continue. En effet, les grandes constantes de couplage électron-phonon nécessaires pour la formation de bipolarons de Fröhlich rendent plutôt difficile la présence de ces quasi-particules dans des matériaux réels, même si dans une structure bidimensionnelle des constantes moins élevées suffiraient [?]. Par contre, l'existence de petits bipolarons est

bien établie d'un point de vue expérimental dans les systèmes  $Ti_4O_7$  [?],  $Na_xV_2O_5$  [?],  $WO_{3-x}$  [?] déjà cité et les semi-conducteurs amorphes.

C'est sur la base de ces confirmations expérimentales que, au début des années quatre-vingt, Alexandrov et Ranninger ont imaginé la possibilité que ces paires électroniques, étant de nature bosonique, puissent être responsables d'une phase supraconductrice [?]. L'idée de base derrière cette supraconductivité bipolaronique est la suivante.

Quand la formation de bipolarons est possible et que ces derniers se trouvent à un niveau énergétique en-dessous de la bande des électrons libres du système, il est possible que les quasi-particules acquièrent une itinérance car elles peuvent être virtuellement excitées dans les états de la bande nue des électrons et ensuite se retransformer en bipolarons dans un autre site. En négligeant les processus phononiques générés durant le transfert de la charge d'un site à un autre, on peut calculer analytiquement par une transformation de Lang-Firsov le terme de saut effectif  $t^{**}$  des bipolarons [?, ?]. Les particules itinérantes ainsi obtenues peuvent condenser à basse température dans un état superfluide. Pour que cette situation soit réalisable dans des solides, il est nécessaire que la constante de couplage électron-phonon soit assez élevée [?]. Cette condition est jugée improbable dans la réalité expérimentale et avec d'autres contraintes [?], elle constitue un sérieux problème pour cette proposition.

## 2.2. L'hamiltonien du modèle

Pour résoudre les problèmes mentionnés à la fin du paragraphe précédent, J. Ranninger, en collaboration avec S. Robaszkiewicz, a proposé le modèle Boson-Fermion (BFM) où on considère une interaction électron-phonon intermédiaire. Dans ce cas, les bipolarons, qui dans l'idée originelle des auteurs étaient considérés plus comme des états résonnants que comme des états localisés, ont un niveau énergétique qui se trouve à l'intérieur de la bande des électrons du solide restés itinérants et non couplés au réseau. La situation est illustrée dans la figure 2.1 ; le niveau de remplissage de la bande fermionique dépend du potentiel chimique  $\mu$  : si  $\mu$  est beaucoup plus bas que le niveau des bipolarons  $\frac{\Delta_B}{2}$ , alors les électrons peuvent être virtuellement excités dans les états bipolaroniques et former, à basse température, une phase supraconductrice de type BCS. Si par contre  $\mu > \frac{\Delta_B}{2}$ , ce sont les bipolarons qui peuvent être virtuellement excités et acquérir de l'itinérance. Comme pour la supraconductivité bipolaronique, cette itinérance permet une condensation de Bose-Einstein. Entre ces deux cas extrêmes se trouve la physique la plus intéressante du BFM. Selon l'hypothèse de Ranninger et

Robaszkiewicz, dans le cas où le potentiel chimique  $\mu$  est légèrement en-dessous du niveau bipolaronique, la superposition des états fermioniques et bosoniques peut être décrite par un terme d'échange qui a la forme suivante :

$$\bar{v} \sum_i (\rho_i^+ X_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \rho_i^- X_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+)$$

où  $\bar{v}$  est une constante qui détermine l'importance de l'échange et où on suppose que les opérateurs bipolaroniques  $\rho_i^\pm X_i^\pm$  commutent avec les opérateurs fermioniques. Les opérateurs  $\rho_i^\pm$  ont des relations de commutation de type spin- $\frac{1}{2}$  :

$$\begin{aligned} [\rho_i^-, \rho_i^+] &= 2\rho_i^z \\ \{\rho_i^-, \rho_j^+\} &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

Sur la base de cette hypothèse et en partant de l'hamiltonien de Holstein, les auteurs ont donc proposé un hamiltonien apte à décrire ces systèmes où l'interaction électron-phonon rend stable la formation de bipolarons tout en permettant à certains électrons de rester libres. En laissant de côté pour le moment la partie cinétique des électrons libres, cet hamiltonien a la forme :

$$\begin{aligned} H_{at} &= \bar{v} \sum_i (\rho_i^+ X_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \rho_i^- X_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+) + \sum_i \hbar\omega_0 \left( a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right) + \\ &+ (-4\varepsilon_p + U - 2\mu) \sum_i \left( \rho_i^z + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

qui peut être réécrite par une transformation inverse de Lang-Firsov  $H_{at} \rightarrow D^+ H_{at} D$  avec  $D = e^{2\bar{\alpha}(a_i - a_i^+)(\rho_i^z + \frac{1}{2})}$ , ce qui donne (en rajoutant la partie d'énergie cinétique pour les fermions) :

$$\begin{aligned} H &= (\Delta_B - 2\mu) \sum_i \left( \rho_i^z + \frac{1}{2} \right) + \bar{v} \sum_i (\rho_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + \rho_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+) + \\ &- \hbar\omega_0 \alpha \sum_i \left( \rho_i^z + \frac{1}{2} \right) (a_i + a_i^+) + \sum_i \hbar\omega_0 \left( a_i^+ a_i + \frac{1}{2} \right) + \quad (2.2) \\ &+ (D - \mu) \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - t \sum_{i \neq j, \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + h.c.) \end{aligned}$$

où nous avons posé  $\Delta_B = U$  pour indiquer le niveau énergétique des bipolarons et  $\alpha = 2\bar{\alpha}$ . L'expression 2.2 est l'hamiltonien le plus général du BFM.

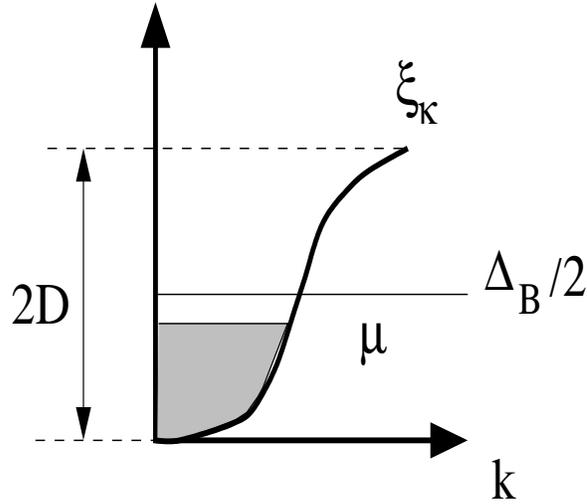


FIG. 2.1. – Dispersion des fermions et niveau énergétique des bipolarons. Ce dernier se trouve au milieu de la bande des électrons libres ;  $\mu$  indique le remplissage de la bande.

Pour notre étude, nous ne nous intéressons pas à la partie phononique de l'hamiltonien car nous nous concentrons sur l'interaction entre la charge des bipolarons, représentée par l'opérateur  $\rho_i^\pm$ , et les électrons. Pour cette raison, nous supposons que le nuage de phonons (lié à l'opérateur  $X_i^\pm$ ) qui forme le bipolaron suit sa charge électrique de façon rigide et donc peut être négligé car il n'affecte pas directement le comportement du système.

Avant de présenter l'hamiltonien dans cette approximation, en vue de l'application de la technique de développement en diagrammes de Feynman, nous introduisons les opérateurs de pseudo-spin définis de la façon suivante :

$$\begin{aligned} S_i^\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}}\rho_i^\pm \\ S_i^z &= \rho_i^z \\ [S_i^-, S_i^+] &= S_i^z \end{aligned}$$

Ce choix nous permettra d'avoir une algèbre plus simple tout au long de la thèse et ne compliquera pas la confrontation de nos résultats avec ceux déjà présents dans la littérature. Avec ces nouveaux opérateurs, notre hamiltonien devient :

$$\begin{aligned}
H = & (D - \mu) \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} - t \sum_{i \neq j, \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + h.c.) + \\
& + (\Delta_B - 2\mu) \sum_i \left( S_i^z + \frac{1}{2} \right) + v \sum_i (S_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+) \quad (2.3)
\end{aligned}$$

où on a posé  $v = \sqrt{2\bar{v}}$ . Il est important de remarquer que cet hamiltonien, bien que dérivé de l'expression 2.2 qui représente un gaz de fermions et bipolarons en interaction, peut être considéré dans un contexte plus large. En effet, les relations de commutation des opérateurs de pseudo-spin  $S^\pm$  nous disent que le gaz en interaction avec les fermions libres est, de manière tout à fait générale, un gaz de bosons de coeur dur (paires électroniques liées). Pour cette raison, un modèle du type BFM peut être utilisé pour étudier des problèmes qui ne sont pas directement liés aux bipolarons ou à la supraconductivité. En effet, des hamiltoniens similaires à (2.3) ont été formulés ou étudiés en physique nucléaire [?], pour décrire l'interaction d'échange entre les spinons et les holons dans un système RVB [?], et également pour décrire le problème d'appariement d'un trou et d'un électron dans un semiconducteur [?]. Très récemment le BFM a aussi été appliqué aux condensats de Bose-Einstein de gaz dilués d'atomes piégés [?].

En ce qui concerne notre but originel, nous étudierons un mélange de fermions et de paires électroniques pré-formées, sans rentrer dans le détail de la nature exacte de ces dernières ou du mécanisme qui porte à leur formation dans les cuprates (sauf quand nous décrivons le mécanisme de dopage dans les solides supraconducteurs). Certes, la proposition selon laquelle ces paires sont de nature bipolaronique reste séduisante, bien qu'elle ne soit pas encore confirmée expérimentalement<sup>1</sup>.

Dans notre étude, nous choisirons les paramètres du modèle qui nous permettent de décrire une physique proche de celle de la réalité expérimentale des cuprates ; les différentes quantités seront normalisées en fonction de la largeur de la bande électronique  $2D$  et nous choisirons : (i)  $\Delta_B = 1$  pour le niveau énergétique des bosons à coeur dur. Cela nous permet de travailler proche de la situation avec bande électronique demi pleine où le modèle a, comme on le verra dans les chapitres suivants, le comportement le plus intéressant, (ii)  $v = 0.1\sqrt{2}$  car cette constante donne des valeurs qui sont de l'ordre de 100 K pour la température d'ouverture du pseudogap  $T^*$ . Nous rappelons

---

<sup>1</sup>Nous rappelons néanmoins que des mesures de réflectivité ont mis en évidence dans les cuprates l'existence de charges itinérantes (responsables d'un pic de Drude) et de charges localisées (responsables d'un pic dans le régime de l'infrarouge lointain) [?].

qu'il y a un facteur de  $\sqrt{2}$  entre la constante de couplage  $v$  de l'hamiltonien (2.3) que nous utilisons dans ce travail et l'hamiltonien du BFM utilisé habituellement dans la littérature à cause de la définition de pseudospin que nous considérons. En ce qui concerne le potentiel chimique, sa valeur exacte sera fixée pour garantir la conservation de la charge totale ou pour étudier le système en fonction du remplissage. Nous nous intéressons principalement au régime avec  $\mu$  proche et inférieur à  $\frac{\Delta_B}{2}$ .

### 2.3. Résumé des principaux résultats dûs au BFM

Le BFM est un modèle phénoménologique relativement simple qui permet d'analyser certains aspects fondamentaux de la physique des supraconducteurs à haute température critique. Dans les années qui ont suivi son introduction, une série de travaux a permis de calculer un ensemble de caractéristiques physiques intéressantes et surtout de prévoir l'existence du pseudogap dans les cuprates [?].

Ce dernier phénomène est considéré, aujourd'hui, comme un point clé dans la compréhension de la physique des supraconducteurs à haute température critique. Comme cela l'a déjà été mentionné dans l'introduction, on peut vérifier expérimentalement que dans les HTSC, au contraire des LTSC, la phase supraconductrice est précédée, quand on baisse progressivement la température, d'une région délimitée par la température de cross-over  $T^*$  où les électrons commencent à s'apparier pour former des îlots de supraconductivité dé-corrélés en phase entre eux. C'est dans cette région que le pseudogap se manifeste comme une diminution du poids spectral des excitations électroniques autour du potentiel chimique. Les techniques de spectroscopie par photo-émission résolues en angle (ARPES) [?, ?] ont permis, avec d'autres techniques comme la spectroscopie tunnel [?], d'étudier expérimentalement en détail ce phénomène (pour une revue générale voir [?]). Aujourd'hui, même s'il n'y a pas encore de consensus sur l'origine du pseudogap, certains faits sont bien établis : le pseudogap est présent dans tous les HTSC et il y a un accord général sur la gamme de dopage et de température où il apparaît ; la phase supraconductrice et le pseudogap ont en commun une symétrie de type  $d$  du paramètre d'ordre. On remarque aussi que l'effet que le pseudogap a sur toutes les quantités physiques du système, comme la chaleur spécifique ou les propriétés de transport, indique une forte déviation des propriétés de liquide de Fermi dans la phase dite "phase de pseudogap" des HTSC.

L'idée de mettre en relation le BFM avec les HTSC est née au milieu des années quatre-vingt dix [?] et depuis ce moment, la phase supraconductrice et surtout la phase pseudogap de ce modèle ont été étudiées de façon détaillée à l'aide de nombreuses

techniques :

- la méthode des fonctions de Green standard a été utilisée [?, ?] pour étudier le comportement de la phase pseudogap en fonction de la température et du couplage  $v$  entre bosons et fermions. Cette technique ne pouvait pas tenir compte de la nature de coeur dur des bosons et l'étude était donc limitée à un dopage assez bas où la forte dilution des bosons permettait de négliger la répulsion à courte portée de ces particules. Dans une autre étude utilisant les équations obtenues avec cette même technique diagrammatique [?], on considère plus en détail la transition vers la phase supraconductrice et on met en évidence la différence entre la température  $T^*$ , en-dessous de laquelle les paires sont formées, et la température  $T_B^*$ , en-dessous de laquelle ces paires acquièrent de l'itinérance et sont responsables d'un effet Meissner transitoire et d'une conductivité optique du type de Drude. Dans ce même article les auteurs étudient en plus la variation de  $T^*$  en fonction de l'anisotropie  $\alpha$  du système par rapport à la variation de la température  $T_c$  calculée grâce au théorème de Hugenholtz-Pines. Ils trouvent une variation opposée de ces deux quantités et, en remarquant une similitude entre cette situation et le diagramme de phase expérimental des HTSC, ils supposent un lien entre l'anisotropie et le dopage.
- la relation directe entre pseudogap et formation de bosons dans le BFM peut être mise en évidence avec un calcul dans la limite atomique [?]. Dans ce cas, on suppose nul le terme de saut électronique  $t$ , ce qui rend le modèle directement diagonalisable. Le résultat montre une fonction spectrale pour les électrons caractérisée par trois pôles décrivant un comportement non-bonding ainsi que bonding et anti-bonding. En baissant la température, le poids spectral correspondant aux excitations non-bonding se réduit, tandis que celui comportant des caractères bonding et anti-bonding augmente.
- la méthode de champs moyen dynamique, utilisée dans le cas d'un nombre infini de dimensions, a permis d'étudier la transition métal-isolant dans le BFM [?]. Cette technique permet de prendre en compte la forte répulsion à courte portée des bosons (coeur dur), mais elle ne permet pas de traiter l'itinérance de ces particules, en laissant ainsi de côté une partie importante de la dynamique du système.
- la brisure des propriétés de liquide de Fermi de la phase pseudogap est bien montrée par le BFM [?]. Même si les expériences ARPES suggèrent que les propriétés du liquide de Fermi sont seulement partiellement effacées dans cette phase, en indiquant comme plus appropriée une vision de liquide de Fermi marginale plus

qu'une vision de vrai non-liquide de Fermi, il faut dire que le BFM montre déjà, sans contenir aucune information spécifique sur la structure cristalline des matériaux réels, des détails que le modèle de Hubbard attractif, auquel il est souvent comparé, ne contient pas [?].

- la phase supraconductrice du modèle a aussi été analysée. Grâce à la technique de champ moyen le BFM a été utilisé pour tester l'hypothèse selon laquelle la phase supraconductrice peut induire un état macroscopique quantique cohérent dans le sous-système phononique [?]. Cette idée, supportée par des expériences de ion channeling [?] a été ultérieurement analysée et accompagnée par des suggestions pour la vérifier expérimentalement [?].

Dans toutes les études que nous venons de citer, la nature de coeur dur des bosons n'était pas prise en considération ou, si elle l'était, cela impliquait de renoncer à inclure l'itinérance des bosons. Pourtant, ces deux effets sont d'importance capitale pour déduire le vrai diagramme de phase du modèle. Comme nous l'avons vu, une tentative pour trouver ce diagramme a été faite [?] en essayant de mettre en relation la variation de  $T_c$  et  $T^*$  en fonction du degré d'anisotropie du système avec la variation de ces mêmes quantités en fonction du dopage. Néanmoins, le résultat a été peu probant, car la variation relative de  $T^*$  par rapport à  $T_c$  était trop petite pour justifier une comparaison avec le vrai diagramme de phase des HTSC.

Le but de cette thèse est d'étudier l'hamiltonien du BFM (2.3) avec une technique qui permet de tenir compte de la nature de coeur dur des bipolarons et de leur itinérance. Comme nous le verrons, les fortes corrélations entre particules sont responsables d'un diagramme de phase du BFM très similaire à celui expérimental des HTSC avec une variation de  $T^*$  opposée par rapport à celle de  $T_c$ .

## 2.4. Étude du BFM par la technique des fonctions de Green avec des opérateurs de pseudospin

Pour étudier le BFM en tenant compte de la nature de coeur dur des bosons, nous avons utilisé une technique diagrammatique développée dans les années soixante par Larkin, Vaks et Pikin [?, ?] pour étudier les systèmes de spin. Plus tard, cette technique a été étendue et simplifiée par Izyumov et Skryabin[?]. Nous résumons ici les points fondamentaux de cette technique et de son application au BFM, en laissant les détails pour l'appendice A.

### 2.4.1. Calcul des équations du système

Le point de départ sont les deux fonctions de Green pour les fermions et les bosons que nous voulons calculer :

$$\begin{aligned} G_{us}(\tau; \tau') &= -\langle T \tilde{c}_{u\sigma}(\tau) \tilde{c}_{s\sigma}^+(\tau') \rangle \\ K_{us}(\tau; \tau') &= \langle T \tilde{S}_u^-(\tau) \tilde{S}_s^+(\tau') \rangle \end{aligned}$$

où les opérateurs sont ceux déjà introduits dans les paragraphes précédents, mais ils sont ici exprimés en notation de Heisenberg. Suivant la technique standard nous pouvons exprimer tous les opérateurs en notation d'interaction :

$$\begin{aligned} G_{us}(\tau; \tau') &= \left\{ -\langle T c_{u\uparrow}(\tau) c_{s\uparrow}^+(\tau') \sigma(\beta) \rangle_0 \right\}_c \\ K_{us}(\tau; \tau') &= \left\{ \langle T S_u^-(\tau) S_s^+(\tau') \sigma(\beta) \rangle_0 \right\}_c \end{aligned}$$

où l'index  $c$  nous rappelle que seuls les diagrammes connectés doivent être pris en considération. La fonction  $\sigma$  est :

$$\sigma(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_n T \{ H_{int}(\tau_1) \dots H_{int}(\tau_n) \}.$$

Nous avons ainsi exprimé les deux fonctions de Green comme une somme de termes composés par un produit mixte d'opérateurs fermioniques et de spin. Grâce à l'hypothèse que ces deux types d'opérateur commutent, nous pouvons traiter séparément la moyenne des opérateurs de spin et la moyenne des opérateurs fermioniques. Cette dernière peut être réduite en produit de moyennes plus simples grâce au théorème de Wick standard. Pour étudier les moyennes des opérateurs de spin, par contre, une version alternative du théorème a été développée [?] car sa forme standard n'est pas valable à cause des relations de commutations des opérateurs de spin mêmes. Un terme de la série peut s'écrire, grâce à ce nouvel outil, de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
\langle T [S_1^{\alpha_1}(\tau_1) S_0^-(\tau) S_2^{\alpha_2}(\tau_2) \dots S_n^{\alpha_n}(\tau_n)] \rangle_0 &= Y_{10}(\tau - \tau_1) < T \left\{ [S_1^{\alpha_1}, S_0^-]_{\tau_1} S_2^{\alpha_2} \dots S_n^{\alpha_n} \right\} >_0 \\
&+ Y_{20}(\tau - \tau_2) < T \left\{ S_1^{\alpha_1} [S_2^{\alpha_2}, S_0^-]_{\tau_2} \dots S_n^{\alpha_n} \right\} >_0 \\
&+ \dots + \\
&+ Y_{n0}(\tau - \tau_n) < T \left\{ S_1^{\alpha_1} S_2^{\alpha_2} \dots [S_n^{\alpha_n}, S_0^-]_{\tau_n} \right\} >_0
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
Y_{i0}(\tau - \tau_i) &= \delta_{i0} e^{-E_0(\tau - \tau_i)} \begin{cases} (1 + n_y) & \tau < \tau_i \\ n_y & \tau > \tau_i \end{cases} \\
n_y &= \frac{1}{e^{-y} - 1} \\
y &= \beta E_0.
\end{aligned}$$

En utilisant cette relation récursivement nous pouvons réduire chaque terme de la série en une somme de produits de fonctions de Green libres et de moyennes du type  $\langle S_1^z \dots S_n^z \rangle_0$  à évaluer par rapport à l'hamiltonien non perturbé  $(\Delta_B - 2\mu) \sum_i (S_i^z + \frac{1}{2})$ . À leur tour ces moyennes peuvent être exprimées par des cumulants selon la règle suivante :

$$\begin{aligned}
\langle S_i^z \rangle_0 &= b(y) = n_B - \frac{1}{2} \\
\langle S_i^z S_j^z \rangle_0 &= b^2 + b' \delta_{ij}; \quad b^2 + b' = \frac{1}{4} \\
\langle S_i^z S_j^z S_k^z \rangle_0 &= b^3 + b' b (\delta_{ij} + \delta_{jk} + \delta_{ik}) + b'' \delta_{ij} \delta_{jk}; \quad b^3 + 3bb' + b'' = \frac{1}{4} b \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi pour la fonction de Green fermionique et bosonique une série de termes qui peuvent être transformés (selon des règles différentes de celles standard car il faut aussi prendre en compte les cumulants) en diagrammes de Feynman. À l'aide du tableau des correspondances A.1, nous obtenons les diagrammes qui sont reportés en détails dans les figures A.4 et A.5 (seuls les termes aux ordres les plus bas sont reportés). Resommer ces diagrammes en tenant compte des cumulants à tous les ordres s'est révélé être une tâche impossible. Nous nous sommes donc limités à resommer seulement les diagrammes avec les cumulants  $b$  et  $b'$ . Les équations ainsi

obtenues (reportées dans l'appendice A) peuvent être ultérieurement simplifiées en ignorant les termes proportionnels à  $b'$ . Cette opération est justifiée par deux points : (i) la caractéristique de coeur dur est qualitativement déjà prise en compte de façon correcte dans la fonction de Green bosonique nue grâce au cumulants  $b$ . (ii) Nous avons résolu les équations incluant  $b$  et  $b'$  pour plusieurs remplissages et températures, constatant toujours une correspondance quantitative acceptable entre ces solutions et les solutions des équations incluant seulement  $b$ .

Les équations finales sur lesquelles nous nous sommes concentrés sont donc :

$$\begin{aligned}
 G(k, \omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k - \Sigma(k, \omega_n)} \\
 K(q, \omega_m) &= \frac{b}{i\omega_m - E_0 - b\Pi(q, \omega_m)} \\
 \Sigma(k, \omega_n) &= -\frac{v^2}{\beta N} \sum_{q,m} G(q-k, \omega_m - \omega_n) K(q, \omega_m) \\
 \Pi(q, \omega_m) &= \frac{v^2}{\beta N} \sum_{k,n} G(q-k, \omega_m - \omega_n) G(k, \omega_n)
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Le niveau énergétique des bosons est mesuré à partir du potentiel chimique  $E_0 = \Delta_B - 2\mu$  et la relation de dispersion nue pour les fermions est :

$$\varepsilon_k = D - \frac{D}{Nz} \sum_{\langle r_i \neq r_j \rangle} e^{ik(r_i - r_j)};$$

$N$  est le nombre de sites du réseau et  $z$  est le nombre de proches voisins d'un site. Les fonctions de Green et leurs self-énergies sont exprimées dans l'espace de Fourier et de Matsubara et sont liées aux fonctions dans l'espace réel par les relations :

$$\begin{aligned}
 G_{us}(\tau, \tau') &= -\langle T[c_{u\sigma}(\tau)c_{s\sigma}^+(\tau')] \rangle \\
 &= \frac{1}{N\beta} \sum_{k,n} e^{ik(r_u - r_s) - i\omega_n(\tau - \tau')} G(k, \omega_n), \\
 K_{u,s}(\tau, \tau') &= \langle T[\rho_u^-(\tau)\rho_s^+(\tau')] \rangle \\
 &= \frac{1}{N\beta} \sum_{q,m} e^{iq(r_u - r_s) - i\omega_m(\tau - \tau')} K(q, \omega_m).
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

où  $\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n+1)$  et  $\omega_m = \frac{\pi}{\beta}2m$  avec  $n, m \in Z$ . L'ensemble d'équations avec  $b$  et  $b'$ , reporté dans l'appendice A, a aussi été résolu, mais comme ici nous nous sommes

intéressés seulement aux propriétés physiques robustes, nous n'avons pas cherché à rentrer dans une analyse quantitative trop poussée. Nous avons simplement résolu ces équations pour certains cas précis afin de confirmer qu'il n'y a pas de changements qualitatifs dans les résultats obtenus avec les équations (2.4).

### 2.4.2. Solutions des équations

Pour résoudre numériquement les équations (2.4), nous choisissons de travailler avec une zone de Brillouin unidimensionnelle. Cela nous offre un gros avantage car la complexité des calculs est considérablement réduite. Physiquement, ce choix n'est pas trop contraignant, vu que nous nous sommes surtout intéressés aux caractéristiques générales des propriétés spectrales des électrons et des paires d'électrons. Naturellement, quand nous voulons comparer nos calculs à la physique des HTSC, nous devons le faire seulement dans les régions de la zone de Brillouin où le pseudogap est le plus marqué, c'est-à-dire autour des points M (*hot spots*). Dans ces régions, nos résultats sont comparables aux fonctions spectrales ARPES avec un vecteur d'onde parallèle à la direction  $[0,0]$ - $[0,\pi]$  et aux mesures de transport dans la même direction ou dans la direction perpendiculaire aux plans  $ab$ , vu que dans ces cas la mobilité est contrôlée par le pseudogap dans les points M de la zone de Brillouin.

Les fonctions de Green et les self-énergies seront échantillonnées aux points  $k = \frac{2\pi}{N}\nu$  avec  $\nu \in [-\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1]$  (de même pour  $q$ ),  $\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n + 1)$  et  $\omega_m = \frac{\pi}{\beta}2m$  avec  $n, m \in \mathbb{Z}$ . Les entiers  $\nu$ ,  $n$  et  $m$  serviront à indexer les tableaux bidimensionnels où nous stockerons les échantillons ; pour ce faire, nous devons limiter le nombre de fréquences de Matsubara à prendre en considération : nous avons choisi un nombre  $2M_f = 200$  qui s'est révélé satisfaisant pour la gamme de température que nous avons étudiée. Naturellement, plus la température  $\frac{1}{\beta}$  diminue, plus le maillage en fréquence devient serré et étendu à un domaine réduit. Cependant, le support des fonctions à calculer se réduit aussi, de façon à ce que le nombre de points que nous avons choisi reste suffisant (pour certains taux de remplissage) jusqu'à une température  $\beta = 400D$  (où  $D$  est la moitié de la bande électronique). Le nombre de points dans la zone de Brillouin sera  $N = 196$ . Avec ce choix du maillage, nous avons obtenu les résultats avec la précision voulue en maintenant le temps de calcul raisonnablement bas.

Le calcul des self-énergies nécessite la somme sur les fréquences  $\omega_m$  et  $\omega_n$  pour  $m, n = -\infty \dots \infty$ . Pour l'effectuer, les fonctions de Green ont été approximées en dehors de la fenêtre  $-M_f \dots M_f$  avec les fonctions nues  $G^0$  et  $K^0$  et leur contribution a été calculée analytiquement (pour plus de détails sur ce calcul et sur le choix du maillage voir l'appendice B)

L'algorithme de solution consiste tout d'abord à approximer les fonctions de Green  $G$  et  $K$  avec les fonctions de Green nues  $G^0$  et  $K^0$ , puis à calculer les self-énergies. Ces dernières nous permettent de calculer une approximation plus précise des fonctions  $G$  et  $K$  qui sera à nouveau utilisée pour le calcul des self-énergies. Le processus s'arrête quand on obtient la convergence, c'est-à-dire quand l'erreur ainsi définie :

$$\eta = \frac{\sum_{\nu,n} |G^{step\ i}(\nu, n) - G^{step\ i-1}(\nu, n)|}{\sum_{\nu,n} |G^{step\ i}(\nu, n) + G^{step\ i-1}(\nu, n)|}$$

est inférieure à un seuil qui dans nos calculs varie, selon les cas, de  $10^{-9}$  à  $10^{-11}$ . La solution ainsi obtenue pour un potentiel chimique  $\mu$  fixé au début du calcul, nous permet de déterminer le taux de remplissage du système :

$$n_{tot} = 2n_F + 2n_B,$$

où les nombres de bosons et de fermions sont respectivement :

$$\begin{aligned} n_F &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta N} \sum_{\nu,n} G(\nu, n) \\ n_B &= \frac{2}{\beta N} \sum_{\nu,m} e^{-i\omega_m 0^-} K(\nu, m). \end{aligned}$$

En changeant le potentiel chimique  $\mu$ , nous pouvons modifier le nombre total de particules  $n_{tot}$  de 1 à 2, ce qui correspond, dans la physique des HTSC, à une large variation du dopage. Par analogie avec les études des supraconducteurs à haute température critique, nous parlerons de région de sous-dopage pour  $n_0 \leq n_{tot} \leq 2$  et de région de dopage optimal ou sur-dopage pour  $1 \leq n_{tot} \leq n_o$  avec  $n_o \simeq 1.1$  pour notre choix de paramètres. Nous remarquons que la quantité  $1 - n_F$ , liée au dopage par trous, diminue lorsqu'on a une augmentation du remplissage  $n_{tot}$ .

Les solutions obtenues pour  $G(\nu, n)$  et  $K(\nu, m)$  doivent être continuées analytiquement pour qu'il soit possible de calculer les propriétés physiques du système. Formellement il s'agit de calculer la limite suivante :

$$\begin{aligned}
G^{ret}(k, \omega) &= \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0^-} G(k, i\omega_n) \\
K^{ret}(q, \omega) &= \lim_{i\omega_m \rightarrow \omega + i0^-} K(k, i\omega_m).
\end{aligned}$$

Pour ce faire, étant donné que nous ne connaissons pas la forme analytique des solutions des équations, il faut auparavant trouver une approximation des fonctions sur tout le plan complexe grâce à une continuation analytique, et après calculer la valeur de ces continuations sur une ligne parallèle et proche de l'axe réel (dans l'appendice B nous discutons de combien cette ligne doit se rapprocher de l'axe). Pour reproduire de façon satisfaisante le comportement des fonctions sur l'axe de Matsubara et pour trouver une approximation analytique fiable sur tout le plan complexe, la technique de Padé a été utilisée. Il s'agit d'une approximation par fractions continues, largement utilisée dans le domaine de la physique du problème à N corps, qui nous a permis, sous la contrainte que les solutions des équations 2.4 soient déterminées avec une précision élevée, de reproduire fidèlement la structure des fonctions spectrales et du pseudogap.

## Solutions des équations standard

Dans les chapitres suivants, nous serons plusieurs fois amenés à comparer les résultats obtenus en résolvant les équations précédentes avec les résultats liés au problème du BFM sans coeur dur. De cette manière, nous pourrions évaluer l'importance des fortes répulsions à courte portée des bosons et leur effet sur le comportement du système. Pour ce faire, nous avons résolu les équations obtenues en appliquant la technique standard des diagrammes de Feynman à l'hamiltonien du BFM ; les opérateurs  $S^\pm$  sont dans ce cas considérés comme des opérateurs bosoniques standard et donc il peuvent être traités à l'aide du théorème de Wick traditionnel. Les équations finales ainsi obtenues sont similaires aux équations 2.4 si on impose, dans ces dernières, la condition  $b = 1$ . Cela simplifie l'algorithme de solution car dans ce cas nous n'avons pas besoin de nous soucier de la renormalisation de  $b$  et éventuellement du fait que, entre une itération et une autre,  $b$  peut changer de signe ou s'approcher trop de zéro. Pour déterminer le potentiel chimique, il faut utiliser les formules pour la densité des bosons  $n_B$  calculée à partir de la fonction de Green pour les bosons sans coeur dur.

### 2.4.3. Le modèle XY sur deux sites

Nous remarquons que la physique d'un gaz de bosons de coeur dur et sa transition vers une phase superfluide est déjà contenue dans un modèle de type XY [?]. L'hamiltonien sur deux sites :

$$H = -2J (S_1^+ S_2^- + S_2^+ S_1^-) + E_0 (S_1^z + S_2^z),$$

résoluble analytiquement, est suffisant pour avoir une idée générale de la physique sous-jacente au problème que nous étudierons. Les opérateurs sont les opérateurs de pseudo-spin  $S$  définis dans le paragraphe 2.2,  $E_0$  est le niveau d'énergie des bosons et  $J$  est le coefficient d'échange. Dans l'appendice C nous reportons les résultats de la diagonalisation de la matrice associée à  $H$ , nous calculons la fonction spectrale  $A_{ij}^B(\omega)$  :

$$A_{ij}^B(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) S_{1nm}^- S_{2mn}^+ \delta(\omega - E_m + E_n)$$

et sa transformée dans l'espace réciproque  $\tilde{A}_{kl}(\omega)$  :

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{11}(\omega) &= 2A_{11}^B(\omega) - 2A_{12}^B(\omega) \\ \tilde{A}_{22}(\omega) &= 2A_{11}^B(\omega) + 2A_{12}^B(\omega) \\ \tilde{A}_{12}(\omega) &= \tilde{A}_{21}(\omega) = 0 \end{aligned}$$

La densité d'états est :

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= \sum_{lk} \tilde{A}_{lk} = 2\tilde{A}_{11} = \\ &= \frac{2\pi}{Z} \{ [\sinh(\beta J) - \sinh(\beta E_0)] \delta(\omega + J - E_0) + \\ &\quad - [\sinh(\beta J) + \sinh(\beta E_0)] \delta(\omega - E_0 - J) \} \end{aligned}$$

Nous traçons l'évolution de cette fonction généralisée, constituée par deux deltas de Dirac, en fonction de  $E_0$  et pour un coefficient d'échange  $J$  fixé à 0.1 (figure 2.2 et 2.3). Pour  $E_0 > J$ , les deux pics se trouvent à deux fréquences positives et, en diminuant la valeur de  $E_0$ , ils s'approchent de zéro ; leur hauteur reste plus ou moins constante, sauf dans une petite région autour de zéro, où elle décroît rapidement quand on diminue  $E_0$  jusqu'à la disparition totale de l'un des deux pics dans le cas  $E_0 = J$  (figure 2.3).

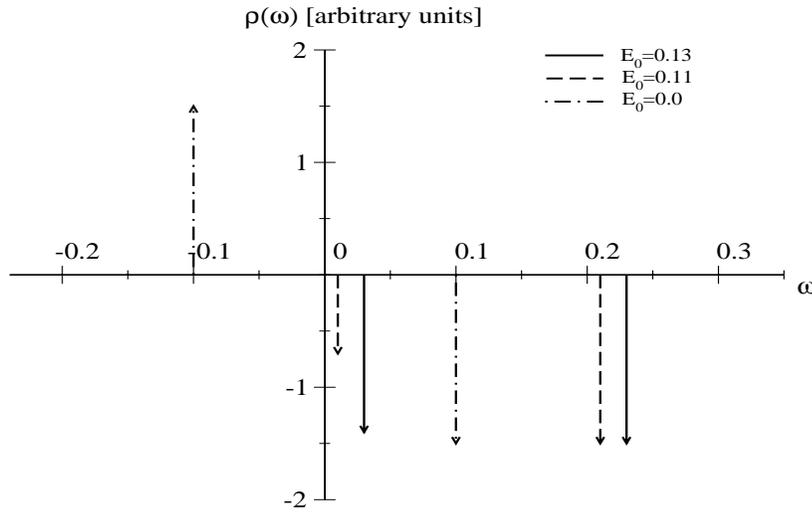


FIG. 2.2. – Densité d'états  $\rho(\omega)$  pour le cas  $J=0.1$  et pour trois valeurs différentes de  $E_0$ .

Pour  $E_0 < J$ , l'un de deux deltas de la fonction spectrale se trouve à une fréquence négative et a un signe opposé par rapport à l'autre. Dans le cas  $E_0 = 0$ , on a une situation antisymétrique.

## 2.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tout d'abord introduit les concepts de polaron et de bipolaron, autour desquels, historiquement, le modèle Boson-Fermion a été formulé. Ensuite nous avons introduit l'hamiltonien du modèle et le choix des paramètres qui a été fait. Le bref résumé des principaux résultats du BFM nous a montré la nécessité d'une étude qui tient compte de la nature de coeur dur des bosons, ce qui nous a amené à employer une technique appropriée pour résoudre le problème à traiter.

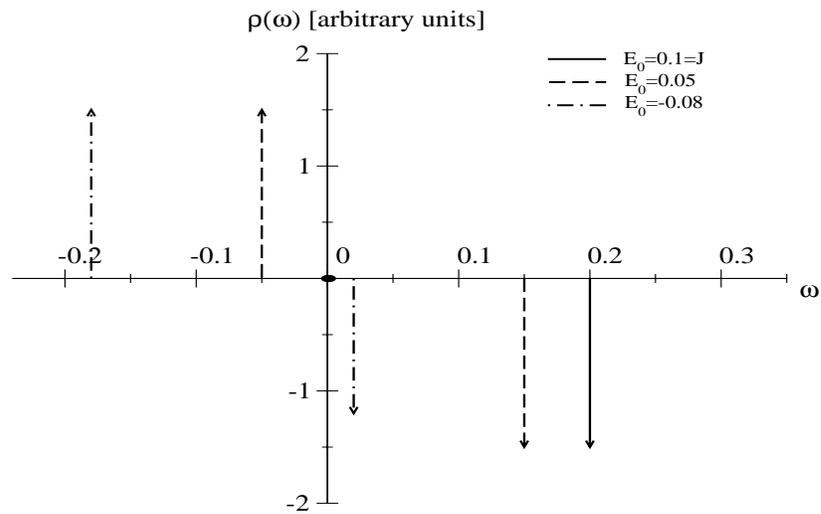


FIG. 2.3. – Densité d'états  $\rho(\omega)$  pour le cas  $J=0.1$  et pour trois valeurs différentes de  $E_0$ ; nous remarquons que pour  $E_0 = J$ , l'un des deux pics de la fonction spectrale est centré sur zéro et a une hauteur nulle.



# 3. Effet de coeur dur dans le BFM

La nature de coeur dur des paires bosoniques préformées comporte des différences importantes dans le modèle boson-fermion par rapport au cas où les particules en question sont considérées comme des bosons standard. Les grandeurs affectées les plus importantes sont la température  $T^*$  d'ouverture du pseudogap, la variation avec la température du nombre de bosons  $n_B$  et celle de la densité des états électroniques.

Dans ce chapitre nous présenterons les résultats obtenus en résolvant les équations couplées dont nous avons parlé dans le chapitre précédent, qui tiennent compte de l'effet de coeur dur, et nous ferons une comparaison avec le cas où cet effet est négligé. De plus, nous montrerons la différence entre nos résultats et ceux dans la limite atomique, où l'effet de l'itinérance des électrons est supprimé. Partout où cela est possible, les différentes grandeurs sont étudiées en fonction de la température  $T$  et du remplissage  $n_{tot}$ . La température peut être directement choisie avec la plus grande précision, par contre le remplissage est à déterminer en adaptant en conséquence le potentiel chimique  $\mu$  au début du calcul numérique. Nous nous sommes toujours assurés que, dans les résultats qui suivent, la précision choisie pour fixer  $n_{tot}$  ( $\sim 10^{-3}$ ) est suffisante pour que les effets de la température et du remplissage puissent être clairement distingués.

## 3.1. La symétrie particule-trou

Prendre en compte l'effet de coeur dur des bosons nous permet d'introduire une description par trous "bosoniques" du système, étant donné que le nombre par site des paires préformées est limité à 1. En transformant l'hamiltonien du BFM  $H(\varepsilon_k, E_0, v)$  par une transformation particule-trou :

$$\begin{aligned} c_{k\sigma}^+ &\leftrightarrow c_{k\sigma} \\ \rho_i^+ &\leftrightarrow \rho_i^- \end{aligned}$$

et en effectuant la transformée de Fourier nous obtenons l'hamiltonien du système décrit par les opérateurs des trous :

$$\begin{aligned}
H^t &= \sum_{k\sigma} (-\varepsilon_k) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + E_0 \sum_i \left( \frac{1}{2} - S_i^z \right) \\
&\quad - v \sum_i (S_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+)
\end{aligned}$$

où les  $E_0, v, D$  ont la signification donnée dans le chapitre précédent. L'hamiltonien dans le formalisme des trous est identique à celui dans la représentation des particules si on pose :

$$\begin{aligned}
E_0^t &= -E_0 \\
\varepsilon_k^t &= -\varepsilon_k \\
v^t &= -v
\end{aligned}$$

Fixons  $\frac{\Delta_B}{2} = D$  et imaginons que l'on ait résolu notre problème en utilisant l'hamiltonien  $H(\varepsilon_k, E_0, v)$  pour un  $\mu$  fixé tel que  $\mu < \frac{\Delta_B}{2}$ . Dans ce cas, nous sommes dans la situation décrite par la partie *a* de la figure 3.1 et avec  $E_0 = \Delta_B - 2\mu > 0$  et  $\varepsilon_k = |D - \mu| + D \cos(k)$ . On comprend alors que, si nous sommes intéressés au cas symétrique au précédent décrit par la partie *b* de la figure 3.1, avec  $\mu' = \frac{\Delta_B}{2} + (\frac{\Delta_B}{2} - \mu)$ ,  $E_0 = -|\Delta_B - 2\mu| < 0$  et  $\varepsilon_k = -|D - \mu| - D \cos(k)$ , au lieu de résoudre le problème à nouveau nous pouvons utiliser l'hamiltonien des trous, pour lequel maintenant nous avons :

$$\begin{aligned}
E_0^t &= -E_0 = \Delta_B - 2\mu > 0 \\
\varepsilon_k^t &= |D - \mu| + D \cos(k) \\
v^t &= -v
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Si maintenant on pose<sup>1</sup>  $k \rightarrow k^t + \pi$ , on a  $\varepsilon_k^t = |D - \mu| - D \cos(k)$  et l'hamiltonien des trous est donc identique à celui qu'on avait pour le cas de la figure 3.1*a* sauf pour le signe de l'interaction qui, en intervenant toujours au carré, n'aura pas d'effet. La

---

<sup>1</sup>Cette transformation revient à travailler avec une zone de Brillouin décalée par rapport à celle standard. Cela n'affecte pas les résultats physiques à cause de la périodicité en  $k$ .

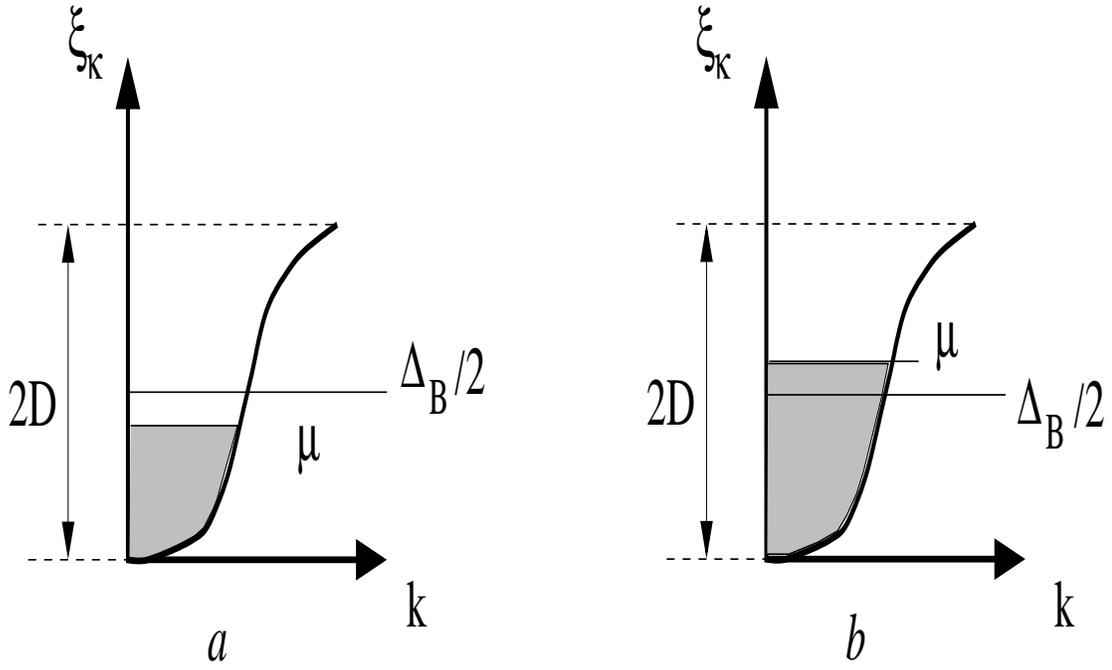


FIG. 3.1. – Dispersion des fermions et niveaux d'énergie dans les BFM. La courbe en gras représente la dispersion des fermions mesurée à partir du bas de la bande électronique (dans le cas sans interaction  $v = 0$  on a  $\xi_k = D - D \cos(k)$ ).  $\frac{\Delta_B}{2}$  représente le niveau d'énergie par électron des bosons.

solution du problème est donc déjà trouvée en termes des trous et il suffit de se rappeler les relations :

$$\begin{aligned} n_F^t(k) &= 1 - n_F(k) \\ n_B^t &= \frac{1}{2} - \langle S^z \rangle = 1 - n_B \end{aligned}$$

qui lie la densité des particules avec la densité des trous pour récupérer les résultats en termes des particules. On remarque que tout cela est vrai seulement si  $\frac{\Delta_B}{2} = D$ , c'est-à-dire quand le niveau des bosons est au centre de la bande électronique car dans le cas contraire la symétrie particule-trou n'est plus respectée.

D'un point de vue intuitif, la compréhension de ce comportement symétrique est immédiate si on se souvient que notre système est équivalent à un système de spins orientés dans la direction  $z$  d'un champ magnétique  $E_0$ . La relation  $n_B = S^z + \frac{1}{2}$  nous dit qu'un spin "up" correspond à la présence d'une particule et un spin "down" à son absence ; une fois la direction du champ fixée, les spins tendent à s'aligner avec lui pour minimiser l'énergie du système  $E_0$  ( $S^z + \frac{1}{2}$ ). En cas de basse densité, nous avons, par exemple, la situation de la figure 3.2a avec  $\mu < \frac{\Delta_B}{2}$  et donc  $E_0 = \Delta_B - 2\mu > 0$ . Par contre, dans le cas symétrique à haute densité, le cas de la figure 3.2b s'applique avec  $\mu > \frac{\Delta_B}{2}$  et donc  $E_0 = \Delta_B - 2\mu < 0$ . Dans les deux cas, la physique est uniquement déterminée par la direction du champ magnétique de module  $E_0$  par rapport à la direction des spins et donc les deux cas symétriques de figure 3.2 doivent se comporter de façon identique.

## 3.2. Densité d'états fermioniques du BFM

Une fois les équations couplées du modèle résolues numériquement, nous avons à notre disposition la fonction de Green  $G$  pour les fermions, d'où on peut extraire les différentes propriétés physiques liées à ce système. Nous nous intéressons ici premièrement à la densité d'états qui est définie de la façon suivante [?] :

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \Im m \left\{ \lim_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta} \sum_q G(q, \omega_n) \right\}$$

et qui nous renseigne sur la distribution des états. Numériquement,  $\rho(\omega)$  est calculé par une continuation analytique de Padé [?]. Dans la figure 3.3, on voit qu'elle présente, par rapport à la structure générale de la densité d'états d'un système d'électrons

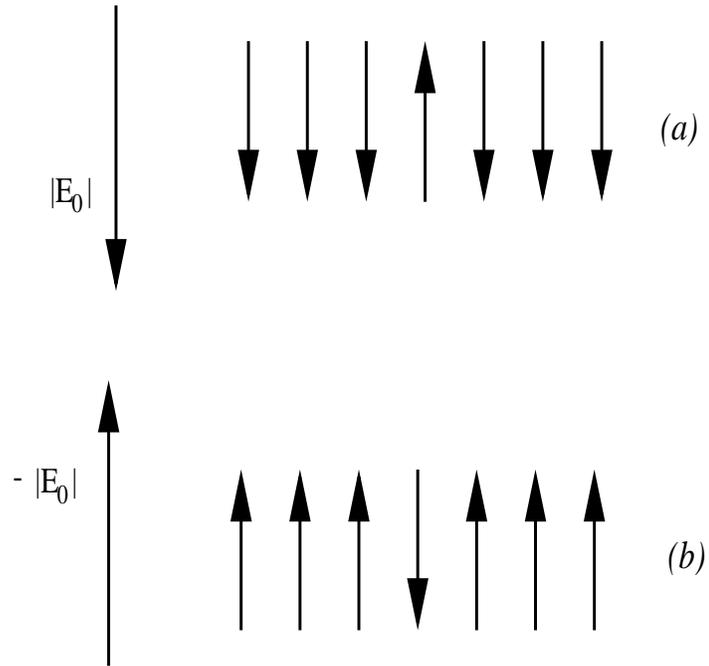


FIG. 3.2. – Système simplifié similaire à celui du BFM. Le spin “up” indique la présence d’une particule et le spin “down” représente son absence. Nous montrons un cas de basse densité (a) et un cas de haute densité (b) en bosons qui ont les potentiels chimiques se situant de façon symétrique respectivement au-dessus et en-dessous de la moitié de la bande électronique.

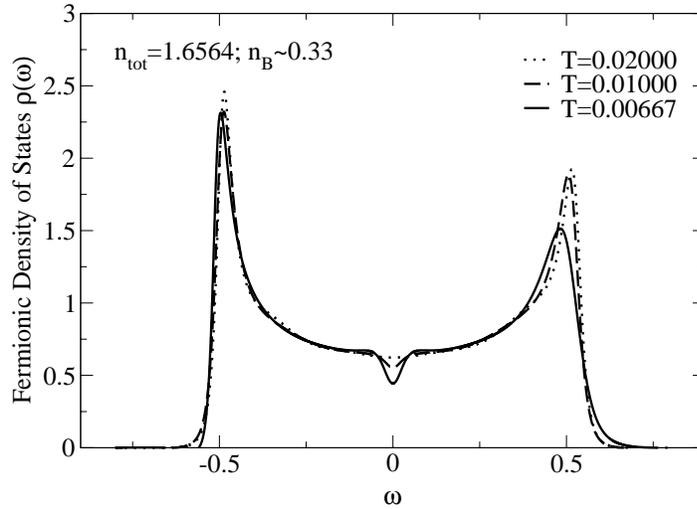


FIG. 3.3. – Densité d'états fermioniques. Sa structure générale est similaire à celle de la densité d'un système d'électrons libres en 1D. La différence principale est l'ouverture d'un creux au niveau du potentiel chimique ( $\omega = 0$ ). Les déformations au bord de la bande sont dues aux singularités de Van-Hove, difficilement reproductibles par l'approximation de Padé. La concentration de bosons  $n_B$  est reportée pour en donner l'ordre de grandeur. Naturellement, si on fixe  $n_{tot}$ ,  $n_B$  varie avec la température et il sera différent pour les trois courbes ici reportées. Même remarque pour les figures suivantes.

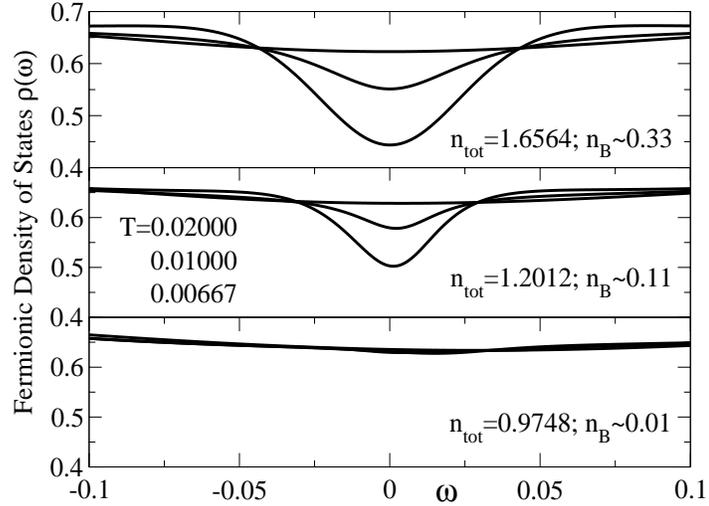


FIG. 3.4. – Détail de la densité d'états fermioniques autour du potentiel chimique pour trois concentrations différentes. Le pseudogap devient de plus en plus évident quand on baisse la température et qu'on augmente la densité totale de particules  $n_{tot}$  (liée au nombre de bosons  $n_B$ ).

libres en 1D, un pseudogap autour du potentiel chimique qui est de l'ordre du couplage électron-boson<sup>2</sup>. Cette diminution d'états fermioniques disponibles est montrée plus clairement dans la figure 3.4 où son évolution en fonction de la température est reportée pour trois concentrations  $n_{tot}$  différentes. Pour  $n_{tot} = 1.65$  et  $n_{tot} = 1.20$ , on remarque l'augmentation de la taille du pseudogap quand on baisse la température. On remarque aussi l'existence d'une température critique  $T^*$  au-dessus de laquelle la densité d'états est essentiellement non renormalisée. Pour  $T < T^*$ , les états fermioniques disparaissent près du potentiel chimique pour se redistribuer sur les côtés et, plus la densité des bosons  $n_B$  est élevée, plus l'effet du pseudogap est évident. Cette redistribution d'états est le signe de la formation de Cooperons [?], c'est-à-dire des paires de Cooper dotées d'un moment qui, pour des températures plus basses qu'une certaine température critique  $T_c$ , entrent dans une phase superfluide, responsable des propriétés supraconductrices du système.

Pour mieux étudier les caractéristiques du pseudogap, nous avons tracé en ligne continue dans la figure 3.5 la quantité  $\rho_{min}$  (qui représente le minimum local de  $\rho(\omega)$  au centre de la bande) en fonction de la densité  $n_{tot}$  et pour des températures différentes. Pour des températures assez élevées, la quantité  $\rho_{min}$  est pratiquement constante et

<sup>2</sup>L'énergie  $\omega$  est mesurée par rapport au potentiel chimique  $\mu$ .

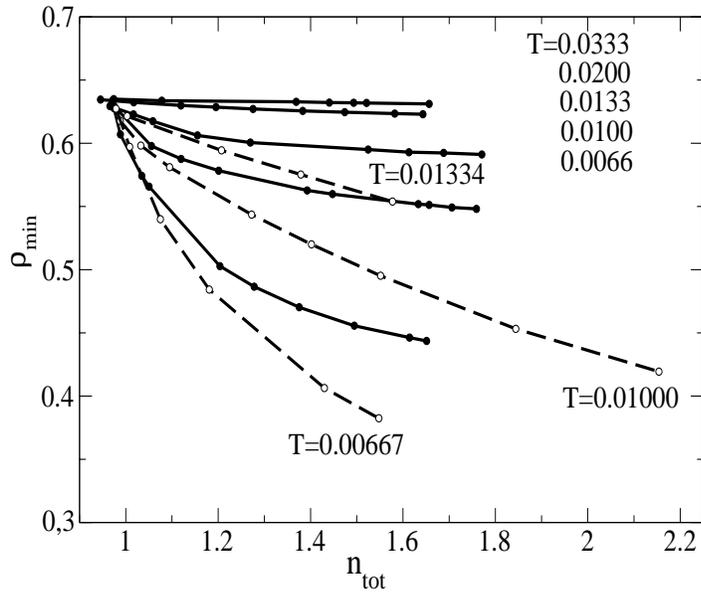


FIG. 3.5. – Variation du minimum de la densité d'états autour du potentiel chimique. Le résultat du calcul avec bosons de coeur dur (en ligne continue) est comparé au résultat sans coeur dur (en tirets). Dans ce dernier cas, pour plus de clarté, seulement trois courbes sont reportées. En haut à droite, on a les températures correspondant aux courbes en ligne continue.

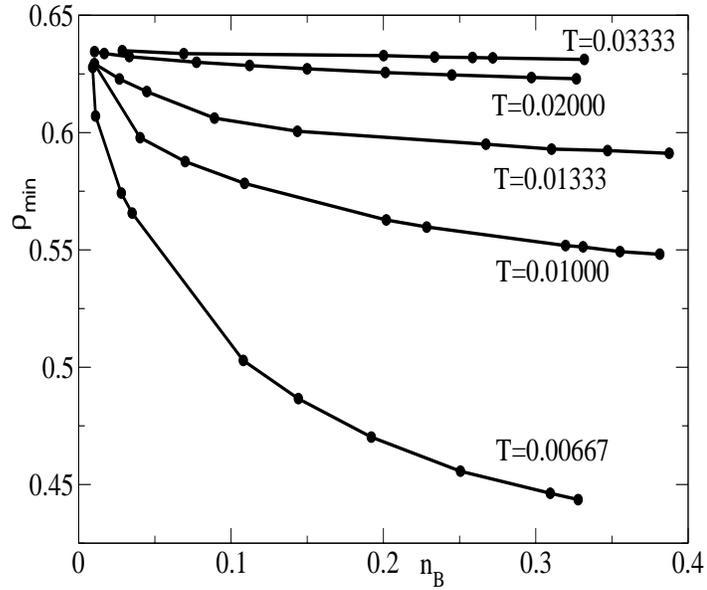


FIG. 3.6. – Variation du minimum de la densité d'états autour du potentiel chimique en fonction de la densité des bosons  $n_B$ . On remarque que, pour de faibles densités, les courbes ne se croisent pas contrairement à ce qui arrive dans la figure 3.5

indique l'absence d'un creux dans la densité d'états. Quand on baisse la température, l'effet de l'augmentation de  $n_{tot}$  devient plus évident avec, pour les faibles concentrations, une ouverture rapide qui devient de plus en plus saturée quand on approche la limite  $n_{tot} = 2$  et  $n_B = 0.5$ . Dans la même figure, nous montrons en tirets  $\rho_{min}$  calculé dans le cas où l'effet de coeur dur est absent. Naturellement, pour des  $n_B$  petits les courbes à température égale sont très proches dans les deux cas, car pour de faibles concentrations, les interactions à courte portée des bosons sont négligeables. Néanmoins, en augmentant  $n_B$ , les deux cas se montrent très différents.  $\rho_{min}$  sans coeur dur décroît sans qu'il ne sature près de  $n_{tot} = 2$ .

Dans la figure 3.6, nous illustrons  $\rho_{min}$  en fonction de  $n_B$ . Comme on peut le remarquer, pour  $n_B$  très bas les courbes ne se croisent pas, ce qui est contraire au comportement de  $\rho_{min}$  en fonction de  $n_{tot}$  (figure 3.5). Ceci montre bien que, au moins pour les basses concentrations, le pseudogap dépend de façon subtile de la température et de la concentration. Dans figure 3.7, nous montrons la liaison entre  $n_B$  et  $n_{tot}$  pour différentes températures. Quand on fixe  $n_{tot}$  (voir la ligne verticale en tirets), à température plus basse correspond un  $n_B$  plus petit ; au contraire, quand on fixe  $n_B$  (voir ligne horizontale), à température plus élevée correspond un  $n_{tot}$  plus petit. En étudiant donc les courbes  $\rho_{min}(n_B)$  pour un  $n_B$  fixé, il est naturel qu'elles ne se

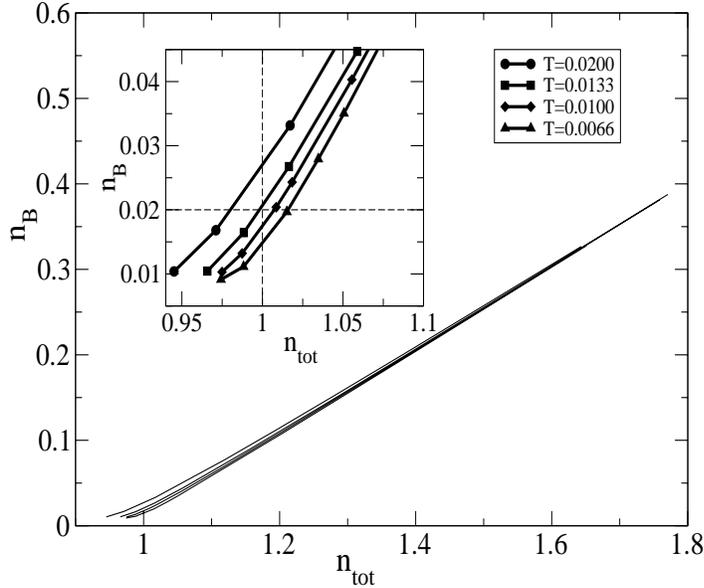


FIG. 3.7. – Densité des bosons en fonction de la densité totale de particules. La relation entre les deux est :  $n_{tot} = 2n_B + 2n_F$ .

croisent pas, car le nombre de particules et la température agissent dans le même sens sur  $\rho_{min}$  : plus  $T$  est petit, plus  $n_{tot}$  sera grand et donc plus  $\rho_{min}$  sera petit, ce qui implique un pseudogap plus marqué. Au contraire, dans les courbes  $\rho_{min}(n_{tot})$  pour un  $n_{tot}$  fixé, quand la température baisse,  $n_B$  baisse aussi. Le résultat sera la somme de ces deux changements opposés et les courbes peuvent donc parfois se croiser.

Dans la même figure, on peut voir encore que pour une concentration plus élevée, la variation relative de  $n_B$  avec la température pour un  $n_{tot}$  fixé sera petite (à cause des corrélations à courte portée qui deviennent de plus en plus importantes) et elle aura donc très peu d'influence sur l'ouverture du pseudogap par rapport à la température.

### 3.2.1. Comparaison avec la limite atomique

Si dans l'hamiltonien du modèle boson-fermion nous imposons que le terme de saut  $t$  des électrons soit nul, nous obtenons la limite atomique du modèle. Dans ce cas on peut facilement diagonaliser exactement le problème tout en prenant en compte la nature de coeur dur des bosons qui, en étant maintenant localisés, se comportent comme des fermions. Cette limite est intéressante en général car l'absence d'itinérance des électrons élimine pour le système toute possibilité de rentrer dans une phase supraconductrice et donc permet de comprendre s'il y a une relation ou non entre cette

phase et le pseudogap. En étudiant cette limite [?] on remarque l'existence de trois états : le *non-bonding*, dans lequel les bosons et les électrons ne sont pas hybridés ; le *bonding* et le *anti-bonding* qui sont respectivement :

$$\begin{aligned} |B^- \rangle &= U|\uparrow\downarrow\rangle|0\rangle - V|0\rangle|1\rangle \\ |B^+ \rangle &= V|\uparrow\downarrow\rangle|0\rangle + U|0\rangle|1\rangle \end{aligned}$$

où  $U$  et  $V$  sont des constantes qui dépendent des paramètres du système et où on voit qu'il y a un mélange entre l'état avec deux électrons  $|\uparrow\downarrow\rangle|0\rangle$  et l'état avec un boson  $|0\rangle|1\rangle$ . En calculant la fonction de Green à l'aide des équations du mouvement [?] on voit que celle-ci est composée de trois pôles correspondant aux trois états en question qui génèrent la densité :

$$\rho(\omega) = Z^F \delta(\omega - \varepsilon_0) + (1 - Z^F) [V^2 \delta(\omega - \varepsilon_+) + U^2 \delta(\omega - \varepsilon_-)]$$

L'étude de cette fonction montre clairement que le pic  $Z^F \delta(\omega - \varepsilon_0)$  correspondant à l'état *non-bonding* est intimement lié à l'ouverture du pseudogap car son poids décroît avec la température au profit de deux autres états. Il peut être considéré, donc, comme l'équivalent du  $\rho_{min}$  étudié auparavant dans ce chapitre. Dans la figure 3.8 (a), on observe la variation du pic  $Z^F$  (maintenant appelé  $\rho_{min}$  par analogie avec la discussion du paragraphe précédent) en fonction de  $n_{tot}$  pour des températures différentes. Comme pour la figure 3.5, la dépendance en température est plus grande dans le cas de bande à moitié pleine ( $n_{tot} = 2$ ) mais ici, même à très haute température, la densité spectrale semble fortement dépendre du remplissage. En plus, dans le cas de la limite atomique, la dépendance en température est plus marquée que dans le cas où les électrons sont itinérants (figure 3.5), où le pseudogap n'est pas complètement ouvert pour  $T = 0.0067$  et semble plutôt saturer en s'approchant du cas avec bande à moitié pleine. Cela est dû au fait que l'itinérance réduit le temps de vie des Cooperons et donc réduit l'échange bosons-électrons qui est à l'origine du pseudogap. Dans la partie (b), on voit une comparaison de  $\rho_{rel}$  entre le cas que nous avons résolu de façon auto-cohérente et le cas dans la limite atomique. Les deux courbes ont été normalisées pour mettre en évidence les aspects essentiels ; en particulier pour chaque courbe on a :

$$\rho_{rel} = \frac{\rho_{min}(T_\infty) - \rho_{min}(T = 0.0067)}{\rho_{min}(T_\infty)}$$

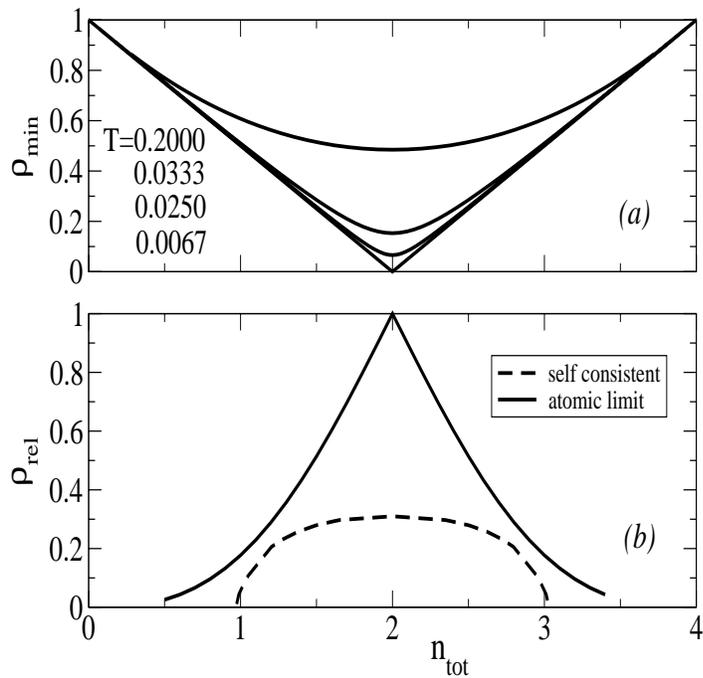


FIG. 3.8. – Variation du poids spectral de l'état *non-bonding* (a) et comparaison avec le calcul auto-cohérent (b). Dans le cas du calcul auto-cohérent, le point pour  $n_{tot} = 2$  a été ajouté par interpolation.

où  $T_\infty$  est la température pour laquelle  $\rho_{min}$  sature : nous avons utilisé  $T = 0.2$  dans le cas de la limite atomique et  $T = 0.0333$  dans le cas du calcul auto-cohérent. On déduit de la figure que prendre en compte l'itinérance des électrons modifie visiblement les propriétés de la densité d'états fermioniques, bien que l'on remarque toujours l'ouverture d'un pseudogap.

### 3.3. Densité des particules

Dans ce paragraphe nous étudions la densité des bosons de coeur dur et des électrons. Les densités en fonction du vecteur d'onde (ou nombre d'occupation) sont données par :

$$\begin{aligned} n_k^F &= \langle c_k^\dagger c_k \rangle \\ n_q^B &= \langle b_q^\dagger b_q \rangle \end{aligned}$$

et sont déterminées à partir des fonctions de Green comme expliqué dans l'appendice B ; les densités électroniques et bosoniques par site sont la somme normalisée sur tous les vecteurs d'onde de  $n_k^F$  et  $n_q^B$  respectivement.

#### 3.3.1. Densité par site

Dans la figure 3.9, nous montrons la dépendance de  $n_B$  en fonction de  $\mu$  pour des températures différentes. Même si on ne peut pas calculer les points dans une région trop proche de  $\mu = 0.5$  pour des raisons numériques, la symétrie particule-trou nous assure que toutes les courbes doivent passer par  $n_B = 0.5$  pour  $\mu = 0.5$ . Ce point a donc été ajouté à la main pour présenter le diagramme complet de  $n_B(\mu)$ . Comme on peut le constater, la méthode de développement utilisée garantit le comportement de coeur dur des bosons, avec une saturation de  $n_B$  vers la valeur 1 pour des  $\mu$  élevés. Dans la même figure, on voit la comparaison avec  $n_B(\mu)$  calculé sans effet de coeur dur pour  $T = 0.01$  et, comme prévu, le nombre de bosons par site n'est pas limité.

Dans la figure 3.10, nous avons tracé en tirets la densité par site dans le cas d'un gaz de bosons de coeur dur sans interaction avec les fermions. En absence d'itinérance de fermions, les bosons sont localisés, c'est-à-dire que leur dispersion est indépendante de  $q$  et que, donc, leur densité par site, calculable à partir de la fonction de Green libre  $K = \frac{b_0}{i\omega_m - E_0}$ , est :  $\frac{1}{e^{\beta(\Delta_B - 2\mu)} + 1}$  qui reflète la caractéristique de coeur dur et qui est en accord avec le fait que les bosons localisés se comportent comme des fermions.

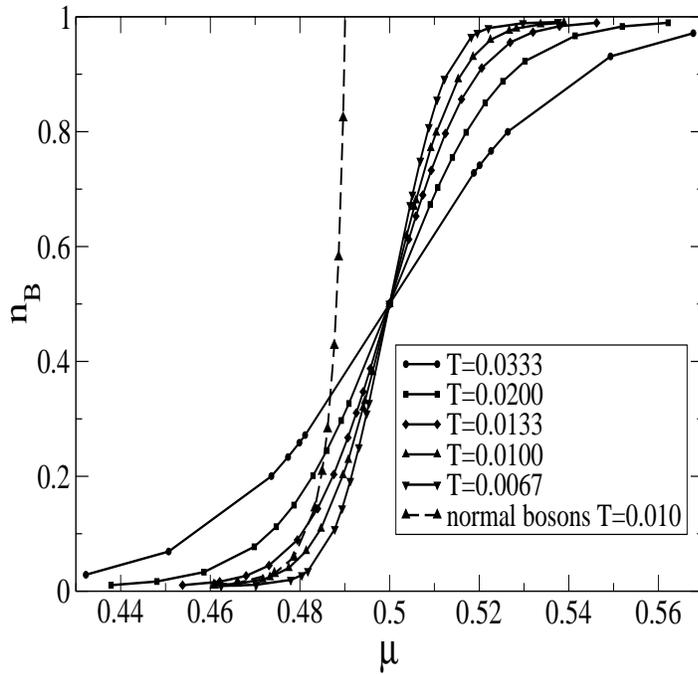


FIG. 3.9. – Variation de la densité par site des bosons en fonction de  $\mu$  pour des températures différentes (en lignes continues). La saturation vers 1 est une conséquence directe de la nature de coeur dur des bosons. En tirets on voit la densité des bosons dans le cas où l'effet de coeur dur est négligé ( $T=0.010$ ).

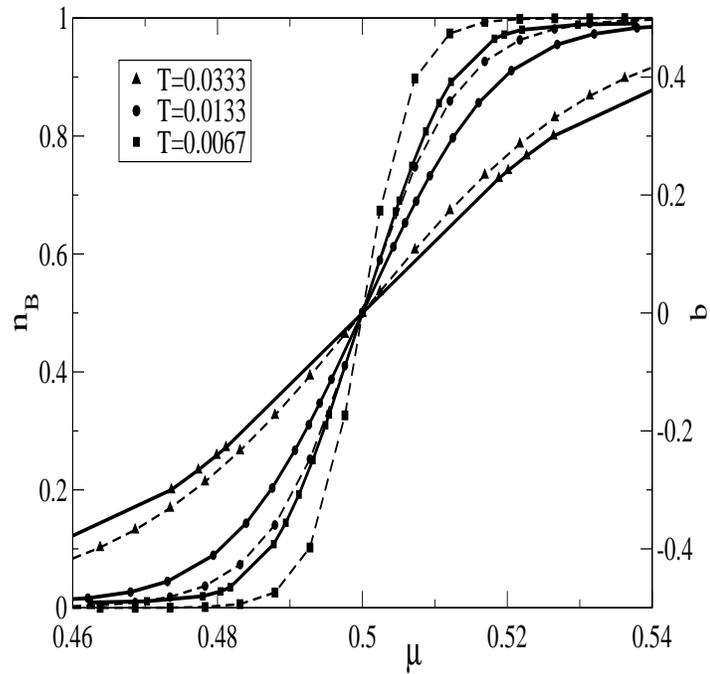


FIG. 3.10. – Les tirets montrent la densité de bosons par site dans le cas d'un gaz de bosons de coeur dur localisés ( $v = 0$ ). La ligne continue montre comment cette densité change quand un gaz de fermions induit une itinérance dans ce gaz de bosons grâce à une interaction d'échange comme celle décrite par le BFM .

En comparant ces courbes avec les courbes en continu, obtenues en tenant compte des fermions, nous pouvons montrer l'effet que ces derniers ont en fonction de la température sur le gaz bosonique. Plus la température est basse, plus cet effet est marqué, c'est-à-dire que les courbes en continu et en traits diffèrent. Cela est en accord avec le comportement du sous-système fermionique qui a une densité d'états de plus en plus renormalisée quand on baisse la température. Sur la même figure nous reportons, dans l'échelle de droite, la valeur moyenne de l'opérateur de spin  $\langle S^z \rangle$  liée à la densité des bosons par la relation  $b = \langle S^z \rangle = n_B - \frac{1}{2}$ . Cette courbe nous permet de comprendre pourquoi l'algorithme numérique pour résoudre les équations couplées converge plus difficilement près du point  $n_B = 0.5$ ; en effet, pendant les différents pas du calcul, la quantité  $b$  oscille légèrement avant de converger. Cette oscillation, sans conséquence pour des  $\mu$  bas, devient critique pour le cas de bande moitié pleine, où de très petites variations du potentiel chimique impliquent de grandes variations de  $n_B$  et, éventuellement, un trop grand rapprochement de  $b$  vers zéro qui implique à son tour des singularités dans les équations. Nous remarquons enfin le fait que, dans les différentes figures, pour  $\mu$  très bas le nombre de  $n_B$  semble être constant au lieu de tendre franchement vers zéro. Cela est la conséquence du fait que la température n'est pas nulle et donc qu'un certain nombre de bosons est toujours virtuellement excité. En baissant  $\mu$  au-delà d'une certaine limite, donc, on baisse plutôt le nombre de fermions  $n_F$  comme on peut le voir dans la figure 3.11 où on compare aussi, pour  $T = 0.0067$ , la densité par site des fermions dans les cas avec et sans interaction avec les bosons.

La figure 3.12 montre le mécanisme de remplissage d'un système régi par l'hamiltonien du modèle Boson-Fermion. En augmentant la valeur du potentiel chimique  $\mu$  dans la limite de remplissages très bas, le nombre de fermions croît rapidement et les bosons sont presque absents, excepté une petite quantité virtuellement excitée. Quand le potentiel chimique s'approche de la valeur  $\frac{\Delta_B}{2}$  correspondant grosso modo à l'énergie par particule des bosons, ces derniers commencent aussi à être réellement excités et leur nombre grandit brusquement aux dépens du nombre de fermions qui reste pratiquement bloqué aux environs de 0.5. La raison à cela est que jusqu'à ce que tous les états bosoniques ne sont pas occupés, ils restent favorables, au niveau énergétique, par rapport à ceux fermioniques. Ce phénomène est clairement visible dans la figure 3.12b, où on voit, pour  $n_{tot} < 1$ , le nombre d'électrons augmenter rapidement alors que celui des bosons est très bas. Au-delà d'un certain seuil de  $n_{tot}$  qui dépend de la température, on voit le nombre de bosons augmenter alors que celui des fermions sature. Dans un système sans coeur dur, augmenter encore  $n_{tot}$  très au-delà de ce seuil, n'aurait presque pas d'effet sur les électrons, et le nombre des bosons croîtrait sans

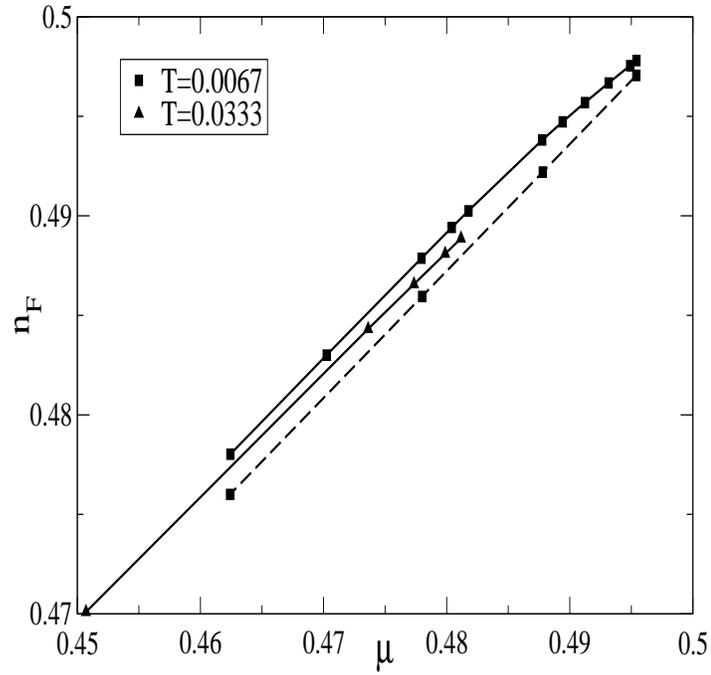


FIG. 3.11. – En ligne continue nous représentons la densité par site des fermions pour deux températures différentes. En tirets nous avons reporté la densité calculée pour  $T = 0.0067$  et pour le cas où l'interaction avec les bosons est supprimée (propagateur fermionique nu et donc  $n_F = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} + 1}$ )

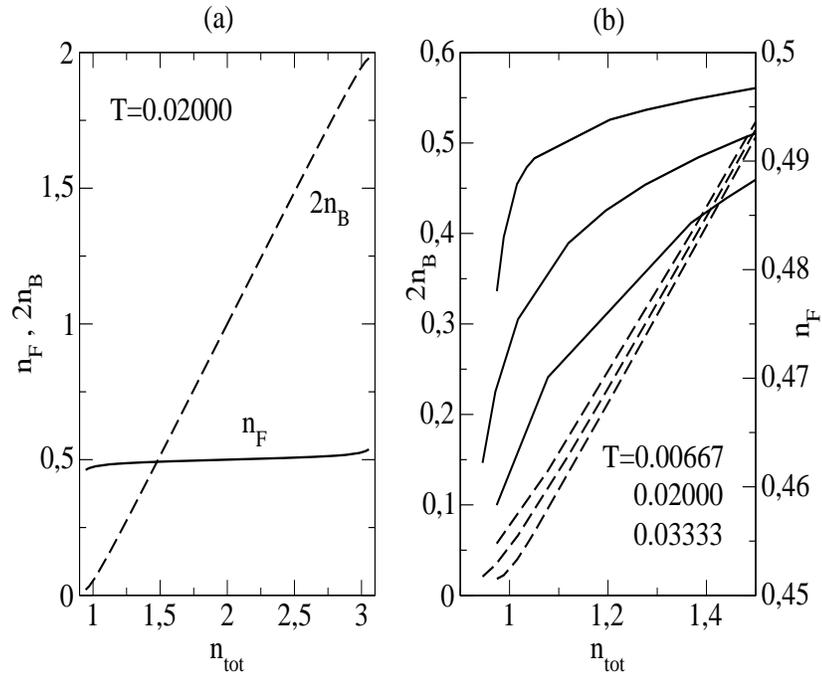


FIG. 3.12. – Comparaison entre la variation de  $n_F$  (en ligne continue) et  $n_B$  (en tirets) en fonction de  $n_{tot}$ . Dans la partie (b) nous montrons un agrandissement pour plusieurs températures. Nous remarquons la non linéarité de  $n_B(n_{tot})$  pour des concentrations inférieures à 1.

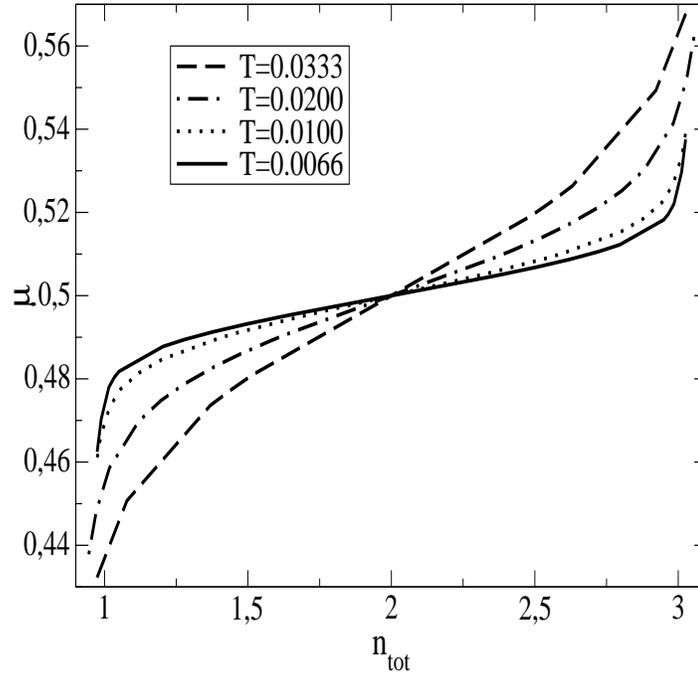


FIG. 3.13. – Variation du potentiel chimique en fonction du remplissage.

limite. Néanmoins, dans notre cas, l'effet de coeur dur bloque le nombre de bosons du réseau à un par site et donc, une fois les états bosoniques disponibles saturés, augmenter encore  $\mu$  provoque une nouvelle augmentation rapide de  $n_F$  comme on peut commencer à le percevoir près de  $n_{tot} = 3$  dans la partie (a) de la figure en question.

Pour finir, nous montrons aussi la variation de  $\mu$  en fonction du remplissage (figure 3.13) et nous mettons en évidence ce blocage du potentiel chimique, plus ou moins important selon la température, dû aux bosons et présent dans une large région autour de  $n_{tot} = 2$ . Plus la température est basse, plus la courbe de  $\mu$  tend à s'aplatir autour du milieu de la bande ( $n_{tot} = 2$ ) car la largeur de la densité d'états bosonique se réduit progressivement avec la température.

### 3.3.2. Nombres d'occupation

Comme toute autre grandeur de notre système,  $n_k^F$  et  $n_q^B$  varient en fonction de la température et du remplissage. La partie (a) de la figure 3.14 montre le comportement de  $n_k^F$  pour différentes températures. Cette figure nous permet aussi de déterminer le vecteur de Fermi  $k_F$  car, en admettant une symétrie particule-trou pour les électrons valable pour de basses énergies d'excitation  $\omega$  du système, on peut démontrer [?] que

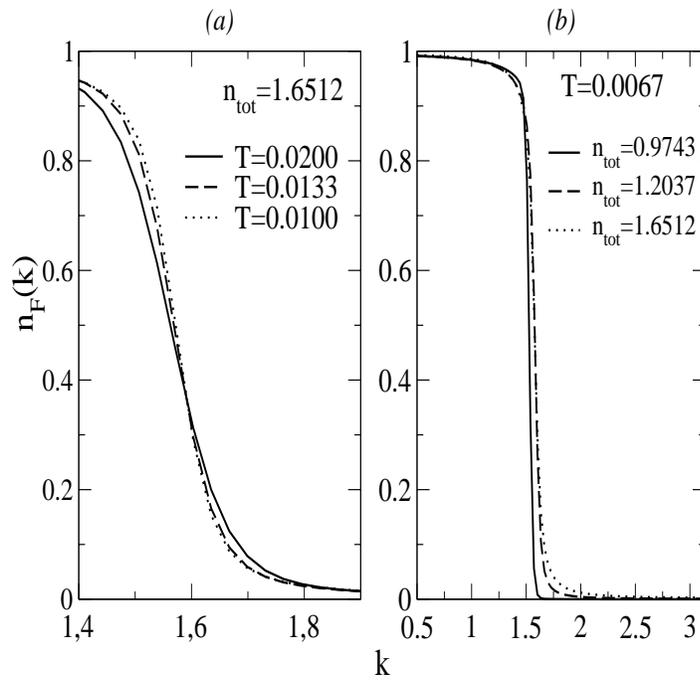


FIG. 3.14. – Nombre d'occupation fermionique en fonction de la température pour un remplissage fixé (a) et en fonction du remplissage pour une température fixée (b).

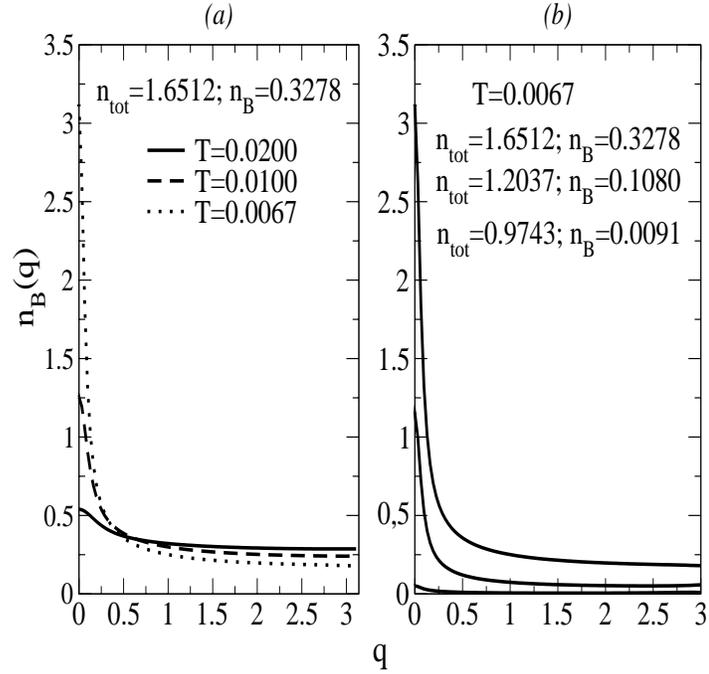


FIG. 3.15. – Nombre d’occupation des bosons en fonction de la température  $(a)$  et du remplissage  $(b)$ .

$\frac{\partial n_{k_F}^F(T)}{\partial T} = 0$  ( dans le cas où cette symétrie est valable pour toutes les  $\omega$  nous aurions  $n_{k_F}^F(k_F) = 0.5$  ). Dans la partie  $(b)$  de la figure, nous montrons les changements pour une température fixée et des remplissages différents. La configuration est la même pour la figure 3.15 où, cette fois, on montre le comportement de  $n_q^B$ . Dans la figure 3.14(a) on peut voir que les trois courbes deviennent de plus en plus raides autour du vecteur de Fermi  $k_F$  quand on baisse la température, comme l’on s’y attend. La figure 3.15 nous permet également de mettre en évidence le rapprochement de la phase superfluide. Comme on peut le remarquer, dans la partie  $(a)$  le mode  $q = 0$  est de plus en plus peuplé si on baisse la température ce qui indique une condensation des bosons (auxquels les cooperons, dont on a parlé auparavant, sont intimement liés). Dans la partie  $(b)$  nous observons que la partie des bosons condensés augmente lorsque l’on approche un remplissage (ou dopage) plus élevé.

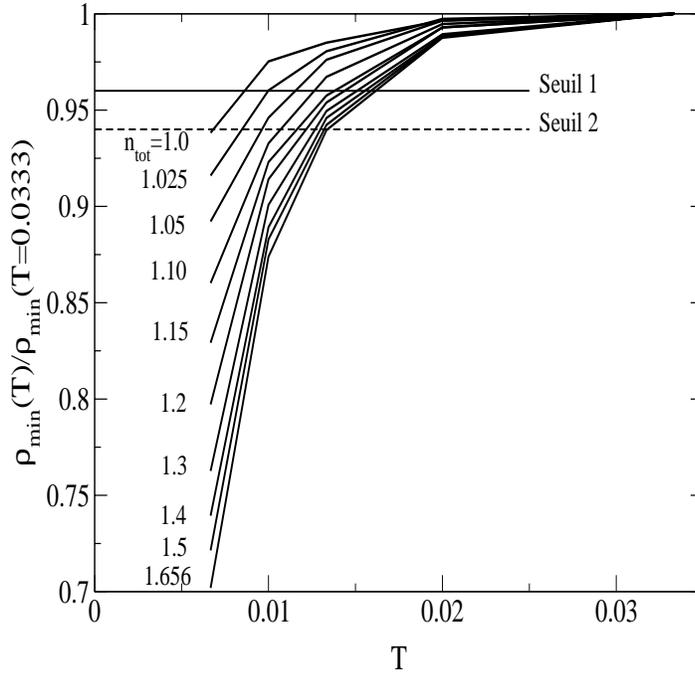


FIG. 3.16. – Les points d’intersection des courbes avec l’un des deux seuils représentent les valeurs de  $T^*$  en fonction de  $n_{tot}$ .

### 3.4. Température d’ouverture du pseudogap $T^*$

La température d’ouverture du pseudogap est une grandeur très discutée car, comme on l’a déjà mentionné, elle représente la température pour laquelle on commence à avoir l’appariement d’électrons nécessaire pour la création d’une phase superfluide. Sa détermination présente le sérieux problème de définir avec un critère objectif la transition entre deux états qui ne sont pas séparés par une transition de phase. Une solution possible est celle d’étudier, à partir du diagramme de la figure 3.5, l’évolution de  $\rho_{min}$  en fonction de la température pour plusieurs  $n_{tot}$  fixés. On obtient ainsi la figure 3.16 où  $\rho_{min}$  est représenté normalisé par rapport à sa valeur à  $T = 0.0333$  qui est la plus haute température étudiée. L’intersection entre les courbes et le seuil horizontal 1 arbitrairement fixé est notre définition de  $T^*$  et son évolution en fonction de  $n_{tot}$  est reportée en ligne continue dans la figure 3.17. Les points pour  $n_{tot} > 2$  de cette dernière ont été retrouvés en utilisant la symétrie particule-trou dont nous avons parlé au début du chapitre. Le choix du seuil, bien que raisonnable, ne peut être qu’arbitraire à cause du fait qu’il n’y a pas ici une vraie transition entre l’état avec pseudogap et l’état sans, ce qui fait qu’aucun paramètre ne montrera une variation

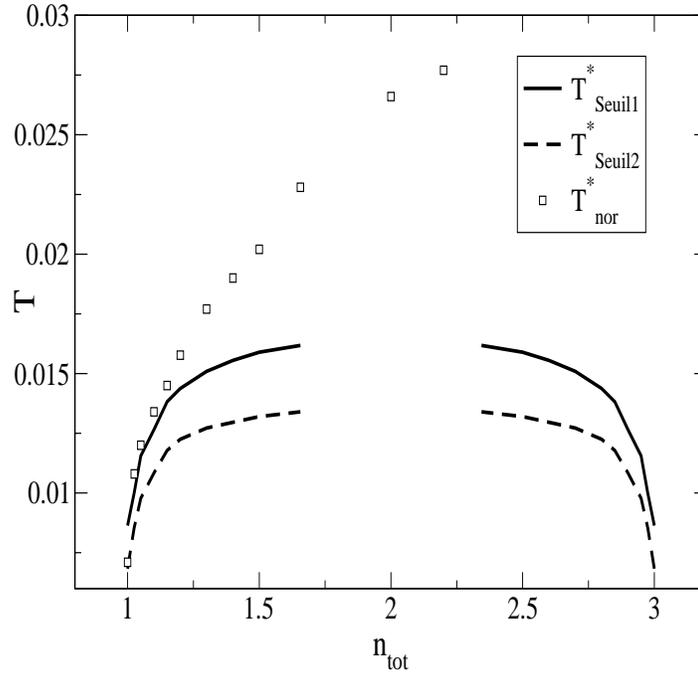


FIG. 3.17. – Température  $T^*$  d’ouverture du pseudogap en fonction de la concentration totale de particules. Les courbes représentent le  $T^*$  calculé en tenant en compte l’effet de coeur dur. Les carrés se réfèrent par contre au cas sans coeur dur. On remarque le fait que dans ce dernier cas,  $T^*$  peut augmenter sans limite.

brusque caractérisant la température qui délimite les deux états. Néanmoins, changer ce seuil ne change pas qualitativement le résultat comme on peut le voir dans la figure 3.17 où la ligne en tirets a été tracée grâce au seuil 2 de la figure 3.16. Toujours dans cette figure, on peut remarquer la grandeur  $T^*$  calculée pour le BFM où l’effet de coeur dur est négligé : on voit bien que la  $T^*_{nor}$  ne tend pas à saturer et l’absence de symétrie particule-trou lui permet d’augmenter au-delà de  $n_{tot} = 2$  où, par contre, le  $T^*$  déterminé dans le cas de coeur dur commence à redescendre.

### 3.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons commencé à explorer les résultats obtenus en étudiant le modèle Boson-Fermion en prenant en compte l’effet de coeur dur des bosons. Cela nous a permis d’étudier pour la première fois le comportement du modèle en fonction du remplissage et d’en vérifier les conséquences sur le pseudogap en particulier. Même si l’interaction à courte portée des bosons en réduit l’ouverture, celui-ci est présent

comme dans le cas où l'effet de coeur dur est négligé [?]. Nous avons défini un critère qui nous permet de déterminer de façon "objective" l'ouverture du pseudogap  $T^*$  et nous avons tracé son évolution en fonction du remplissage  $n_{tot}$ . Cette dernière courbe représente une partie du diagramme de phase de ce modèle que nous compléterons dans le chapitre suivant.

# 4. Étude des Propriétés Spectrales

Dans ce chapitre nous étudions les propriétés spectrales du modèle Boson-Fermion en fonction de la température et du remplissage. Après avoir expliqué le mécanisme de dopage nous calculons, grâce aux fonctions spectrales, la masse des porteurs de charges superfluides du système. Comme nous le verrons, elle joue un rôle essentiel dans la détermination du diagramme de phase. Ce dernier nous permet d'étudier le comportement du modèle et de mettre en évidence les deux mécanismes différents qui régissent la transition entre la phase normale et celle supraconductrice dans les cas sous-dopé et sur-dopé.

## 4.1. Mécanisme de dopage

Doper un système décrit par le modèle Boson-Fermion signifie changer le nombre de particules totales  $n_{tot}$ , c'est-à-dire changer à la fois le nombre des paires pré-formées ( $n_B$ ) et le nombre d'électrons itinérants ( $n_F$ ). Ce mécanisme de dopage qui affecte les deux sous-systèmes électronique et bosonique est assez proche de la réalité expérimentale des supraconducteurs à haut  $T_c$ . Par exemple, d'un point de vue chimique, pour l'YBCO, doper implique l'ajout d'un atome d'oxygène dans les couches diélectriques du matériau comme montré dans la figure 4.1. Pour que la nouvelle configuration créée soit stable, deux électrons doivent être cédés à l'atome dopant par les atomes environnants. Dans le cas de faible dopage, des expériences XPS, qui montrent que le changement du nombre d'ions  $Cu(1)^{++}$  est proportionnel à  $2x$  dans le composé  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  [?], indiquent clairement que ce sont les deux ions de cuivre voisins qui cèdent l'un de leurs électrons en se transformant de  $Cu(1)^+$  en  $Cu(1)^{++}$ . Néanmoins, en augmentant la concentration d'atomes dopants au-delà d'un certain seuil ( $x > 0.25$  pour  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  par exemple), tous les ions  $Cu(1)^+$  des plans diélectriques seront devenus  $Cu(1)^{++}$  et ils ne pourront plus céder d'autres électrons car l'état  $Cu(1)^{3+}$  n'est pas énergétiquement favorable. Ce seront les plans métalliques qui devront céder

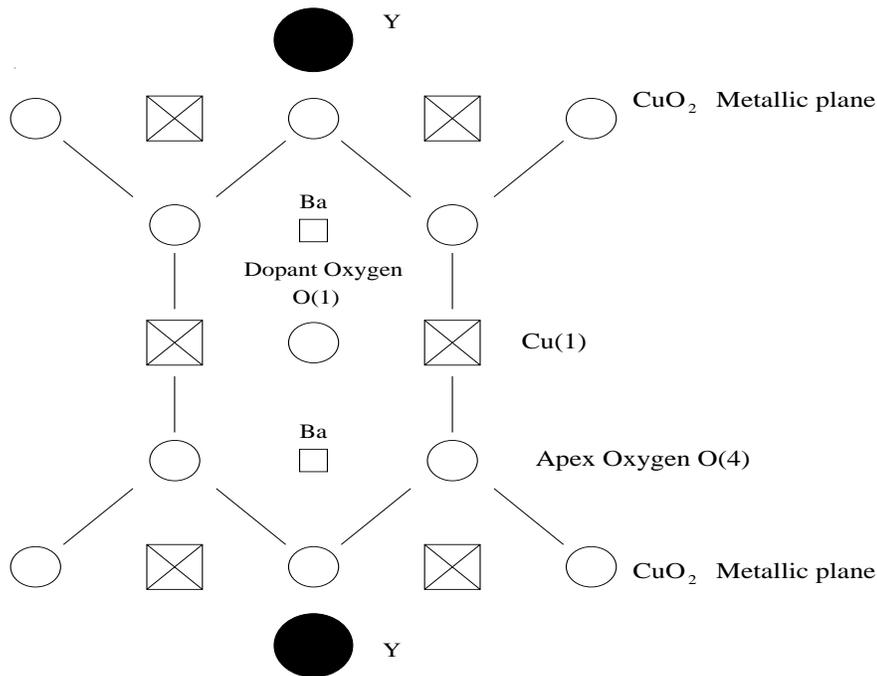


FIG. 4.1. – Structure schématique du matériau YBaCuO. À partir de la configuration isolante  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  avec  $x = 0$ , en oxydant le matériau, on peut ajouter des atomes d’oxygène O(1) en faisant ainsi varier  $x$  entre 0 et 1. Pour  $x \geq 0.25$  le composé est supraconducteur à basse température. En même temps, on “oxyde” les ions de cuivre  $Cu(1)^+ \rightarrow Cu(1)^{++}$ . En chauffant  $YBa_2Cu_3O_7$  en absence d’oxygène on peut obtenir le processus inverse avec “réduction” des ions de cuivre :  $Cu(1)^{++} \rightarrow Cu(1)^+$ .

des électrons en créant ainsi des trous dans la mer de Fermi des plans  $CuO_2$ . D'autres expériences qui mesurent la taille de la surface de Fermi [?], montrent que la courbe de  $T_c$  en fonction du dopage est décalée par rapport à celle qu'on observerait si le dopage impliquait le changement de concentration d'un seul type de charge du système. De même, des études XAFS [?] montrent que pour que la phase supraconductrice puisse exister, le dopage doit mettre en jeu des trous aussi en-dehors des plans métalliques  $CuO_2$ .

Dans les paragraphes suivants, nous présentons nos résultats en fonction du remplissage  $n_{tot}$  et du dopage  $1 - 2n_F$ . Nous remarquons que, vue la relation entre  $n_F$  et  $n_{tot}$  (voir figure 3.12), le remplissage et le taux de dopage  $1 - 2n_F$  varient de façon opposée.

## 4.2. Fonctions spectrales

La fonction spectrale que nous avons utilisée est [?] :

$$A_{F,B}(q, \omega) = -2Im \{B^{ret}(q, \omega)\}$$

où  $B^{ret}(q, \omega) = G(q, i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta)$  ou  $B^{ret}(q, \omega) = K(q, i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta)$  est la fonction de Green retardée associée respectivement aux fermions et bosons dont on veut calculer les propriétés spectrales. L'intérêt de ce type de fonction réside dans le fait qu'elle nous donne des informations directes sur le système : la largeur à mi-hauteur de  $A(q, \omega)$  est directement liée au temps de vie des quasi-particules et, dans le cas où ces quasi-particules sont bien définies, de ses pôles on peut reconstruire la relation de dispersion qui lie le vecteur d'onde  $q$  et l'énergie  $\omega$ .

La fonction spectrale des fermions peut être mesurée expérimentalement avec la photo-émission résolue en angle (ARPES). Il s'agit d'une technique qui a récemment donné des résultats importants pour la compréhension du pseudogap et qui consiste à envoyer des photons sur un échantillon et à mesurer le courant électrique généré par leur absorption. Dans une certaine approximation qu'on peut vérifier expérimentalement [?], le courant  $I$  mesuré peut être lié à la fonction spectrale avec la formule suivante :

$$I(k, \omega) = I_0(k)f(\omega)A_F(k, \omega)$$

où  $f$  est la fonction de Fermi,  $I_0(k)$  un facteur indépendant de la température et de l'énergie  $\omega$ , et  $A_F$  la fonction spectrale calculée à partir de la fonction de Green

des fermions  $G$ . Même si les éléments de matrice  $I_0(k)$  restent difficiles à déterminer, on peut quand même obtenir des informations [?] sur le poids spectral  $A_F^-(k, \omega) = f(\omega)A(k, \omega)$  nécessaire pour extraire une particule de l'échantillon.

Comme nous l'avons démontré dans l'appendice A, la définition de fonction spectrale adoptée implique, dans le cas bosonique, la normalisation suivante :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_B(q, \omega) = \langle S^z \rangle = b$$

Dans le régime de remplissage  $0 < n_{tot} < 2$  que nous prenons en considération le coefficient  $b$  est négatif. On pourrait changer facilement la définition de la fonction spectrale pour avoir une normalisation unitaire, mais cela nécessite l'utilisation d'une définition différente de celle standard avec le risque de confusion. Nous avons donc préféré utiliser la définition usuelle et préciser que nos fonctions spectrales sont présentées avec le signe changé. Mêmes considérations pour la densité d'états (DOS) définie de la façon suivante :

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2N\pi} \sum_q A_F(q, \omega)$$

où  $N$  est le nombre de vecteurs de la zone de Brillouin sur lesquels on effectue la somme.

### 4.2.1. Étude des fonctions spectrales bosoniques

#### Bosons à coeur dur

Nous avons analysé le sous-système bosonique pour trois concentrations et trois températures différentes de façon à mettre en évidence son comportement pour toute la gamme de ses paramètres. Les fonctions spectrales dépendant du vecteur d'onde, nous avons décidé de ne les tracer que pour les premiers vecteurs d'onde car ce sont ceux qui correspondent aux états excités dans la gamme de température qui nous intéresse. En comparant les trois figures 4.2, 4.3 et 4.4, on s'aperçoit que, en augmentant la densité  $n_{tot}$ , c'est-à-dire en baissant le dopage par trous, les fonctions spectrales des bosons deviennent de plus en plus pointues et étroites, montrant ainsi un temps de vie de plus en plus grand (remarquer la différence dans les échelles pour les trois cas de dopage). En prenant en considération une concentration particulière, on voit que le même effet est obtenu en baissant la température, ce qui montre que les bosons deviennent de

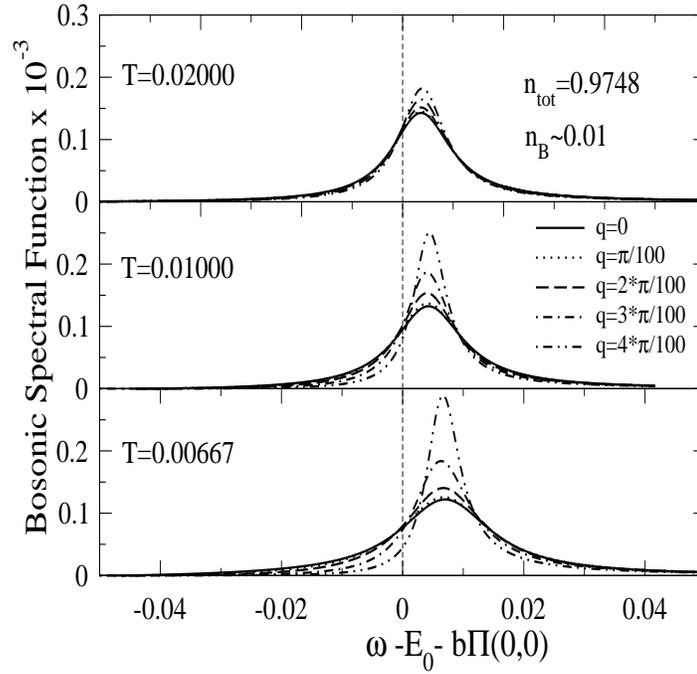


FIG. 4.2. – Fonctions spectrales bosoniques pour trois températures différentes. Cas sur-dopé en terme de trous.

bonnes quasi-particules. Ce résultat est en accord avec ce qu'on retrouve dans le cas où l'effet de coeur dur est absent (voir paragraphe suivant) et il montre que sur ce point, tenir compte de la nature de coeur dur des bipolarons ne change pas la physique sous-jacente.

### Bosons standard

Nous reportons ici et dans les paragraphes qui suivent, des résultats obtenus en résolvant les équations du BFM sans effet de coeur dur (voir paragraphe 2.4.2). Dans la figure 4.5, nous montrons les fonctions spectrales bosoniques calculées pour une température fixée et pour deux densités différentes. Comme dans le cas avec coeur dur, les particules acquièrent un temps de vie de plus en plus long en augmentant le remplissage  $n_{tot}$ .

## 4.2.2. Masse effective des bosons

### Bosons à coeur dur

À partir de la fonction de Green  $K$  des paires pré-formées, on peut déterminer les relations de dispersion pour les bosons et ainsi pour les cooperons. Il s'agit de résoudre

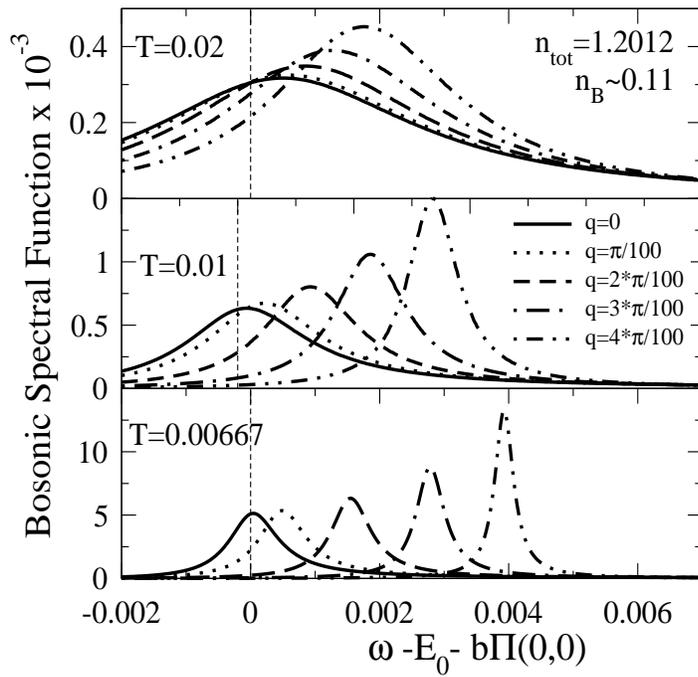


FIG. 4.3. – Fonctions spectrales bosoniques pour trois températures différentes. Cas légèrement sur-dopé en terme de trous.

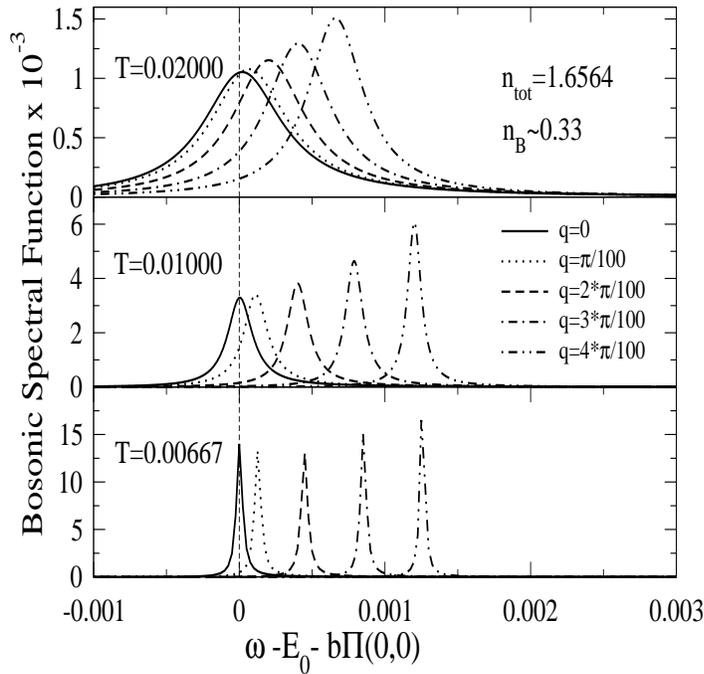


FIG. 4.4. – Fonctions spectrales bosoniques pour trois températures différentes. Cas sous-dopé en terme de trous.

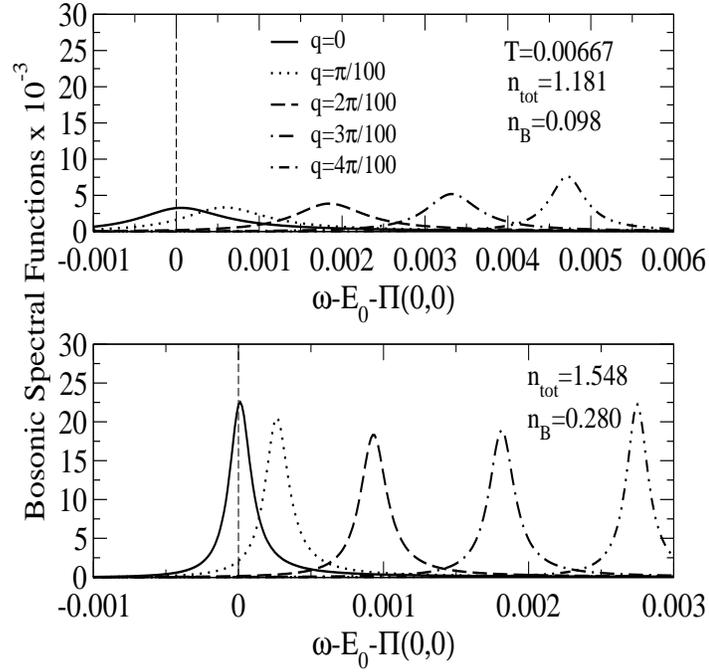


FIG. 4.5. – Fonctions spectrales pour les bosons sans coeur dur.

l'équation :

$$\omega_q^B = E_0 + b\Re e \{ \Pi(q, \omega_q^B + i\delta) \}$$

avec  $\delta \rightarrow 0$  ou, plus simplement, d'étudier la variation du maximum de la fonction spectrale bosonique. Le résultat est montré dans les figures 4.6 et 4.7 pour des concentrations et des températures différentes.

Pour calculer la masse effective des particules, nous procédons de la façon suivante : pour de bas vecteurs d'onde  $q$ , on peut approximer la relation de dispersion d'un gaz de bosons sur réseau avec la relation :

$$\omega_q^B = Mq^2 = \frac{\hbar^2}{2m_B^*} q^2 \quad (4.1)$$

où la quantité  $m_B^*$  est la masse effective que nous voulons déterminer. Pour ce faire, nous calculons  $M = \frac{\hbar^2}{2m_B^*}$  en approximant les dispersions des figures 4.6 et 4.7 avec une courbe quadratique  $Mq^2$ . Nous normalisons la masse  $m_B^*$  ainsi obtenue par rapport à la masse d'un électron itinérant sur le réseau décrit par le modèle que nous étudions :

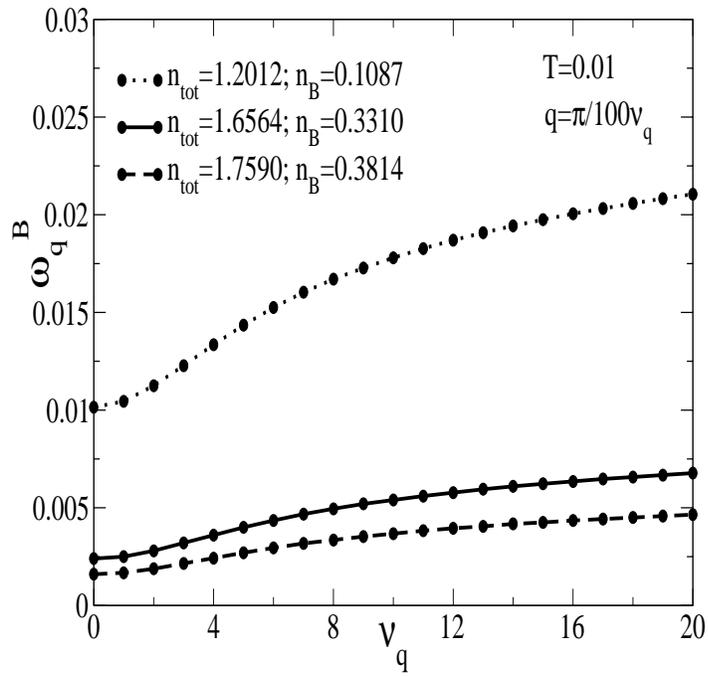


FIG. 4.6. – Dispersion des bosons de coeur dur pour trois remplissages différents à température  $T = 0.010$ .

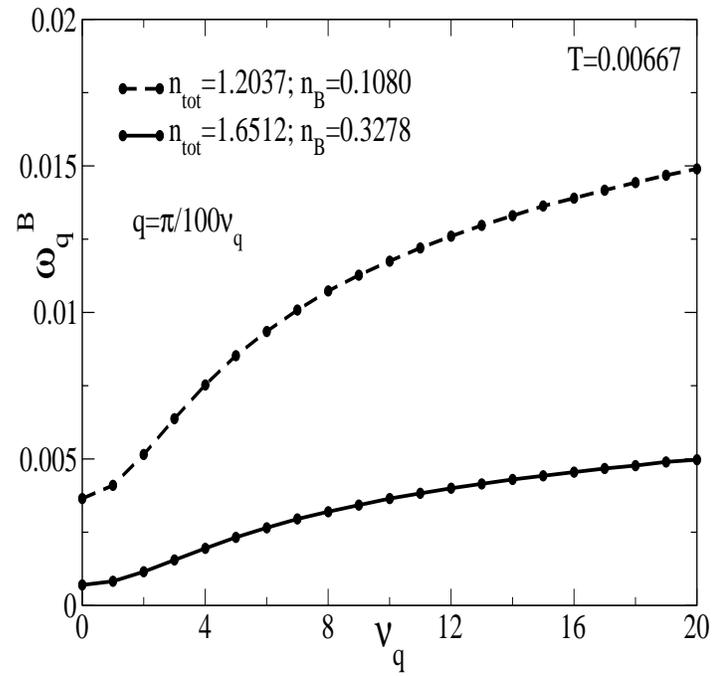


FIG. 4.7. – Dispersion des bosons de coeur dur pour deux remplissages différents à température  $T = 0.00667$ .

T	$n_p$	$m_B^* = m_p$	$n_F$	$n_{tot}$
0.00667	$9.59 \cdot 10^{-3}$	2.23	0.995	1.64
0.0100	$7.86 \cdot 10^{-3}$	2.63	0.994	
0.0200	$6.46 \cdot 10^{-3}$	5.81	0.990	
0.00667	$7.30 \cdot 10^{-3}$	0.71	0.988	1.20
0.0100	$6.42 \cdot 10^{-3}$	1.00	0.984	
0.0200	$5.56 \cdot 10^{-3}$	2.91	0.971	

TAB. 4.1. – Variation de la masse efficace  $m_p$  des bosons et du nombre de cooperons  $n_p$  en fonction de la température et pour deux remplissages,  $n_{tot} = 1.20$  et  $n_{tot} = 1.64$ .

$$\xi_q = D - D \cos q \simeq \frac{D}{2} q^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{el}^*} q^2 \quad (4.2)$$

où, dans le dernier passage, nous avons fait paraître la masse effective de l'électron sur le réseau. En effectuant la division entre les deux équations 4.2 et 4.1 nous trouvons enfin :

$$\frac{m_B^*}{m_{el}^*} = \frac{0.25}{M}$$

qui nous permet de trouver les valeurs résumées dans le tableau 4.1. Ce tableau montre que la mobilité des bosons augmente grâce à la réduction de la masse quand on approche la phase supraconductrice. Dans le même tableau, nous reportons aussi une autre quantité physique ( $n_p$ ) dont nous parlerons dans les paragraphes suivants.

### Bosons standard

En partant de la fonction de Green bosonique sans coeur dur et avec une procédure tout à fait similaire à celle décrite ci-dessus, nous pouvons déterminer la masse des bosons dans le modèle BFM sans coeur dur. Dans la figure 4.8, nous montrons la variation de la dispersion des bosons pour une température fixée et pour plusieurs remplissages. Les masses effectives calculées sont reportées dans le tableau 4.5.

## 4.3. Propagateur des cooperons

Dans notre système, de type fortement corrélé, nous avons trois sortes d'excitation :  
– les électrons libres qui, dans l'analogie avec les supraconducteurs à haute température critique, sont à identifier avec les électrons des plans  $CuO_2$

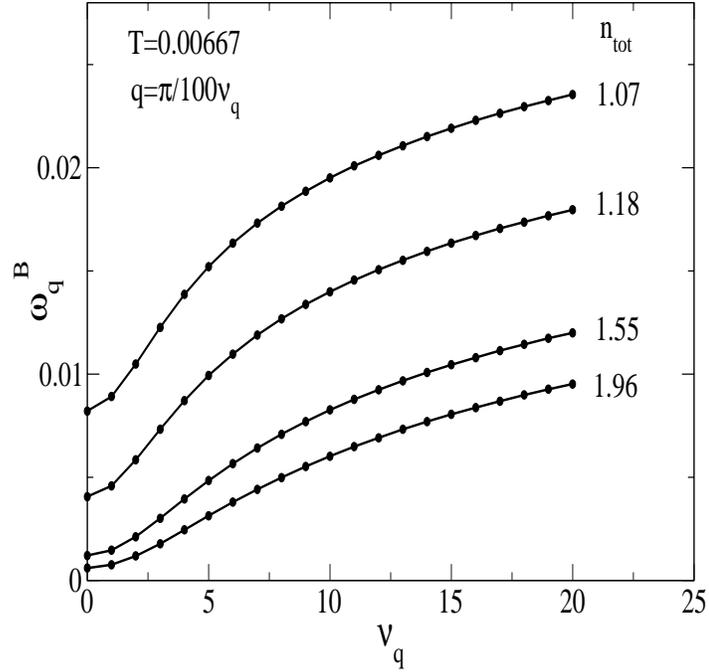


FIG. 4.8. – Dispersion des bosons standard pour plusieurs remplissages différents

- les paires pré-formées, qui peuvent être considérées comme des paires d'électrons existant dans les plans diélectriques du matériau. Elles peuvent être formées dans plusieurs composés grâce à différents mécanismes, dont celui dû à la forte interaction électron-phonon discuté en détail dans la littérature (voir par exemple [?]) et qui donne naissance aux bipolarons.
- les cooperons, qui sont les électrons appariés grâce à l'interaction d'échange entre les électrons libres et les paires pré-formées.

Nous avons jusqu'ici introduit le propagateur  $G$  pour les électrons et le propagateur  $K$  pour les paires pré-formées dont nous avons discuté les propriétés spectrales. Maintenant, nous introduisons également le propagateur des cooperons :

$$C_{ij}(\tau) = \langle T [c_{i\uparrow}^+(\tau)c_{i\downarrow}^+(\tau)c_{j\downarrow}(0)c_{j\uparrow}(0)] \rangle .$$

En développant cette expression avec le théorème de Wick et en passant dans l'espace de Fourier, nous obtenons la relation suivante qui lie ce propagateur à la fonction  $K(q, \omega_m)$  :

$$C(q, \omega_m) = \frac{1}{v^2} \Pi(q, \omega_m) + \frac{1}{v^2} \Pi^2(q, \omega_m) K(q, \omega_m)$$

Ce propagateur prend en compte toutes les paires électroniques : celles corrélées dont la formation est directement liée à l'échange avec les bosons pré-formés et celles dé-corrélées. En effet, déjà dans le gaz de fermions sans interaction sur réseau, chaque électron peut se trouver dans trois états possibles : (1) électron avec spin "up" dans le site  $i$  (2) électron avec spin "down" dans le site  $i$  (3) paire dé-corrélée d'électrons avec spin "up" et "down" sur le même site  $i$ .

En ajoutant l'échange électron-boson, on ajoute aux paires dé-corrélées, formées à cause de la statistique du système, les paires corrélées induites. C'est ce type de paire qui est responsable de la super-fluidité et qui est appelé cooperon.

La masse  $m_p$  de ce dernier est identique à la masse des bosons  $m_B^*$  calculée dans le paragraphe 4.2.2, car la position des pôles de  $C(q, \omega_m)$  est déterminée par la fonction  $K$  étant donné que la self-énergie des fermions  $\Pi(q, \omega_m)$  n'a pas de pôles. Pour la même raison, les propriétés spectrales des paires pré-formées que nous avons étudiées dans le paragraphe 4.2.1, sont aussi directement liées aux propriétés spectrales des cooperons. Les figures 4.2, 4.3 et 4.4 montrent donc que pour de hautes températures, l'apparition de ces paires corrélées est accompagnée d'un mode diffusif qui, très vite, implique l'annihilation des ces excitations à deux particules. Néanmoins, à basse température, le mouvement devient cohérent et le temps de vie plus long. Comme pour les bosons pré-formés, selon le niveau de dopage, les particules sont définies de façon plus ou moins bonne.

Le nombre  $n_p$  de charges superfluides est généralement lié au rapport  $\frac{n_p}{m_p}$  mesuré par la longueur de pénétration ou, approximativement, à la densité des porteurs de charges libres dans l'état normal déductible de la contribution de Drude dans la conductivité optique [?]. Dans le modèle étudié, ce pic de Drude est la conséquence d'un terme de type Aslamazov-Larkin dans la conductivité optique des électrons itinérants [?] qui est liée au propagateur des cooperons. Nous supposons ici que le nombre de porteurs de charges superfluides peut être estimé grâce à la deuxième partie du propagateur  $C(q, \omega_m)$ , car la première est simplement liée aux paires dé-corrélées dont on vient de parler. En conclusion nous avons :

$$n_p = \frac{1}{N\beta} \sum_{q, \omega_m} \frac{1}{v^2} \Pi^2(q, \omega_m) K(q, \omega_m)$$

Dans la table 4.1, nous résumons la variation du nombre de porteurs de charges  $n_p$  en fonction de la température et pour deux concentrations différentes pour lesquelles les bosons sont des quasi-particules bien définies.  $n_p$  change très peu avec le dopage contrairement à la masse  $m_p$  qui diminue rapidement quand le remplissage total  $n_{tot}$  est réduit.

### 4.3.1. Fluctuation de phase et d'amplitude

Le propagateur des cooperons a déjà été utilisé dans le passé dans une optique similaire à la nôtre, c'est-à-dire pour étudier la formation de paires d'électrons responsables de la phase supraconductrice. Le formalisme de champ moyen BCS a été généralisé pour étendre sa validité à la phase normale [?] et en particulier, le propagateur des cooperons a été introduit à la place du paramètre d'ordre pour être étudié de la même manière que le propagateur à un électron. Ce formalisme, développé avant la découverte des supraconducteurs à haute température critique, a aussi été appliqué par la suite pour analyser l'état pseudogap en introduisant un gap effectif au-dessus de  $T_c$  pour tenir compte de l'interaction réciproque des propriétés à une particule et à deux particules [?].

Une approche phénoménologique [?] propose d'écrire le propagateur des cooperons comme la somme de deux contributions de la façon suivante :

$$C(r, t) = C_a e^{-\frac{r}{r_0}} + C_\phi \langle e^{i\phi(r,t)} e^{-\phi(0,0)} \rangle \quad (4.3)$$

La première partie, qui est indépendante du temps, représente l'amplitude locale des paires. La deuxième partie représente les corrélations de phase qui peuvent être exprimées d'une façon approximée dans la limite de basse fréquence (qui caractérise une réponse hydrodynamique) comme  $C_\phi e^{-\frac{r}{\xi(T)}}$ . Dans ce cas, nous obtenons :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} C(r, t) = C_a e^{-\frac{r}{r_0}} + C_\phi e^{-\frac{r}{\xi(T)}} \quad (4.4)$$

où  $\xi(T)$  est la longueur de cohérence dépendante de la température. Si on suppose que le deuxième terme de  $C(r, t)$  est une conséquence du fait que le système dans l'état pseudogap se comporte comme un système décrit par un modèle XY à deux dimensions au-dessus de la température critique de Kosterlitz-Thouless  $T_{KT}$ , on peut établir un lien avec le scénario des fluctuations de phase. En particulier, en étudiant

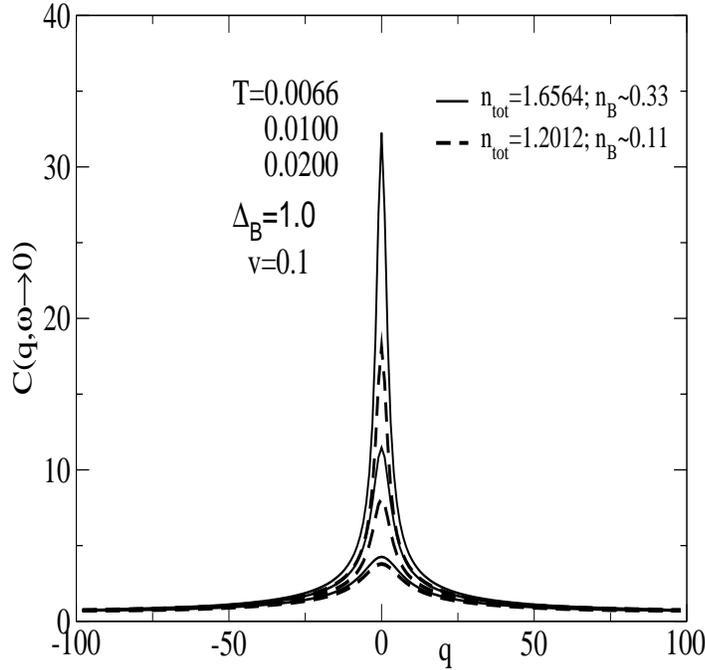


FIG. 4.9. – Évolution du propagateur des cooperons pour deux concentrations différentes en fonction de la température .

le rapport  $\frac{C_a}{C_\phi}$  et les deux longueurs  $r_0$  et  $\xi(T)$  pour différents dopages, on peut vérifier que les supraconducteurs à haute température critique sont caractérisés par un régime sous-dopé où la supraconductivité est contrôlée par des fluctuations de phase, et un régime sur-dopé où la phase pseudogap disparaît quand on augmente le dopage et la supraconductivité devient de plus en plus contrôlée par les corrélations d'amplitude.

Dans cette optique, nous avons tracé le propagateur des cooperons pour différentes températures et différents dopages. En particulier, dans la figure 4.9 nous montrons le propagateur calculé dans un cas bien sous-dopé ( $n_{tot} = 1.6564$ ) et un autre cas moins bien sous-dopé ( $n_{tot} = 1.2012$ ) dans la limite de basse fréquence pour mettre en évidence l'effet du dopage et de la température. Dans la figure 4.10, nous traçons  $C(R, \omega \rightarrow 0)$  qui, approximé par l'expression 4.3, nous permet de calculer les différents paramètres  $C_a, C_\phi, r_0, \xi(T)$ . De façon similaire, on peut aussi calculer les paramètres pour la concentration  $n_{tot} = 1.02$ . Les résultats sont résumés dans le tableau 4.2.

Nous remarquons que le poids  $C_a$  des corrélations d'amplitude locales dé-corrélées en phase décroît dans tout le régime de dopage quand on approche la température d'ouverture du pseudogap  $T^*$  par en-dessous. Dans le régime sous-dopé, en diminuant la température, le poids  $C_\phi$  des corrélations de phase des paires électroniques croît

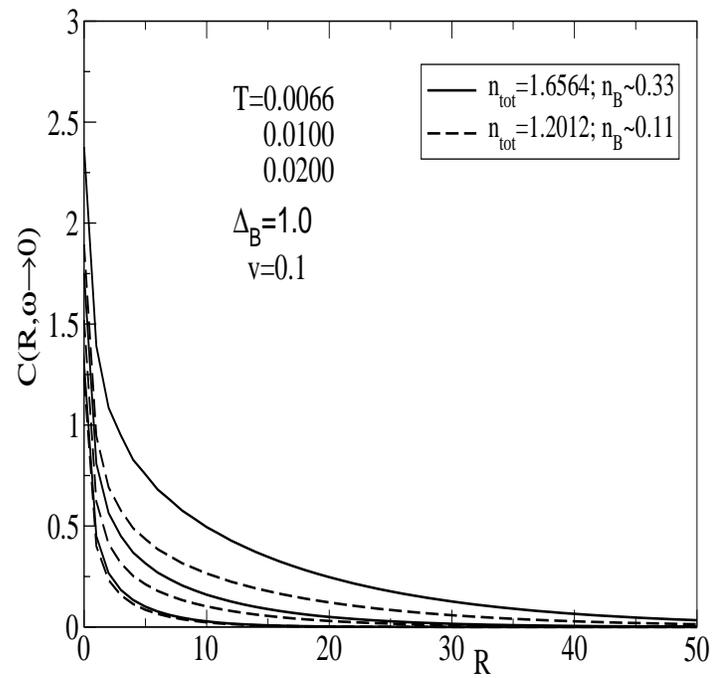


FIG. 4.10. – Dépendance spatiale du propagateur pour les cooperons pour deux concentrations différentes.

T	$C_a$	$C_\phi$	$r_0$	$\xi(T)$	$n_{tot}$
0.00667	1.31	1.06	0.91	13.75	1.65
0.01000	1.13	0.61	0.72	7.59	
0.02000	0.88	0.42	0.53	3.58	
0.00667	1.23	0.66	0.83	11.76	1.20
0.01000	1.06	0.45	0.67	6.90	
0.02000	0.86	0.37	0.52	3.51	
0.00667	1.08	0.33	0.71	9.07	1.02
0.01000	0.98	0.32	0.62	6.18	
0.02000	0.83	0.32	0.51	3.45	

TAB. 4.2. – Paramètres caractéristiques du propagateur des cooperons, approximé par la formule 4.4, calculés pour trois remplissages différents caractérisant une situation sous-dopée ( $n_{tot} = 1.65$ ), à dopage optimal ( $n_{tot} = 1.20$ ) et sur-dopée ( $n_{tot} = 1.02$ ). Les longueurs  $\xi$  et  $r_0$  sont en unité de la maille du réseau  $a$ .

rapidement avec la longueur de cohérence  $\xi$  qui est typiquement un ordre de grandeur plus grand que la longueur des corrélations d’amplitude à courte portée  $r_0$ . Dans le régime à dopage optimal ou sur-dopé,  $\xi$  a le même comportement, en fonction de la température, que dans le cas sous-dopé alors que  $C_\phi$  reste presque constant. Nous remarquons aussi la faible dépendance de  $r_0$  et  $\xi$  du dopage. En effet, en ce qui concerne la longueur de cohérence, ce résultat est en accord avec une étude expérimentale sur les supraconducteurs à haute température critique [?]. Dans ce travail, des mesures de résistivité le long de l’axe  $c$  du composé BSCCO dans un champ magnétique permettent de déterminer le champ critique  $H_{sc}$  qui est considéré comme une bonne approximation du champ critique  $H_{c2}$ . Celui-ci, inversement proportionnel à la longueur de cohérence sur le plan  $ab$ , est presque constant dans une large gamme de dopage.

Pour mettre en évidence la transition entre une supraconductivité contrôlée par les fluctuations de phase et une supraconductivité contrôlée par les fluctuations d’amplitude, nous avons calculé le rapport  $\frac{C_a}{C_\phi}$  à la température  $T^*$  pour les trois concentrations du tableau 4.2. On obtient le résultat résumé dans le tableau 4.3 qui montre comment le poids des fluctuations d’amplitude devient de plus en plus important quand on s’approche de la phase sous-dopée.

## 4.4. Détermination du diagramme de phase

Dans ce paragraphe, nous montrons que la nature de coeur dur des bosons joue un rôle déterminant dans la physique du modèle Boson-Fermion, car elle nous permet

$n_{tot}$	$\frac{C_\phi}{C_a}$	$T^*$
1.64	0.71	0.016
1.20	0.45	0.014
1.02	0.31	0.005

TAB. 4.3. – Le rapport  $\frac{C_\phi}{C_a}$  est calculé pour trois concentrations différentes et aux trois températures  $T^*(n_{tot})$  respectives.

de montrer que le diagramme de phase d'un système décrit par un tel modèle est très similaire au diagramme de phase des supraconducteurs à haut  $T_c$ .

#### 4.4.1. Rigidité de phase

Après avoir montré l'existence de deux mécanismes différents à la base de la supraconductivité dans le modèle Boson-Fermion, nous essayons ici de reproduire son diagramme de phase en mettant en évidence ses similitudes avec celui des supraconducteurs à haute température critique.

Nous avons déjà tracé dans le paragraphe 3.4 la variation de la température d'ouverture du pseudogap  $T^*$  en fonction du remplissage. Cette température indique le seuil en-dessous duquel les électrons commencent à s'apparier pour créer ce qu'on appelle les cooperons, des paires de Cooper avec moment fini. Comme notre étude des fonctions spectrales dans les paragraphes précédents de ce chapitre l'indiquent, ces cooperons qui se forment dans des positions aléatoires à l'intérieur du matériau, ont un temps de vie qui devient de plus en plus long quand on baisse la température. Pour des taux de remplissage élevés, ces excitations à deux particules sont si bien définies qu'on peut parler de vrais îlots de supraconductivité à l'intérieur du système, sans pour autant être dans une vraie phase supraconductrice. Pour rentrer dans la vraie phase supraconductrice, la formation de ces îlots doit nécessairement être accompagnée par un blocage à longue échelle de la phase des cooperons. La température  $T_\phi$  à laquelle cette phase est macroscopiquement bloquée est typiquement estimée [?, ?] grâce à la formule qui représente l'échelle d'énergie de la rigidité de la phase :

$$k_B T_\phi \simeq \hbar a \frac{n_p}{m_p} \quad (4.5)$$

où  $n_p$  est la densité des porteurs de charges superfluides et  $m_p$  leur masse effective. La constante  $a$  est de l'ordre de la longueur de cohérence ou de la distance entre les plans du réseau selon le degré d'anisotropie du système. Dans notre cas, les sites du réseau sont des sites effectifs qui ne correspondent pas à un seul atome, mais plutôt à

$n_{tot}$	$n_B$	$n_F$	$\frac{m_B^*}{m_{el}^*}$	$n_p 10^3$	$T_\phi$
1.651	0.328	0.498	2.27	9.60	0.0042
1.614	0.309	0.498	2.14	9.49	0.0044
1.494	0.251	0.497	1.56	9.04	0.0058
1.376	0.192	0.496	1.14	8.44	0.0074
1.204	0.108	0.494	0.714	7.30	0.0102
1.156	0.085	0.493	0.625	6.91	0.0111
1.051	0.035	0.490	0.454	5.88	0.0124

TAB. 4.4. – Variation de la masse efficace et de la densité des cooperons en fonction du remplissage pour une température  $T = 0.00667$ .

un ensemble d'atomes dont la distance est normalisée à un. Nous supposons que  $a$  est égal à cette distance effective entre sites.

Le nombre de porteurs de charges superfluides  $n_p$  est déterminé, comme on l'a vu dans les paragraphes précédents, en calculant le nombre de cooperons. Comme on l'a mentionné dans le paragraphe 4.3, la masse  $m_p$  de ces dernières est égale à la masse des bosons pré-formés  $m_B^*$  déjà évaluée auparavant. L'estimation de  $T_\phi$  pour différentes concentrations et à température  $T = 0.00667$  est reportée dans le tableau 4.4. Ce dernier montre que les particules acquièrent une masse croissante quand on s'approche du cas de bande moitié pleine.

Dans la figure 4.11, nous reportons le diagramme de phase ainsi obtenu pour le modèle Boson-Fermion (courbes  $T_\phi$  et  $T^*$ ). Sa forme générale est très similaire à la forme du diagramme de phase typique des supraconducteurs à haute température critique. Le remplissage  $n_{tot}$  varie de 0.9 à 2, alors que le dopage par trous  $1 - 2n_F$  change très peu (de 0.003 à 0.022). Cette variation très petite par rapport à la variation du remplissage total est due au fait que nous avons étudié le cas en une dimension. En effet, si on imagine un système en deux dimensions avec une interaction d'échange anisotrope entre les paires pré-formées et les électrons libres, on trouverait un pseudogap anisotrope similaire à celui des supraconducteurs à haute température critique. Dans ce cas, le dopage par trous affecterait de façon presque égale toutes les parties de la surface de Fermi et donc, seulement une petite fraction de dopants serait attribuée aux régions de la zone de Brillouin où le pseudogap est réellement formé, c'est-à-dire autour des points M et le long des lignes parallèles à  $[0,0]$ - $[0,\pi]$  et leurs équivalentes.

Dans le cas sous-dopé ( $2 > n_{tot} > n_0 \cong 1.1$ ), la température de formation de paire  $T^*$  est plus élevée que la température de blocage de la phase  $T_\phi$  et c'est donc cette dernière qui contrôle la supraconductivité. Au contraire, dans le cas sur-dopé ( $1.1 > n_{tot}$ ) ou avec dopage optimal ( $n_{tot} \cong 1.1$ ), la température  $T^*$  devient plus petite

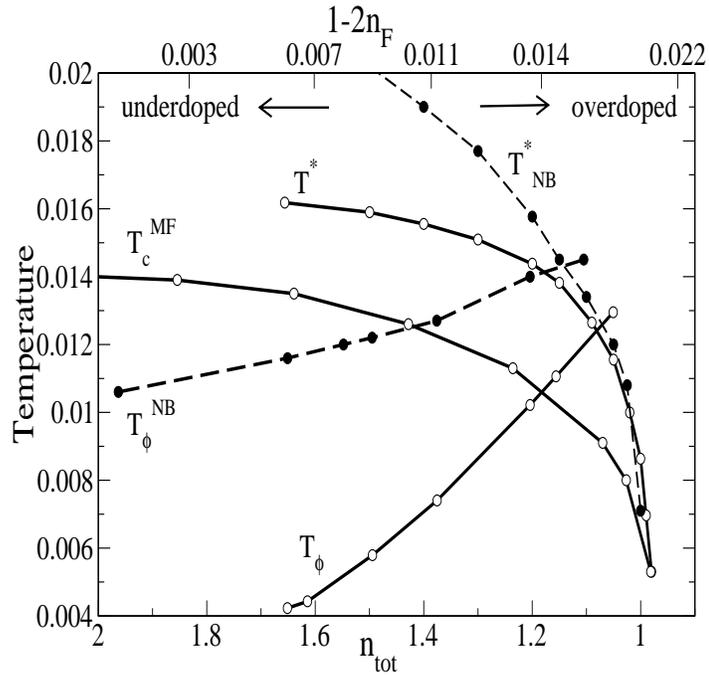


FIG. 4.11. – Diagramme de phase (courbes  $T_{\phi}$  et  $T^*$ ) du modèle Boson-Fermion en fonction du remplissage  $n_{tot}$  et du dopage par trous  $1 - 2n_F$ . Pour comparer nous traçons : (i) la température critique  $T_c^{MF}$  obtenue par calcul de champ moyen ; (ii) la température d'ouverture du pseudogap  $T_{NB}^*$  calculée dans le cas sans coeur dur (en traits) et (iii) la température qui indique la transition supraconductrice  $T_{\phi}^{NB}$ , toujours calculée dans le cas sans coeur dur.

que  $T_\phi$  et cette dernière n'a donc plus de sens étant donné qu'on ne peut pas parler de blocage de phase des paires qui ne se sont pas encore formées. Dans cette région, la supraconductivité est par conséquent contrôlée par la formation même des paires et le mécanisme est tout à fait similaire à celui BCS.

Cette transition d'une supraconductivité contrôlée par la phase à une supraconductivité déterminée par l'amplitude du paramètre d'ordre, a déjà été proposée dans la littérature par Emery et Kivelson [?]. Dans leur étude, la dépendance de la rigidité de la phase du dopage a été attribuée à la densité des charges superfluides. Dans notre cas, par contre, les calculs basés sur le modèle Boson-Fermion indiquent que cette dépendance doit être plutôt attribuée à la masse des charges.

### Bosons standard

Pour faire la comparaison, nous calculons la température de transition  $T_\phi$  dans le cas où la nature de coeur dur des bosons est négligée. Le propagateur des cooperons dans ce cas sera :

$$C^{NB}(q, \omega_m) = -\frac{1}{\bar{v}^2} \Pi(q, \omega_m) - \frac{1}{\bar{v}^2} \Pi^2(q, \omega_m) G_B(q, \omega_m).$$

D'ici nous pouvons donc estimer le nombre de paires superfluides :

$$n_p^{NB} = -\frac{1}{N\beta} \sum_{q, \omega_m} \frac{1}{\bar{v}^2} \Pi^2(q, \omega_m) G_B(q, \omega_m),$$

où, nous le rappelons,  $G_B$  est la fonction de Green pour les bosons standard et  $\bar{v} = 0.1$  est le coefficient d'échange dans le BFM sans coeur dur. La température de transition de phase peut être estimée, comme auparavant, par la formule 4.5.

Les résultats de ces calculs sont reportés dans le tableau 4.5, avec la masse des bosons normaux déterminée dans le paragraphe 4.2.2. Dans la figure 4.11, nous reportons la comparaison entre les températures relatives au cas avec coeur dur ( $T^*$  et  $T_\phi$ ) et celles relatives au cas sans coeur dur ( $T_{NB}^*$  et  $T_\phi^{NB}$ ). Comme on peut le remarquer, l'effet de coeur dur affecte la variation de la température critique en augmentant la pente de la courbe  $T_\phi$ . Cela montre clairement l'importance des corrélations à courte portée pour obtenir une température critique avec une variation proche de celle des expériences liées aux HTSC.

$m_{NB}^* = m_p^{NB}$	$10^3 n_p^{NB}$	$T_\phi^{NB}$	$n_{tot}$	$T$
0.460	6.65	0.0145	1.07	0.0067
0.583	8.34	0.0143	1.18	
1.136	13.64	0.0120	1.55	
1.761	18.8	0.0106	1.96	

TAB. 4.5. – Variation de la masse efficace des bosons standard, de la densité des cooperons (dans le cas sans coeur dur) et de la température de transition de phase  $T_\phi^{NB}$  en fonction du remplissage et pour une température fixée.

#### 4.4.2. Calcul de champ moyen

Il est utile de comparer la température de fluctuation de phase  $T_\phi$  avec la température  $T_c^{MF}$  qui délimite la phase supraconductrice déterminée par les fluctuations d'amplitude. Nous pouvons étudier le modèle Boson-Fermion dans sa phase supraconductrice par calcul de champ moyen en introduisant les deux paramètres d'ordre :

$$x = \frac{1}{N} \sum_i \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \rangle, \quad \rho = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^+ + S_i^- \rangle$$

qui sont liés respectivement aux opérateurs électroniques et aux opérateurs des bosons de coeur dur. Dans l'hypothèse de champ moyen, les produits des opérateurs  $S_i^\pm$  et  $c_{i\uparrow}^\pm c_{i\downarrow}^\pm$  de l'hamiltonien du modèle Boson-Fermion peuvent être exprimés de la façon suivante :

$$S_i^\pm c_{i\uparrow}^\mp c_{i\downarrow}^\mp = \langle c_{i\uparrow}^\mp c_{i\downarrow}^\mp \rangle S_i^\pm + \langle S_i^\pm \rangle c_{i\uparrow}^\mp c_{i\downarrow}^\mp - \langle c_{i\uparrow}^\mp c_{i\downarrow}^\mp \rangle \langle S_i^\pm \rangle$$

et le terme de fluctuation  $(c_{i\uparrow}^\mp c_{i\downarrow}^\mp - \langle c_{i\uparrow}^\mp c_{i\downarrow}^\mp \rangle) (S_i^\pm - \langle S_i^\pm \rangle)$  est négligé. Cette approximation nous permet de transformer l'hamiltonien comme suit :

$$\begin{aligned} H_{MF} &= H_F + H_B + N\left(\frac{E_0}{2} - v\rho x\right) \\ H_F &= (D - \mu) \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} - t \sum_{\langle i \neq j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \\ &\quad + \frac{v\rho}{2} \sum_i (c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ + c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}) \\ H_B &= E_0 \sum_i S_i^z + vx \sum_i (S_i^+ + S_i^-) \end{aligned}$$

La partie bosonique est directement diagonalisable, alors que pour la partie fermionique il est utile de faire une transformation de Bogoliubov en introduisant les opérateurs des bogolons  $\alpha$  et  $\beta$ ; nous obtenons :

$$\begin{aligned} H_F &= \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \\ H_B &= N [\omega_B^+ |+\rangle \langle +| + \omega_B^- |-\rangle \langle -|]. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Les vecteurs propres bosoniques sont :

$$|\pm\rangle = \frac{((\omega_B^\pm + E_0/2)|\rho_z = \frac{1}{2}\rangle + vx|\rho_z = -\frac{1}{2}\rangle)}{\sqrt{2\omega_B^\pm(\omega_B^\pm + E_0/2)}}, \quad (4.7)$$

alors que les valeurs propres fermioniques et bosoniques sont respectivement :

$$\begin{aligned} \omega_k &= \sqrt{\varepsilon_k + \frac{(v\rho)^2}{4}} \\ \omega_B^\pm &= \pm \sqrt{\left(\frac{E_0}{2}\right)^2 + (vx)^2} \end{aligned}$$

D'ici, nous pouvons obtenir les équations auto-cohérentes suivantes pour déterminer la température critique  $T_c^{MF} = \frac{k_B}{\beta_c}$  :

$$\begin{aligned} x &= -\frac{v\rho}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\beta_c \omega_{\mathbf{k}}}{2} \\ \rho \omega_B^+ &= -vx \tanh(\beta_c \omega_B^+) \\ n_F &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \quad (4.8) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( 1 - \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu)}{\omega_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\beta_c \omega_{\mathbf{k}}}{2} \right) \end{aligned}$$

$$n_B = \frac{1}{2} - \frac{E_0}{4\omega_B^+} \tanh(\beta_c \omega_B^+). \quad (4.9)$$

Dans la figure 4.11, nous reportons la courbe  $T_c^{MF}$  obtenue en résolvant ce système numériquement. Comme nous l'avons déjà vu dans le paragraphe précédent, la température  $T_c^{MF}$  ne représente pas en général le seuil de transition vers la phase supraconductrice car, pour de faibles dopages, elle est plutôt déterminée par les fluctuations de phase et pas par celles d'amplitude. Ceci n'est pas vrai dans le cas sur-dopé

où les fluctuations d'amplitude deviennent importantes et  $T_c^{MF}$  s'approche de la température  $T^*$  de formation de paires.

### 4.4.3. Effet du pseudogap sur la température $T_c^{MF}$

Les équations de champ moyen du BFM sont valables dans sa phase supraconductrice jusqu'à la transition avec la phase normale. Une technique pour résoudre ces équations est celle d'introduire la densité d'états du système  $\bar{\rho}(\varepsilon, \beta_c, \mu, n_{tot})$  et de transformer les sommes sur le vecteur d'onde en intégrales sur l'énergie. De cette manière nous obtenons l'équation self-cohérente suivante :

$$\frac{v^2}{2(\Delta_B - 2\mu)} \tanh\left(\frac{\Delta_B - 2\mu}{2T_c}\right) \int_{-0.5}^{0.5} d\varepsilon \frac{\tanh\left(\frac{0.5 - \varepsilon - \mu}{2}\right)}{0.5 - \varepsilon - \mu} \bar{\rho}(\varepsilon, T_c, \mu, n_{tot}) = 1 \quad (4.10)$$

qui est couplée avec les équations pour le nombre de particules. Une solution de ce type a été obtenue en utilisant une densité d'états elliptique en 3D [?]. Cette procédure, qui donne des résultats tout à fait raisonnables, ne tient pas compte du fait que, près de la transition supraconductrice, la densité d'états du BFM est très différente de celle d'un gaz d'électrons libres à cause de la présence du pseudogap.

Pour mettre en évidence l'effet que ce dernier a sur  $T_c^{MF}$  et vérifier l'existence d'une éventuelle diminution de la température critique avec le remplissage, on pourrait imaginer d'utiliser la densité d'états (DOS) obtenue en résolvant les équations self-cohérentes du BFM dans la phase normale. Malheureusement, pour mettre en pratique cette idée, il faudrait avoir à disposition la version analytique de  $\bar{\rho}(\varepsilon, T_c, \mu, n_{tot})$  alors que nous ne disposons que des valeurs de cette fonction pour un petit ensemble discret de ses paramètres  $T_c, \mu, n_{tot}$ . Naturellement, il serait envisageable d'utiliser les densités que nous connaissons pour construire une interpolation linéaire multidimensionnelle de la fonction en plusieurs variables  $\bar{\rho}(\varepsilon, T_c, \mu, n_{tot})$  et d'utiliser cette dernière dans la recherche de la solution de l'équation 4.10. Néanmoins, cela nécessiterait un grand nombre de données de départ, très difficile à obtenir à cause des équations du BFM dans la phase normale, dont la solution requiert beaucoup de temps de calcul. Il faut aussi rappeler que nous ne pouvons pas déterminer la  $\bar{\rho}(\varepsilon, T_c, \mu, n_{tot})$  pour des températures trop basses et donc une opération d'extrapolation (beaucoup plus risquée que celle d'interpolation) pourrait être nécessaire.

Ces problèmes purement techniques résolus, l'estimation de  $T_c$  resterait très mauvaise car la  $\bar{\rho}$  que nous utilisons ne tient pas compte de la transition de phase à  $T_c$ . Pour ces raisons, nous n'avons pas poursuivi ces calculs.

## 4.5. Densité d'états bosonique

Dans l'hamiltonien du BFM, le niveau énergétique des bipolarons est la constante  $\Delta_B$ . Cela implique que les bipolarons, en absence d'échange avec les fermions ( $v = 0$ ), sont localisés et que leur fonction spectrale est indépendante du vecteur d'onde  $q$ . Elle est constituée par un delta de Dirac centré autour de  $E_0 = \Delta_B - 2\mu$  qui comporte une densité d'états de la même forme. Quand nous activons l'interaction avec les fermions ( $v \neq 0$ ), les bipolarons acquièrent l'itinérance et la densité d'états est décalée et élargie. Dans les figures 4.12 et 4.13, nous montrons ce phénomène en fonction de la température et du dopage. Dans les deux figures, les différentes courbes montrent deux pics. Celui à haute énergie n'est pas peuplé aux températures prises en considération; l'autre, étant à basse énergie, est le plus intéressant pour étudier la physique du système. On peut remarquer le fait qu'il devient de plus en plus pointu quand on baisse la température où quand on s'approche de la phase sous-dopée.

Comme nous l'avons démontré dans l'appendice A, notre DOS est normalisée à  $b = \langle S^Z \rangle$  qui est négatif dans cette région du dopage. Les courbes sont présentées avec le signe inversé pour plus de clarté (nous avons fait de même pour les fonctions spectrales) mais nous ne les avons pas normalisées à un. Néanmoins, en sachant d'après la figure 3.7 que, pour un certain  $n_{tot}$  fixé, en baissant la température,  $b = n_B - \frac{1}{2}$  se réduit en module, nous pouvons affirmer que la relation entre les temps de vie ne change pas, même en normalisant les fonctions spectrales à 1.

Nous remarquons que la structure à deux pics de la DOS est très similaire à la structure de la DOS du modèle XY étudié dans le chapitre 1. Des deux figures 4.12 et 4.13, on déduit aussi qu'en réduisant  $E_0$  (c'est-à-dire en augmentant  $\mu$  et le nombre des particules), les deux pics s'approchent de  $\omega - E_0 - b\Pi(0,0) = 0$ . Une différence importante avec le modèle XY réside dans la variation de la hauteur des pics près de  $\omega - E_0 - b\Pi(0,0) = 0$  car, dans ce cas, les corrélations font que les pics deviennent de plus en plus grands en augmentant le nombre de particules.

## 4.6. Chaleur spécifique et entropie

D'un point de vue expérimental [?], l'apparition d'un pseudogap dans la densité d'états des supraconducteurs à haute température critique est accompagnée par une bosse dans la quantité  $\frac{C_V(T)}{T}$  (où  $C_V(T)$  est la chaleur spécifique) et par un changement de pente dans l'entropie  $S(T)$ . Une étude théorique [?] basée sur un scénario classique de fluctuation de paires [?] a récemment attribué cette bosse au fait que, en plus

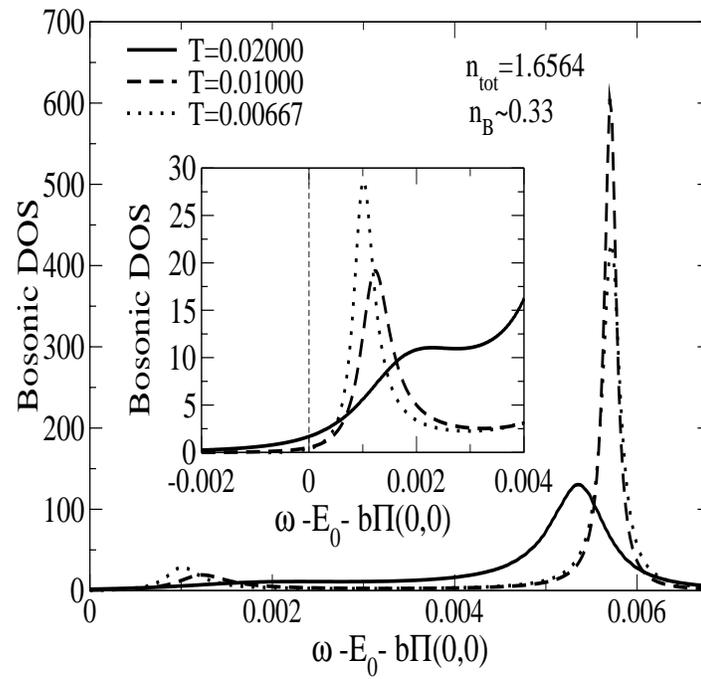


FIG. 4.12. – Densité d'états bosonique dans le cas sous-dopé. L'encadré nous montre un grossissement de la partie à basse fréquence.

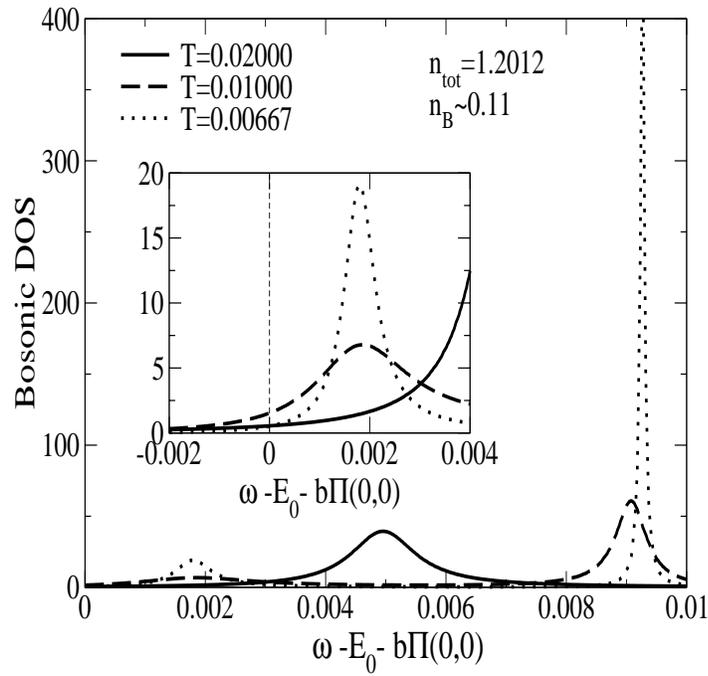


FIG. 4.13. – Densité d'états bosonique dans le cas très dopé. L'encadré nous montre un grossissement de la partie à basse fréquence.

de la contribution des particules non appariées, il existe aussi une contribution des corrélations d'appariement à la chaleur spécifique.

Dans ce paragraphe, nous présentons une étude similaire en calculant la chaleur spécifique et l'entropie. Pour ce faire, nous déterminons l'énergie interne donnée par la relation :

$$\begin{aligned}
U(T) &= E_{kin}^F(T) + E_{kin}^B(T) + E_{int}^{BF}(T) \\
E_{kin}^F(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu) n_{\mathbf{k}}^F(T) \\
E_{kin}^B(T) &= \Delta_B n_B(T) \\
E_{int}^{BF}(T) &= v \sum_i \langle (S_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+) \rangle_T \\
&= -\frac{2}{N\beta} \sum_{\mathbf{q}, \omega_m} \Pi(\mathbf{q}, \omega_m) K(\mathbf{q}, \omega_m). \tag{4.11}
\end{aligned}$$

À partir de cette quantité nous pouvons calculer finalement (voir appendice B pour les détails) :

$$\begin{aligned}
C_V &= \frac{dU(T)}{dT} \\
S(T) &= \int_0^T \frac{C_V(T')}{T'} dT'
\end{aligned}$$

Le nombre d'occupation fermionique  $n_k^F(T)$ , la densité des bosons  $n_B(T)$  ainsi que les moyennes dans l'expression de l'énergie d'interaction doivent être calculés par rapport à l'hamiltonien complet du BFM. Dans la figure 4.14, nous montrons la chaleur spécifique pour deux concentrations différentes comparées à une concentration très basse où l'interaction  $v$  entre bosons et fermions est absente<sup>1</sup>. Comme on peut le voir pour les deux concentrations  $n_{tot} = 1.44$  et  $n_{tot} = 1.20$ , le comportement de  $C_V(T)$  pour des températures assez élevées est linéaire avec une pente qui augmente quand on baisse la concentration totale jusqu'à saturer à la valeur correspondant à la concentration très basse  $n_{tot} = 1.02$  où l'interaction électron-boson est absente. Cela est en accord avec le fait que, en baissant le remplissage, la densité d'états fermionique du système autour de l'énergie de Fermi augmente jusqu'à saturer à sa valeur dans le cas sans interaction et donc sans pseudogap ( voir la figure 3.4). L'effet du pseudogap est une augmentation

<sup>1</sup>Pour des concentrations  $n_{tot}$  assez basses, le nombre de bosons  $n_B$  est négligeable et l'interaction boson-fermion n'apporte pas de changement par rapport au cas sans interaction. Dans ce dernier cas, le calcul des quantités en jeu ici est beaucoup plus rapide.

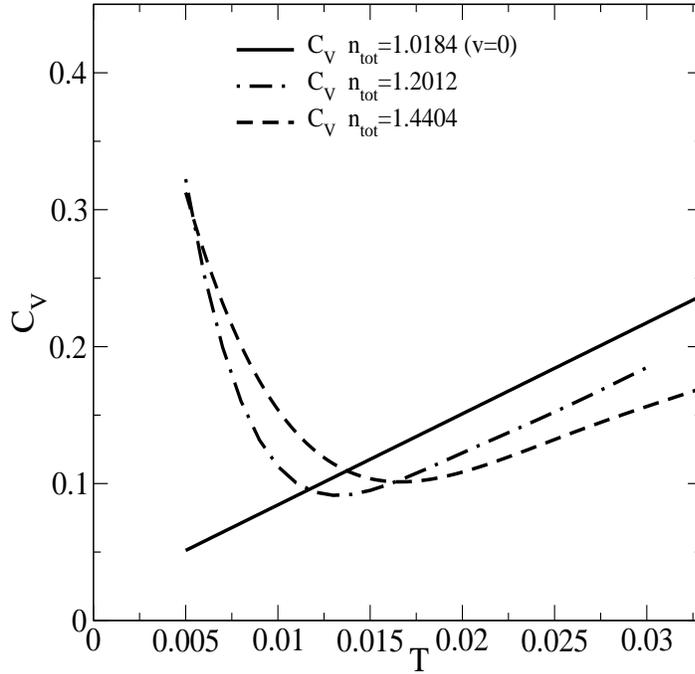


FIG. 4.14. – Chaleur spécifique en fonction de la température et pour trois concentrations. Pour  $n_{tot} \sim 1.02$ , le calcul est fait pour un gaz d'électrons et bosons sans interactions ( $v = 0$ ).

de  $C_V$  en-dessous de la température  $T^*$ . Dans le cas de basses concentrations (comme par exemple  $n_{tot} = 1.02$  dans la figure 4.14), l'absence de pseudogap implique donc une variation linéaire de  $C_V$  jusqu'à de très basses températures.

Dans la figure 4.15, nous montrons la variation d'entropie pour les trois concentrations étudiées. Les données numériques que nous avons obtenues nous permettent de calculer la variation d'entropie :

$$\Delta S(T) = \int_{T_0}^T \frac{C_V(T')}{T'} dT'$$

où  $T_0 = 0.005$  est la plus basse température à notre disposition. Dans le cas des deux concentrations  $n_{tot} = 1.44$  et  $n_{tot} = 1.20$ , nous remarquons, par rapport au cas où  $n_{tot} = 1.02$ , une augmentation de la pente de la courbe  $\Delta S(T)$  pour  $T < T^*$  signe de la présence dans l'état du pseudogap d'un ordre local qui disparaît graduellement quand la température est augmentée au-delà de  $T^*$ .

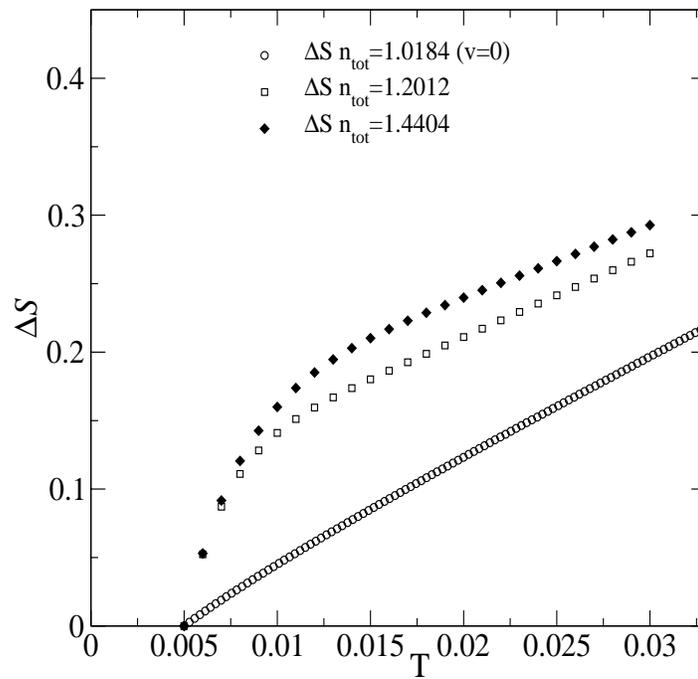


FIG. 4.15. – Variation de l'entropie par rapport à la température  $T_0 = 0.005$  pour trois remplissages différents.

## 4.7. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié les propriétés spectrales des excitations élémentaires du modèle Boson-Fermion. La technique diagrammatique utilisée nous a permis d'étudier le comportement du système en fonction du dopage et de reconstruire son diagramme de phase. Nous avons obtenu une variation de  $T^*$  opposée à celle de  $T_c$  où la température critique est estimée grâce à la rigidité de la phase. En augmentant le dopage, les deux courbes  $T_c$  et  $T^*$  se croisent révélant ainsi un changement dans le mécanisme qui induit la supraconductivité. Les fonctions spectrales des bosons indiquent que dans la phase sous-dopée, les quasi-particules sont bien définies et on peut parler de gouttelettes de supraconductivité dans le système. La vraie phase supraconductrice est donc contrôlée par les fluctuations de phase. À l'inverse, dans le cas sur-dopé, les quasi-particules sont sur-amorties et nous ne pouvons plus parler de paires d'électrons en tant que quasi-particules. Ces sont les fluctuations d'amplitude qui contrôlent la phase supraconductrice comme dans le cas de la théorie BCS.

Le diagramme de phase résultant rappelle celui dérivé pour le scénario de fluctuation de phase introduit par Kivelson et Emery [?] pour étudier les supraconducteurs à haute température critique, mais dans notre cas c'est la mobilité des charges superfluides et non leur concentration qui détermine la dépendance en dopage de la rigidité de la phase et donc de  $T_c$ .

Nous remarquons que la dépendance en dopage des différentes quantités est intrinsèque au modèle que nous traitons, contrairement à ce qui arrive dans d'autres modèles utilisés pour décrire le scénario d'appariement précurseur (precursor pairing). Par exemple, dans le cas du modèle de Hubbard à  $U$  négatif ou des hamiltoniens effectifs BCS, on introduit parfois *ad hoc* l'effet du dopage dans l'attraction des électrons ou dans le terme de saut pour simuler l'approche d'une transition de Mott. Cela n'est pas nécessaire dans le BFM où on considère un mélange de bosons et fermions au lieu d'un système à une seule composante fermionique. La statistique différente des deux types de particules en jeu et la nature de coeur dur des bosons qui introduit de nouveaux effets de corrélation, permettent d'obtenir, sans suppositions faites *ad hoc*, une variation opposée de  $T^*$  et  $T_c$  exactement comme dans le vrai diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique.

## 5. Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié le modèle Boson-Fermion dans le but de tracer, pour la première fois, son diagramme de phase et de mettre en évidence les similitudes de celui-ci avec le vrai diagramme de phase des cuprates. Ce modèle, appartenant à la classe des modèles dits d'appariement précurseur, décrit un mélange de fermions et de bosons de coeur dur avec une interaction d'échange entre eux. Les fermions sont des électrons libres et les bosons de coeur dur sont des paires électroniques localisées préformées décrites par des opérateurs avec une statistique de type spin- $\frac{1}{2}$ . Le couplage boson-fermion permet aux bosons de devenir itinérants grâce à la formation de paires électroniques (dites cooperons) dans le sous-système fermionique.

En utilisant une technique perturbative basée sur des diagrammes de Feynman opportunément modifiés pour prendre en compte la nature de coeur dur des bosons, nous avons pu déduire les équations auto-cohérentes qui gèrent le système. Nous avons résolu numériquement ces équations sur l'axe de Matsubara et, en prolongeant analytiquement la solution sur l'axe réel par la technique de Padé, nous avons déterminé le comportement du système en fonction du nombre total de particules  $n_{tot}$  et du dopage par trous  $1 - 2n_F$ . Cela nous a permis d'étudier l'effet des fortes corrélations à courte portée des particules en fonction du dopage et de tracer le diagramme de phase constitué par la température  $T^*$  d'ouverture du pseudogap et la température  $T_\phi$  de transition vers l'état supraconducteur. La première indique un passage graduel de la phase normale à la phase pseudogap et elle est estimée en étudiant l'ouverture du pseudogap dans la densité d'états électronique. La température critique est liée par contre à l'échelle d'énergie de la rigidité de la phase et elle est estimée comme le rapport entre le nombre  $n_p$  de porteurs de charges superfluides et leur masse  $m_p$ . Cette dernière est calculée à partir de la relation de dispersion des bosons, alors que  $n_p$  est obtenu par le propagateur des cooperons. L'étude de ce dernier montre aussi que la supraconductivité, déterminée pour des dopages élevés par les fluctuations d'amplitude, devient de plus en plus contrôlée par les fluctuations de phase pour de faibles dopages.

La signature de ce *cross-over* est visible tant par la variation des poids des corrélations d'amplitude à courte portée et des corrélations de phase à longue portée que par le croisement, pour des dopages élevés, des deux températures  $T^*$  et  $T_\phi$ . Dans le régime sous-dopé nous avons  $T^* > T_\phi$ , la formation de paires précède donc la phase supraconductrice liée à un ordre de phase à longue portée. Dans le régime sur-dopé nous avons  $T^* < T_\phi$ , par conséquent c'est la formation de paires qui guide la création d'une phase supraconductrice avec une physique de type BCS. Les fonctions spectrales bosoniques confirment ce scénario en montrant clairement pour les excitations des temps de vie qui sont long dans le régime sous-dopé et qui deviennent de plus en plus courts quand on augmente le dopage. Le mécanisme que nous évoquons est similaire au mécanisme de fluctuation de phase déjà étudié dans la littérature [?], mais nous lui apportons ici une justification différente, attribuant la variation de  $T_\phi$  avec le dopage non pas au changement de la densité des porteurs de charges superfluides, mais plutôt à la variation de la masse de ces porteurs.

Pour mettre en évidence l'importance des corrélations électroniques à courte portée dans ce type de physique, nous avons aussi étudié le modèle BFM en négligeant la nature de coeur dur des bosons, c'est-à-dire en approximant les opérateurs de pseudospin avec des opérateurs bosoniques standard. L'ouverture du pseudogap est présente dans les deux cas qui diffèrent quantitativement surtout à cause du fait que, dans le cas avec coeur dur, la symétrie particule-trou empêche à la température  $T^*$  d'augmenter de façon monotone avec le dopage. En ce qui concerne la température critique la différence est par contre qualitativement importante car la nature de coeur dur implique une augmentation de  $T_\phi$  avec le dopage beaucoup plus accentuée que dans le cas de bosons standard.

L'effet du pseudogap est aussi visible sur la chaleur spécifique  $C_V$  du système sous la forme d'une augmentation de cette dernière pour des températures plus basses que  $T^*$ . Un brusque changement de pente dans la variation d'entropie montre enfin la présence d'une sorte d'ordre qui se met en place lorsqu'on baisse la température dans la phase pseudogap.

Ces résultats confirment clairement que le modèle boson-fermion décrit, même sans tenir compte de la structure électronique détaillée, une physique qui est très proche de celle des cuprates. En partant de ces résultats et en généralisant le formalisme utilisé des fonctions de Green pour tenir compte des fluctuations supraconductrices, on peut envisager dans le futur d'étudier comment la transition entre la phase pseudogap et la phase supraconductrice se déroule.

# A. Développement en cumulants des fonctions de Green

La technique de développement en cumulants avec les opérateurs de spin a été introduite dans les années soixante par Vaks, Larkin et Pikin [?, ?] pour résoudre les problèmes magnétiques et elle a été ensuite développée par Izyumov et Skryabin[?] qui l'ont étendue aussi aux opérateurs de Hubbard.

La difficulté de cette méthode et la pauvreté de littérature existante à ce sujet rendent ici nécessaire une exposition de ses principales lignes. Dans la première partie de cet appendice, nous introduirons le principe général de la technique en question ; dans la deuxième partie, nous l'appliquerons pour la première fois à un système mélangé de bosons de coeur dur et de fermions.

## A.1. Méthode de développement en cumulants : généralités

D'un point de vue strictement technique, le but des développements de Feynman est de calculer des fonctions du type :

$$G(x, \tau, x', \tau') = - \langle T \tilde{a}(x, \tau) \tilde{a}^+(x', \tau') \rangle \quad (\text{A.1})$$

où les opérateurs  $\tilde{a}$  sont des opérateurs fermioniques ou bosoniques en représentation de Heisenberg et la moyenne est calculée par rapport à un hamiltonien du type  $H = H_0 + H_{int}$ , où  $H_{int}$  est une petite perturbation par rapport à  $H_0$ .

Pour le problème que nous voulons résoudre et pour les problèmes magnétiques en général, il serait utile de pouvoir calculer des fonctions du type :

$$K_{ll'} = \left\langle T \tilde{S}_l^-(\tau) \tilde{S}_{l'}^+(\tau') \right\rangle \quad (\text{A.2})$$

où les opérateurs sont des opérateurs de spin (ou pseudo-spin) en représentation de Heisenberg avec les relations de commutation suivantes :

$$[S_i^z, S_j^+] = \delta_{ij} S_i^+, \quad [S_i^z, S_j^-] = -\delta_{ij} S_i^-, \quad [S_i^+, S_j^-] = \delta_{ij} S_i^z$$

et pour lesquels on a cette définition :

$$S^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(S^x \pm iS^y)$$

qui implique les relations :

$$\begin{aligned} S^z |\pm\rangle &= \pm \frac{1}{2} |\pm\rangle \\ S^+ |+\rangle &= 0 \\ S^+ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle \\ S^- |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle \\ S^- |-\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Si on cherche à procéder au calcul de la fonction A.2 comme on fait pour les fonctions du type A.1, on a :

$$K_{ll'}(\tau - \tau') = \frac{\langle T S_l^-(\tau) S_{l'}^+(\tau') \sigma(\beta) \rangle_0}{\langle \sigma(\beta) \rangle_0} \quad (\text{A.4})$$

où :

$$\sigma(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_n T \{ H_{int}(\tau_1) \dots H_{int}(\tau_n) \}, \quad (\text{A.5})$$

avec les opérateurs en représentation d'interaction :

$$\begin{aligned} S^\alpha(\tau) &= e^{H_0\tau} S^\alpha e^{-H_0\tau} \\ H_{int}(\tau) &= e^{H_0\tau} H_{int} e^{-H_0\tau} \end{aligned}$$

et avec la moyenne calculée par rapport à l'opérateur  $H_0$  seulement au lieu de  $H = H_0 + H_{int}$  comme dans la formule A.2. Jusqu'ici le calcul est tout à fait identique au cas d'opérateurs bosoniques ou fermioniques traditionnels. La différence fondamentale arrive au moment de calculer l'expression A.4 : le théorème de Wick applicable dans le cas traditionnel n'est plus valable, à cause des relations de commutation des opérateurs de spin<sup>1</sup>. Pour procéder au calcul, il est donc nécessaire de redémontrer une sorte de nouveau théorème de Wick valable pour des opérateurs de spin.

### A.1.1. Le théorème de Wick pour les opérateurs de spin

La démonstration du théorème de Wick modifié utilisé dans la méthode de développement en cumulants est reportée dans un papier de 1968 par Vaks, Larkin et Pikin[?]. Néanmoins, elle n'est pas exposée entièrement, de plus la notation utilisée et l'hamiltonien de départ sont différents de ceux de notre étude, donc nous préférons reporter ici la démonstration complète.

Nous posons :

$$\begin{aligned} B &= S_2^{\alpha_2}(\tau_2) \cdots S_{i-1}^{\alpha_{i-1}}(\tau_{i-1}) \quad \alpha_j = +, -, z \\ C &= S_{i+1}^{\alpha_{i+1}}(\tau_{i+1}) \cdots S_{n-1}^{\alpha_{n-1}}(\tau_{n-1}) \end{aligned}$$

et nous allons procéder par étapes : avant tout, nous démontrerons comment on peut calculer des moyennes d'opérateurs du type  $\langle S_0^- S_1^{\alpha_1} B S_i^{\alpha_i} \rangle_0$  où l'opérateur  $S_0^-$  est au début du produit. Par la suite, on montrera comment traiter des moyennes du type  $\langle S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle_0$  où l'opérateur  $S_0^-$  occupe n'importe quelle position dans le produit et finalement on tiendra aussi compte de l'opérateur d'ordre chronologique.

Nous commençons par calculer :

---

<sup>1</sup>En effet, à la base de la démonstration du théorème de Wick pour les opérateurs bosoniques ou fermioniques traditionnels  $a$  on a la relation de commutation  $[a, a^\pm]_\pm = 1$ . Dans le cas des spins, le commutateur  $[S^+, S^-]$  est  $S^z$  qui est un opérateur différent de l'opérateur unité.

$$\langle [S_0^-(\tau), S_1^{\alpha_1}(\tau_1)BS_i^{\alpha_i}(\tau_i)] \rangle_0 = \langle S_0^- S_1^{\alpha_1} BS_i^{\alpha_i} \rangle_0 - \langle S_1^{\alpha_1} BS_i^{\alpha_i} S_0^- \rangle_0 \quad (\text{A.6})$$

Dans le deuxième membre et dans la suite, la dépendance “temporelle” est sous-entendue. En appliquant les règles de commutation :

$$[X, YZ] = [X, Y]Z + Y[X, Z]$$

nous avons aussi :

$$\begin{aligned} \langle [S_0^-(\tau), S_1^{\alpha_1}(\tau_1)BS_i^{\alpha_i}(\tau_i)] \rangle_0 &= \langle [S_0^-, S_1^{\alpha_1}] BS_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} [S_0^-, B] S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \\ &+ \langle S_1^{\alpha_1} B [S_0^-, S_i^{\alpha_i}] \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Nous prenons maintenant en considération :

$$\begin{aligned} \langle S_1^{\alpha_1}(\tau_1)BS_i^{\alpha_i}(\tau_i)S_0^-(\tau) \rangle_0 &= \frac{\text{Tr} [\rho_0 S_1^{\alpha_1}(\tau_1)BS_i^{\alpha_i}(\tau_i)S_0^-(\tau)]}{\text{Tr} [\rho_0]} = \\ &= \frac{\text{Tr} [S_0^-(\tau)\rho_0 S_1^{\alpha_1}(\tau_1)BS_i^{\alpha_i}(\tau_i)]}{\text{Tr} [\rho_0]} \end{aligned}$$

où  $\rho_0 = e^{-\beta H_0}$  et où on a utilisé la propriété de la trace qui permet de décaler les opérateurs. Pour continuer le calcul, il faut maintenant expliciter la forme de l’hamiltonien  $H_0$  pris en considération. En vue de l’application au BFM, nous choisissons ici pour  $H_0$  la partie de pseudo-spin de l’hamiltonien  $H_0$  du BFM (on prend seulement en compte la partie de pseudo-spin car les opérateurs de pseudo-spin et électroniques commutent) :

$$H_0 = E_0 \sum_i \left( S_i^z + \frac{1}{2} \right)$$

nous avons  $S_i^-(\tau_i)\rho_0 = \rho_0 S_i^-(\tau_i)e^{-\beta E_0}$  obtenue en utilisant la formule :

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (\text{A.8})$$

et  $A(\tau) = e^{H_0\tau} A(0) e^{-H_0\tau}$ . Par conséquent on a :

$$\langle S_1^{\alpha_1}(\tau_1) B S_i^{\alpha_i}(\tau_i) S_0^-(\tau) \rangle_0 = \frac{e^{-\beta E_0} \text{Tr} [\rho_0 S_0^- S_1^{\alpha_1} B S_i^{\alpha_i}]}{\text{Tr} [\rho_0]} = e^{-\beta E_0} \langle S_0^- S_1^{\alpha_1} B S_i^{\alpha_i} \rangle_0$$

Des équations A.6 et A.7, on peut donc conclure :

$$(1 - e^{-\beta E_0}) \langle S_0^- S_1^{\alpha_1} B S_i^{\alpha_i} \rangle_0 = \langle [S_0^-, S_1^{\alpha_1}] B S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} [S_0^-, B] S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} B [S_0^-, S_i^{\alpha_i}] \rangle_0$$

et finalement :

$$\langle S_0^- S_1^{\alpha_1} B S_i^{\alpha_i} \rangle_0 = -n_y \{ \langle [S_0^-, S_1^{\alpha_1}] B S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} [S_0^-, B] S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} B [S_0^-, S_i^{\alpha_i}] \rangle_0 \} \quad (\text{A.9})$$

$$= n_y \{ \langle [S_1^{\alpha_1}, S_0^-] B S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} [B, S_0^-] S_i^{\alpha_i} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} B [S_i^{\alpha_i}, S_0^-] \rangle_0 \} \quad (\text{A.10})$$

$$+ \langle S_1^{\alpha_1} B [S_i^{\alpha_i}, S_0^-] \rangle_0 \quad (\text{A.11})$$

$$n_y = \frac{1}{e^{-y} - 1}$$

$$y = \beta E_0$$

Grâce à cette formule, les moyennes du type  $\langle S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle_0$  peuvent être calculées :

$$\langle [S_1^{\alpha_1} B, S_0^- C S_n^{\alpha_n}] \rangle_0 = \langle S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 - \langle S_0^- C S_n^{\alpha_n} S_1^{\alpha_1} B \rangle_0$$

Par ailleurs, en utilisant les propriétés des commutateurs nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle [S_1^{\alpha_1} B, S_0^- C S_n^{\alpha_n}] \rangle_0 &= \langle [S_1^{\alpha_1} B, S_0^-] C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \langle S_0^- [S_1^{\alpha_1} B, C S_n^{\alpha_n}] \rangle_0 = \\ &= \langle [S_1^{\alpha_1}, S_0^-] B C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} [B, S_0^-] C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \\ &\quad + \langle S_0^- S_1^{\alpha_1} B C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 - \langle S_0^- C S_n^{\alpha_n} S_1^{\alpha_1} B \rangle_0 \end{aligned}$$

D'ici nous déduisons :

$$\begin{aligned} \langle S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 &= \langle [S_1^{\alpha_1}, S_0^-] B C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \langle S_1^{\alpha_1} [B, S_0^-] C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \\ &+ \langle S_0^- S_1^{\alpha_1} B C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 \end{aligned}$$

et, en exploitant la formule A.9, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle &= (1 + n_y) \langle [S_1^{\alpha_1}, S_0^-] B C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \\ &+ (1 + n_y) \langle S_1^{\alpha_1} [B, S_0^-] C S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + \\ &+ n_y \langle S_1^{\alpha_1} B [C, S_0^-] S_n^{\alpha_n} \rangle_0 + n_y \langle S_1^{\alpha_1} B C [S_n^{\alpha_n}, S_0^-] \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

On peut remarquer que, dans l'équation A.12, lorsque  $S_0^-$  est apparié avec un opérateur qui, dans le produit originel, était à sa gauche, le coefficient est  $(1 + n_y)$  ; s'il est apparié avec un opérateur qui était à sa droite, le coefficient est  $n_y$ . D'ici, il est facile de comprendre comment traiter le cas où l'opérateur d'ordre chronologique est présent.

Nous rappelons que :

$$T [S_i^{\alpha_i}(\tau_i) S_j^{\alpha_j}(\tau_j)] = \theta(\tau_i - \tau_j) S_i^{\alpha_i}(\tau_i) S_j^{\alpha_j}(\tau_j) + \theta(\tau_j - \tau_i) S_j^{\alpha_j}(\tau_j) S_i^{\alpha_i}(\tau_i)$$

En appliquant cette formule à  $\langle T S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle$ , on a une somme de termes du type  $\langle S_1^{\alpha_1} B S_0^- C S_n^{\alpha_n} \rangle$  que nous pouvons calculer par la formule A.12. De là, nous comprenons le rôle de l'opérateur  $T$  : il joue sur la position des opérateurs  $S$  dans les produits et donc sur les coefficients  $n_y$  et  $(1 + n_y)$ .

Il faut encore traiter les différents commutateurs qui apparaissent dans les différents termes du développement. Il s'agit de commutateurs d'opérateurs de spin pour des temps différents. En connaissant l'hamiltonien  $H_0$  nous avons :

$$\begin{aligned} S^z(\tau) &= S^z(0) = S^z \\ S^\pm(\tau) &= S^\pm e^{\pm \tau E_0} \end{aligned}$$

calculées grâce à la formule A.8 et donc :

$$\begin{aligned}
[S_i^+(\tau_i), S_0^-(\tau)] &= e^{(\tau_i - \tau)E_0} [S_i^+, S_0^-] \\
&= e^{(\tau_i - \tau)E_0} S_i^z \delta_{i0} = e^{-(\tau - \tau_i)E_0} S_i^z(\tau_i) \delta_{i0} \\
[S_i^z(\tau_i), S_0^-(\tau)] &= e^{-E_0\tau} [S_i^z, S_0^-] = -e^{-(\tau - \tau_i)E_0} S_i^-(\tau_i) \delta_{i0}
\end{aligned}$$

En conclusion le nouveau théorème de Wick est :

$$\begin{aligned}
\langle T [S_1^{\alpha_1}(\tau_1) S_0^-(\tau) S_2^{\alpha_2}(\tau_2) \dots S_n^{\alpha_n}(\tau_n)] \rangle_0 &= Y_{10}(\tau - \tau_1) \langle T \{ [S_1^{\alpha_1}, S_0^-]_{\tau_1} S_2^{\alpha_2}(\tau_2) \dots S_n^{\alpha_n}(\tau_n) \} \rangle_0 > 0 \\
&+ Y_{20}(\tau - \tau_2) \langle T \{ S_1^{\alpha_1}(\tau_1) [S_2^{\alpha_2}, S_0^-]_{\tau_2} \dots S_n^{\alpha_n}(\tau_n) \} \rangle_0 > 0 \\
&+ \dots + \\
&+ Y_{n0}(\tau - \tau_n) \\
&\langle T \{ S_1^{\alpha_1}(\tau_1) S_2^{\alpha_2}(\tau_2) \dots [S_n^{\alpha_n}, S_0^-]_{\tau_n} \} \rangle_0 > 0 \quad (A.13)
\end{aligned}$$

$$Y_{i0}(\tau - \tau_i) = \delta_{i0} e^{-E_0(\tau - \tau_i)} \begin{cases} (1 + n_y) & \tau < \tau_i \\ n_y & \tau > \tau_i \end{cases}$$

$$n_y = \frac{1}{e^{-y} - 1} \quad (A.14)$$

$$y = \beta E_0 \quad (A.15)$$

## A.1.2. Représentation graphique

Imaginons maintenant de vouloir calculer la fonction A.4 ; elle peut être transformée en utilisant la formule A.5 en :

$$\begin{aligned}
K_{ll'}(\tau - \tau') &= \frac{1}{\langle \sigma(\beta) \rangle_0} \left\{ \langle T S_l^-(\tau) S_{l'}^+(\tau) \rangle_0 - \int_0^\beta d\tau_1 \langle T S_l^- S_{l'}^+ H_{int}(\tau_1) \rangle_0 + \right. \\
&\left. + \frac{1}{2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle T S_l^- S_{l'}^+ H_{int}(\tau_1) H_{int}(\tau_2) \rangle_0 + \dots \right\}
\end{aligned}$$

L'expression exacte de chaque terme dépendra de la forme exacte de  $H_{int}$ , mais en général nous pouvons dire que chaque terme de la somme sera du type  $\langle T S_1^{\alpha_1} \dots S_n^{\alpha_n} \rangle$ . En appliquant récursivement la formule A.14 du théorème de Wick, on peut transformer le terme en question en une somme de produits de fonctions comme  $Y_{ij}(\tau_i - \tau_j)$  et de moyennes du type :  $\langle S_i^z \dots S_n^z \rangle_0$ . Ces dernières sont ensuite calculables grâce aux formules :

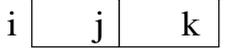
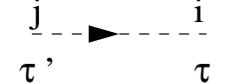
$b$	
$b' \delta_{ij}$	
$b'' b \delta_{ij}$	
$b''' \delta_{ij} \delta_{jk}$	
$Y_{ij}(\tau - \tau')$	

FIG. A.1. – Équivalence entre les termes de l'expansion en cumulants aux ordres les plus bas et leur représentation graphique.

$$\begin{aligned}
 \langle S_i^z \rangle_0 &= b(y) \\
 \langle S_i^z S_j^z \rangle_0 &= b^2 + b' \delta_{ij} \\
 \langle S_i^z S_j^z S_k^z \rangle_0 &= b^3 + b' b (\delta_{ij} + \delta_{jk} + \delta_{ik}) + b'' \delta_{ij} \delta_{jk} \\
 &\vdots
 \end{aligned}$$

où  $b(y)$  sera un paramètre, calculable à partir de l'hamiltonien  $H_0$  du système en étude et les termes  $b'(y)$ ,  $b''(y)$ ... sont les dérivées de la fonction  $b(y)$  par rapport à  $y$  [?]. La forme exacte de  $b(y)$  sera donnée dans les paragraphes suivants pour le modèle boson fermion. On peut associer à chaque élément de la série un diagramme qui nous permet de mieux maîtriser la physique sous-jacente. Dans ce cas, ces associations sont montrées dans la figure A.1.

En conclusion, donc, en appliquant le théorème de Wick au terme  $\langle T S_u^- S_s^+ S_n^+ S_m^- \rangle$  par exemple, on obtient :

$$\begin{aligned}
 \langle T S_u^- S_s^+ S_n^+ S_m^- \rangle &= Y_{us} Y_{mn} \langle S_s^z S_n^z \rangle_0 - Y_{us} Y_{ms} Y_{sn} \langle S_n^z \rangle_0 - Y_{mn} Y_{un} Y_{ns} \langle S_s^z \rangle_0 + \dots = \\
 &= Y_{us} Y_{mn} [b^2 + b' \delta_{sn}] - Y_{us} Y_{ms} Y_{sn} b - Y_{mn} Y_{un} Y_{ns} b + \dots
 \end{aligned}$$

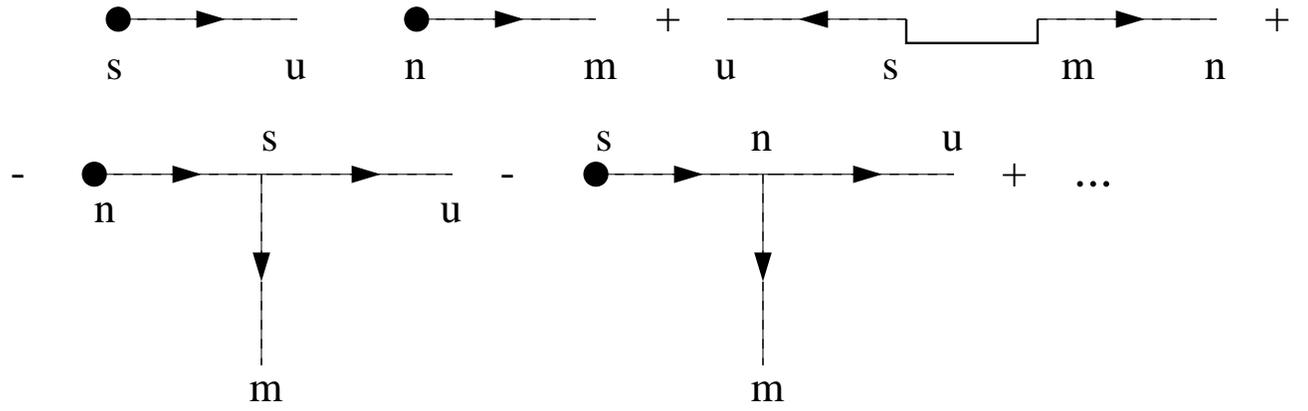


FIG. A.2. – Exemple de résultat obtenu en appliquant le théorème de Wick.

et, graphiquement le résultat est montré dans la figure A.2

## A.2. Méthode de développement en cumulants : application au BFM

Dans ce paragraphe nous appliquons la technique exposée ci-dessus au modèle Boson-Fermion. Pour cela, nous rappelons que l'hamiltonien du BFM dans l'espace réel est :

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_{int} \\
 H_0 &= (D - \mu) \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + (\Delta_B - 2\mu) \sum_i \left( S_i^z + \frac{1}{2} \right) + \\
 &\quad - t \sum_{\langle i \neq j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) \\
 H_{int} &= v \sum_i (S_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+)
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

et le développement sera fait en  $v$ .

### A.2.1. Calcul de la fonction de Green fermionique

La fonction de Green fermionique à calculer est :

$$G_{\uparrow\uparrow}(u, \tau; s, \tau') = - \langle T \tilde{c}_{u\uparrow}(\tau) \tilde{c}_{s\uparrow}^+(\tau') \rangle$$

et ceci est équivalent à [?] :

$$G_{\uparrow\uparrow}(u, \tau; s, \tau') = \left\{ - \langle T c_{u\uparrow}(\tau) c_{s\uparrow}^+(\tau') \sigma(\beta) \rangle_0 \right\}_c$$

où l'indice  $c$  signifie que seuls les diagrammes connectés doivent être pris en compte.

En utilisant la formule A.5 pour  $\sigma(\beta)$ , on obtient une série de termes qui peuvent être calculés à l'aide du théorème de Wick modifié. Naturellement, tous les termes avec un nombre d'opérateurs de création fermioniques différent du nombre des opérateurs d'annihilation (c-à-d. les termes avec  $v$  élevé à une puissance impaire) vaudront zéro. Pour montrer le calcul des termes de l'expansion, nous détaillons le cas des termes à l'ordre zéro et à l'ordre deux :

$$\begin{aligned} G_{\uparrow\uparrow}(u, \tau; s, \tau') &= G^{(0)} + G^{(2)} + G^{(4)} + \dots \\ G^{(0)} &= - \langle T c_{u\uparrow}(\tau) c_{s\uparrow}^+(\tau') \rangle_0 \\ G^{(2)} &= - \frac{1}{2!} \int_0^\beta d\tau_2 d\tau_3 \langle T c_{u\uparrow}(\tau) c_{s\uparrow}^+(\tau') H_{int}(\tau_2) H_{int}(\tau_3) \rangle_0 = \\ &= - \frac{1}{2!} \int_0^\beta d\tau_2 d\tau_3 \left\langle T c_{u\uparrow}(\tau) c_{s\uparrow}^+(\tau') v \sum_i (S_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+) \right. \\ &\quad \left. v \sum_j (S_j^+ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + S_j^- c_{j\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+) \right\rangle = \\ &= - \frac{v^2}{2!} \sum_{ij} \int_0^\beta d\tau_2 d\tau_3 \langle T c_{u\uparrow}(\tau) c_{s\uparrow}^+(\tau') (S_i^+ S_j^- c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ + S_i^- S_j^+ c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow}) \rangle \end{aligned}$$

où la dépendance temporelle est sous-entendue. Le terme  $G^{(0)}$  est directement représentable comme une ligne qui va de  $s$  à  $u$  (voir figure A.3 a). Le terme  $G^{(2)}$  est plus compliqué et il mérite d'être expliqué.

Les parties bosonique et fermionique peuvent être traitées séparément car les opérateurs, dans notre approximation, commutent. Nous avons donc :

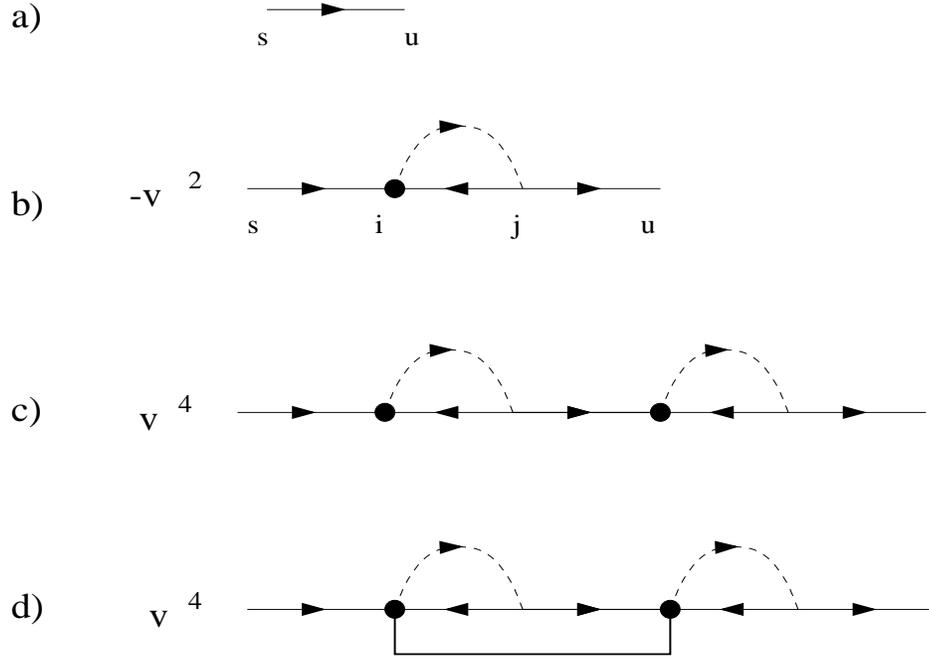


FIG. A.3. – Exemple de diagrammes de Feynman obtenus avec le théorème de Wick modifié. Le diagramme d) prend en compte le terme  $b'$  .

$$\begin{aligned}
 \langle TS_i^+(\tau_2)S_j^-(\tau_3) \rangle &= Y_{ji}(\tau_3 - \tau_2) \langle S_i^z \rangle = \\
 &= Y_{ji}(\tau_3 - \tau_2)b \\
 \langle Tc_{u\uparrow}c_{s\uparrow}^+c_{i\downarrow}c_{i\uparrow}c_{j\uparrow}^+c_{j\downarrow}^+ \rangle &= G_{\uparrow\uparrow}^0(i, s)G_{\downarrow\downarrow}^0(i, j)G_{\uparrow\uparrow}^0(u, j) + \dots \\
 \langle TS_i^-(\tau_2)S_j^+(\tau_3) \rangle &= Y_{ij}(\tau_2 - \tau_3)b \\
 \langle Tc_{u\uparrow}c_{s\uparrow}^+c_{i\uparrow}^+c_{i\downarrow}^+c_{j\downarrow}c_{j\uparrow} \rangle &= G_{\uparrow\uparrow}^0(u, i)G_{\downarrow\downarrow}^0(j, i)G_{\uparrow\uparrow}^0(j, s) + \dots
 \end{aligned}$$

La somme de ces deux termes (identiques) nous donne le résultat de la figure A.3 b).

On peut remarquer que le facteur  $\frac{1}{2!}$  présent dans le terme  $G^{(2)}$  est éliminé grâce au fait que les deux diagrammes issus de la contraction de Wick des opérateurs en  $G^{(2)}$  sont topologiquement équivalents. En général le facteur  $\frac{1}{n!}$  du n-ième terme est éliminé pour la même raison.

A partir du terme  $G^{(4)}$  on a des diagrammes qui font intervenir le coefficient  $b'$ , par exemple :

$$\begin{aligned}
\langle TS_i^+ S_j^+ S_k^- S_l^- \rangle &= Y_{kj} Y_{li} \langle S_j^z S_i^z \rangle = \\
&= Y_{kj} Y_{li} (b^2 + b' \delta_{ij}) \\
\langle T c_{u\uparrow} c_{s\uparrow}^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} c_{k\uparrow}^+ c_{k\downarrow}^+ c_{l\uparrow}^+ c_{l\downarrow}^+ \rangle &= -G_{\uparrow\uparrow}^0(u, k) G_{\uparrow\uparrow}^0(i, s) G_{\downarrow\downarrow}^0(i, l) G_{\downarrow\downarrow}^0(j, k) G_{\uparrow\uparrow}^0(j, l)
\end{aligned}$$

qui sont représentés graphiquement dans la figure A.3 c) et d). En développant la série jusqu'au huitième ordre, on découvre sa structure générale et grâce à la formule :

$$G(u - s, \tau - \tau') = \frac{1}{\beta N} \sum_{k\omega_n} e^{ik(u-s) - i\omega_n(\tau - \tau')} G(k, \omega_n)$$

où  $\beta = \frac{1}{T}$ ,  $T$  = température,  $N$  = nombre de sites du réseau,  $\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n + 1)$  = fréquence de Matsubara pour les fermions,  $k = \frac{2\pi}{N}\nu_k$  avec  $\nu_k = -N \dots N - 1$  et  $n = -\infty \dots \infty$ , on peut passer dans l'espace de Fourier et simplifier les formules en transformant les intégrales en simples produits. On peut introduire de la même façon la fonction de self-énergie :

$$\Sigma^0(k, \omega) = -\frac{v}{N\beta} \sum_{q, \omega'} G^0(q - k, \omega' - \omega) b K^0(q, \omega')$$

et avoir ainsi :

$$\begin{aligned}
G(k, \omega) &= G^0(k, \omega) + b G^0(k, \omega) \Sigma^0(k, \omega) G^0(k, \omega) + \\
&+ b^2 G^0(k, \omega) \Sigma^0(k, \omega) G^0(k, \omega) \Sigma^0(k, \omega) G^0(k, \omega) + \\
&+ b' G^0(k, \omega) \Sigma^0(k, \omega) G^0(k, \omega) \sum_q \frac{V(q, \omega)}{N} + \\
&+ bb' G^0(k, \omega) \Sigma^0(k, \omega) G^0(k, \omega) \sum_q \frac{V^2(q, \omega)}{N} + \dots
\end{aligned} \tag{A.17}$$

où  $V(q, \omega) = G^0(q, \omega) \Sigma^0(q, \omega)$  et où nous avons indiqué  $\omega_n$  avec  $\omega$  pour simplifier. Dans la figure A.4 nous avons reporté les différents diagrammes aux ordres les plus bas qui nous ont permis de déceler la structure des équations pour  $G$ ; leur expression analytique dans l'espace de Fourier est reporté dans le tableau A.1.

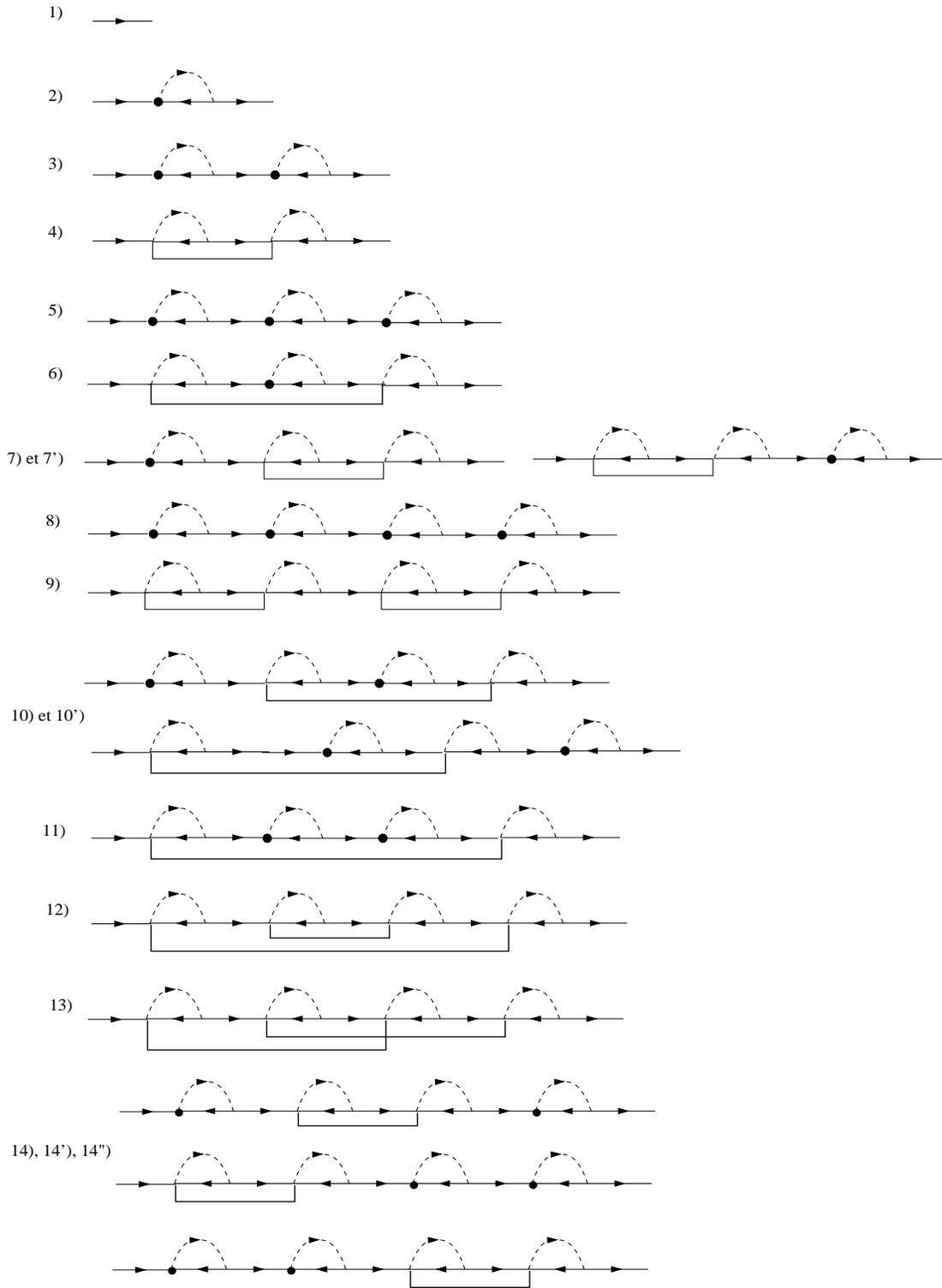


FIG. A.4. – Diagrammes aux ordres les plus bas obtenus pour  $G$  en appliquant le développement en cumulants au BFM. Leur expression analytique est donnée dans le tableau A.1.

1)	$G^0(k, \omega)$
2)	$bG^0(k, \omega)\Sigma^0(k, \omega)G^0(k, \omega)$
3)	$b^2G^0\Sigma^0G^0\Sigma^0G^0$
4)	$b'G^0\Sigma^0\sum_q\frac{V(q, \omega)}{N}G^0$
5)	$b^3(G^0)^4(\Sigma^0)^3$
6)	$bb'G^0\Sigma^0\sum_q\frac{V^2(q, \omega)}{N}G^0$
7) et 7')	$bb'G^0\Sigma^0G^0\Sigma^0\sum_q\frac{V(q, \omega)}{N}G^0$
8)	$b^4(G^0)^5(\Sigma^0)^4$
9)	$(b')^2\left[\sum_q\frac{V(q, \omega)}{N}\right]^2G^0\Sigma^0G^0\Sigma^0G^0$
10) et 10')	$b^2b'G^0\Sigma^0G^0\Sigma^0\sum_q\frac{V^2(q, \omega)}{N}G^0$
11)	$b^2b'G^0\Sigma^0\sum_q\frac{V^3(q, \omega)}{N}G^0$
12)	$(b')^2G^0\Sigma^0\sum_{q_a}\frac{V^2(q_a, \omega)}{N}\sum_{q_c}\frac{V(q_c, \omega)}{N}G^0$
13)	$(b')^2G^0\Sigma^0\sum_{q_a}\frac{V^2(q_a+k, \omega)}{N}\sum_{q_c}\frac{V(q_a+k+q_c, \omega)}{N}V(k+q_c)G^0$
14), 14') et 14'')	$b^2b'G^0\Sigma^0G^0\Sigma^0\sum_q\frac{V(q, \omega)}{N}G^0\Sigma^0G^0$

TAB. A.1. – Expression analytique des différents termes de la série qui compose  $G$ . Leur expression graphique est donnée dans la figure A.4.

### A.2.2. Calcul de la fonction de Green bosonique

La fonction de Green bosonique est donnée par l'équation A.2 et peut être développée dans la forme donnée par l'équation A.4. Ainsi, dans ce cas bosonique nous pouvons écrire :

$$K_{ll'} = \left\{ \langle TS_l^-(\tau)S_{l'}^+(\tau')\sigma(\beta) \rangle_0 \right\}_c$$

En utilisant la formule A.5 et en procédant de la même façon que celle utilisée dans le cas fermionique nous arrivons à :

$$\begin{aligned}
K(q, \omega_m) &= bY(q, \omega_m) + b^2Y(q, \omega_m)\Pi^0(q, \omega_m)Y(q, \omega_m) + \\
&+ \frac{b'}{N} \sum_{q_a} V(q_a, \omega_m)Y(k, \omega_m) + \\
&+ b^3Y(q, \omega_m)\Pi^0(q, \omega_m)Y(q, \omega_m)\Pi^0(q, \omega_m)Y(q, \omega_m) + \dots
\end{aligned} \tag{A.18}$$

où nous avons aussi utilisé la formule :

$$K_{ll'}(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta N} \sum_{q\omega_m} e^{iq(l-l') - i\omega_n(\tau - \tau')} K(q, \omega_m)$$

1)	$bY(q, \omega_m)$
2)	$b^2Y(q, \omega_m)\Pi^0(q, \omega_m)Y(q, \omega_m)$
3)	$\frac{b'}{N} \sum_{q'} V(q', \omega_m)Y(q, \omega_m)$
4)	$b^3Y\Pi^0Y\Pi^0Y$
5) et 5')	$\frac{b'}{N} \sum_{q'} V(q', \omega_m)Y\Pi^0Yb$
6)	$\frac{b'}{N} \sum_{q'} V^2(q', \omega_m)Yb$
7)	$b^4Y\Pi^0Y\Pi^0Y\Pi^0Y$
8), 8') et 8'')	$b^2 \frac{b'}{N} \sum_{q'} V(q', \omega_m)Y\Pi^0Y\Pi^0Y$
9) et 9')	$b^2 \frac{b'}{N} \sum_{q'} V^2(q', \omega_m)Y\Pi^0Y$
10)	$\left(\frac{b'}{N}\right)^2 \sum_{q'} V(q', \omega_m) \sum_{q''} V^2(q'', \omega_m)$
11)	$\left(\frac{b'}{N}\right)^2 \sum_{q'q''} V(q', \omega_m)V(q' + q'', \omega_m)V(q'', \omega_m)Y(q, \omega_m)$

TAB. A.2. – Expression analytique des différents termes de la série qui compose  $K$ . Leur expression graphique se trouve dans la figure A.5.

avec  $\beta = \frac{1}{T}$ ,  $T$  = température,  $N$  = nombre de sites du réseau,  $\omega_m = \frac{\pi}{\beta}2m$  = fréquence de Matsubara pour les bosons<sup>2</sup>,  $q = \frac{2\pi}{N}\nu_q$  avec  $\nu_q = -N \dots N - 1$  et  $m = -\infty \dots \infty$ . Dans le tableau A.2 nous reportons les termes aux ordres les plus bas ; leur représentation graphique correspondante se trouve dans la figure A.5.

### A.2.3. Resommation des diagrammes

Afin de rendre le calcul des fonctions de Green  $G$  et  $K$  autocohérent, nous considérons une classe de diagrammes qui résulte des critères des lois de conservation du type “ $\phi$ -derivable” [?] et qui a été généralisée pour des systèmes de spin tout récemment [?]. Ainsi, en gardant des diagrammes qui ont comme facteur le terme  $b^{[n]}$  (avec  $n = 0, 1$ ) dans l'équation de  $G$  et les termes  $b^{[n]}$  (avec  $n = 0, 1, 2$ ) dans l'équation de  $K$ , nous arrivons à une série de diagrammes représentée graphiquement dans la figure A.6 qui donne :

$$\begin{aligned}
 K(q, \omega_m) &= [b + V(\omega_m)]Y + [b + V(\omega_m)]Y\Pi K(q, \omega_m) \\
 \Rightarrow K(q, \omega_m) &= \frac{b + V(\omega_m)}{(Y(q, \omega_m))^{-1} - [b + V(\omega_m)]\Pi^0(q, \omega_m)}
 \end{aligned}$$

où  $V(\omega_m)$  est représentée par la figure A.7 et s'écrit alors :

<sup>2</sup>Le caractère bosonique de  $K$  est démontré dans le paragraphe suivant.

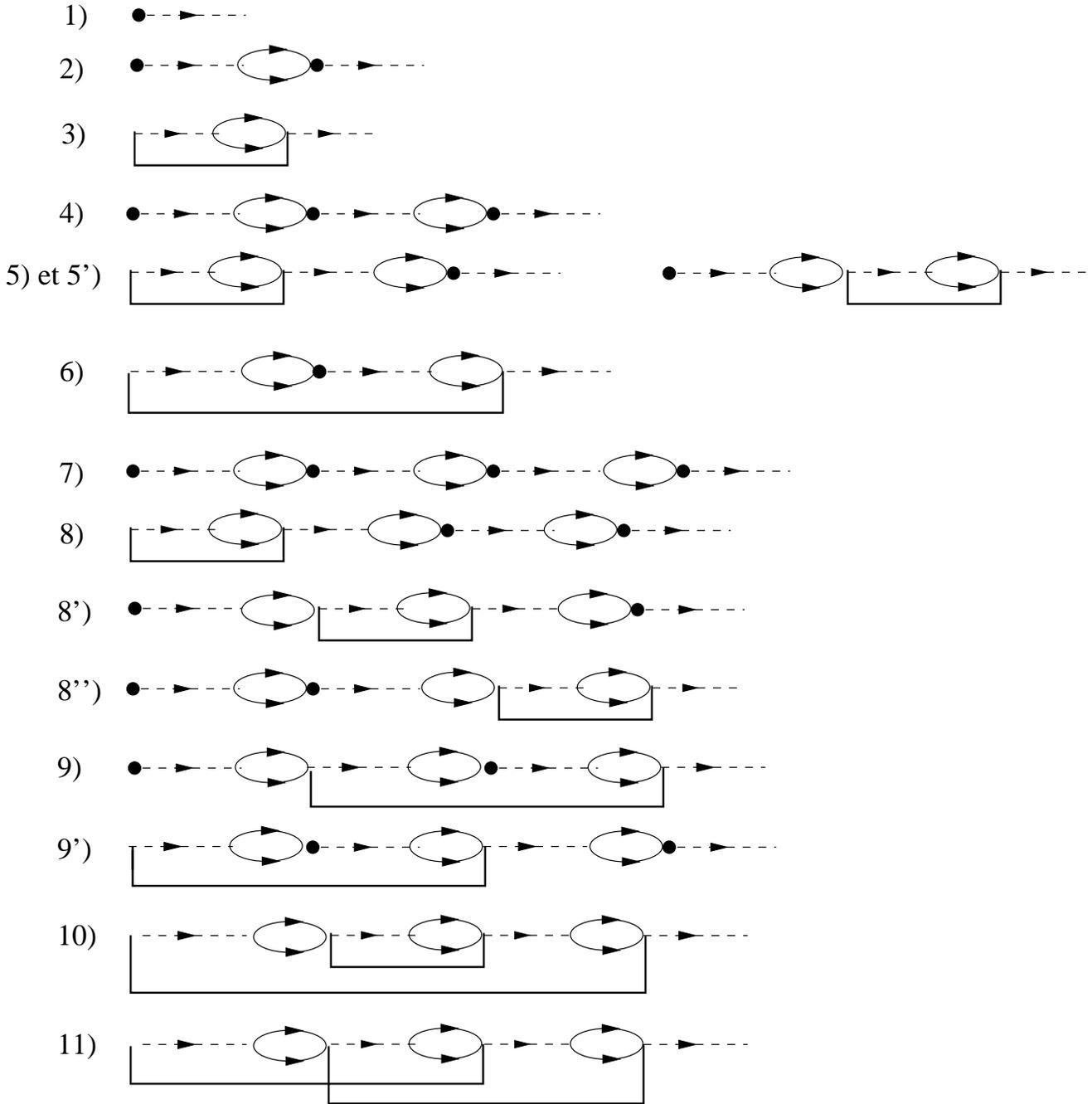
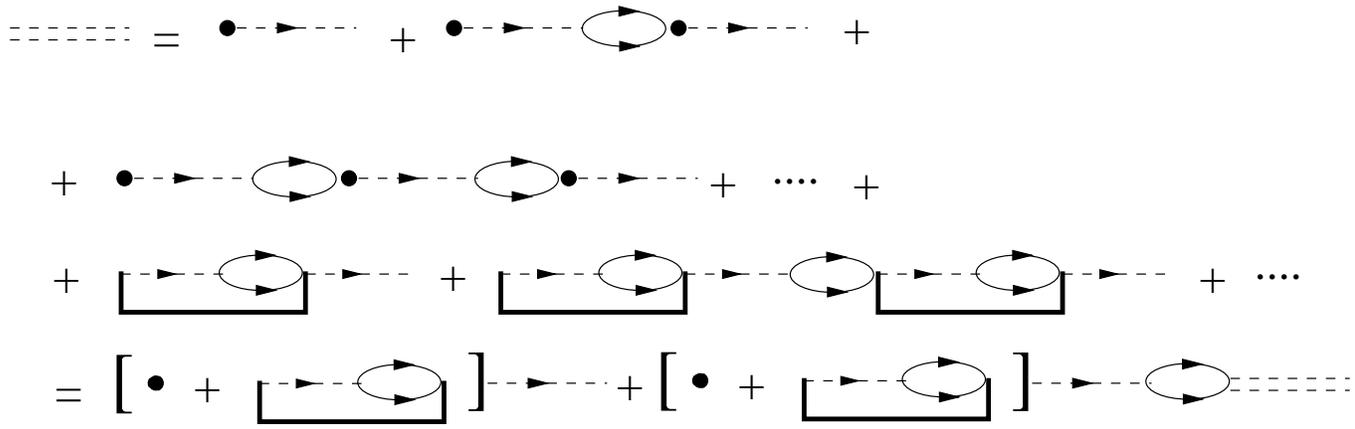
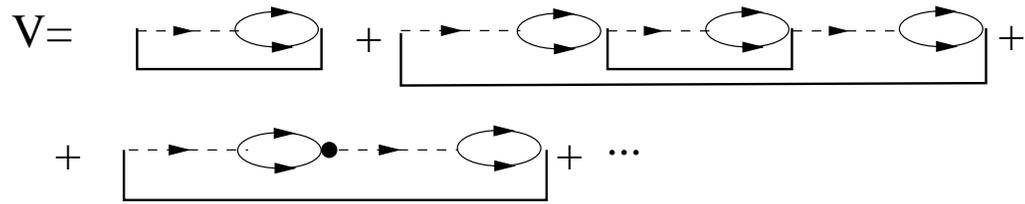


FIG. A.5. – Diagrammes aux ordres les plus bas obtenus pour  $K$  en appliquant le développement en cumulants pour le problème traité ici. Leur expression analytique est donnée dans le tableau A.2.

FIG. A.6. – Équation graphique self-consistante pour la fonction de Green  $K$ .FIG. A.7. – Équation graphique pour la fonction  $V(\omega_n)$ .

$$\begin{aligned}
 V(\omega_m) &= V^0(\omega_m) + \frac{b'}{N} \sum_q \Pi^0(q, \omega_m) Y(q, \omega_m) \Pi^0(q, \omega_m) Y(q, \omega_m) V^0 + \dots \\
 &= V^0(\omega_m) + \frac{b'}{N} \sum_q \Pi^0(q, \omega_m) Y(q, \omega_m) \Pi^0(q, \omega_m) K(q, \omega_m)
 \end{aligned}$$

avec :

$$V^0(\omega_m) = \frac{b'}{N} \sum_q \Pi^0(q, \omega_m) Y(q, \omega_m)$$

De façon analogue, nous avons pour  $G$  :

$$\begin{aligned}
 G^1 &= G^0 + bG^0 \Sigma G \\
 \Sigma(k, \omega_n) &= \frac{-v^2}{\beta N b} \sum_{q,m} G(q-k, \omega_m - \omega_n) K(q, \omega_m) \\
 \Pi(q, \omega_m) &= \frac{v^2}{\beta N} \sum_{k,n} G(q-k, \omega_m - \omega_n) G(k, \omega_n)
 \end{aligned}$$

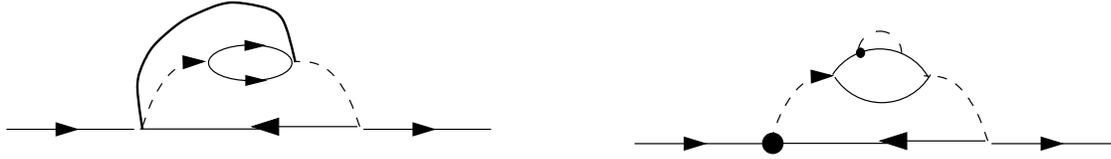


FIG. A.8. – Diagrammes pris en considération par l’habillage de  $\Pi$  et de la partie bosonique de  $\Sigma^0$ .

D’où finalement, en rendant la self énergie auto-cohérente nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 G(k, \omega_n) &= \frac{1}{(G^0)^{-1} - b\Sigma(k, \omega_n)} \\
 K(q, \omega_m) &= \frac{b + V(\omega_m)}{(Y(q, \omega_m))^{-1} - [b + V(\omega_m)] \Pi(q, \omega_m)} \\
 V(\omega_m) &= \frac{b'}{N} \sum_q \Pi(q, \omega_m) Y(q, \omega_m) [1 + \Pi(q, \omega_m) K(q, \omega_m)].
 \end{aligned}$$

Ceci, avec les équations pour  $\Sigma$  et  $\Pi$ , constitue un ensemble d’équations couplées à résoudre numériquement. Rendre les self-énergies auto-cohérentes nous permet de tenir compte d’autres diagrammes qui ne sont pas représentés dans les figures précédentes mais qui sont bien présentes dans les développements de  $G$  et  $K$  aux ordres supérieurs comme, par exemple, les diagrammes du type illustré dans la figure A.8.

#### A.2.4. Fonction spectrale pour les bosons de coeur dur

La fonction spectrale et la densité d’états des bosons à coeur dur sont différentes du cas des bosons standard. Ici, nous reportons le calcul complet qui démontre l’expression analytique de ces quantités que nous avons utilisées principalement dans le chapitre 4.

## Fonction spectrale

Pour calculer la fonction spectrale, nous utilisons la représentation de Lehmann pour la fonction de Green des bosons :

$$\begin{aligned}
K_{12}(\tau_1, \tau_2) &= \langle T \tilde{S}_1^-(\tau_1) \tilde{S}_2^+(\tau_2) \rangle = \\
&= \begin{cases} \frac{1}{Z} Tr (e^{-\beta H} e^{H\tau_1} S_1^- e^{-H\tau_1} e^{H\tau_2} S_2^+ e^{-H\tau_2}) & \tau_1 > \tau_2 \\ \frac{1}{Z} Tr (e^{-\beta H} e^{H\tau_2} S_2^+ e^{-H\tau_2} e^{H\tau_1} S_1^- e^{-H\tau_1}) & \tau_1 < \tau_2 \end{cases} = \\
&= \begin{cases} \frac{1}{Z} Tr (e^{-\beta H} e^{H(\tau_1-\tau_2)} S_1^- e^{-H(\tau_1-\tau_2)} S_2^+) & \tau_1 > \tau_2 \\ \frac{1}{Z} Tr (e^{-\beta H} e^{H(\tau_2-\tau_1)} S_2^+ e^{-H(\tau_2-\tau_1)} S_1^-) & \tau_1 < \tau_2 \end{cases}
\end{aligned}$$

où  $Z = Tr \{e^{-\beta H}\}$  et où nous avons utilisé la propriété de l'opérateur de Trace :  $Tr(ABC) = Tr(CAB)$ . En utilisant la base  $|n\rangle$  de l'opérateur  $H$ , tel que  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$  nous avons ( en posant  $\tau = \tau_1 - \tau_2$  ) :

$$K_{12}(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{\tau E_n} S_{1nm}^- e^{-E_m \tau} S_{2mm}^+ & \tau > 0 \\ \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{\tau E_n} S_{2nm}^+ e^{-E_m \tau} S_{1mm}^- & \tau < 0 \end{cases}$$

avec  $I = \sum_m |m\rangle\langle m|$ . En posant  $\omega_{nm} = E_n - E_m$  et en interchangeant les indices  $n$  et  $m$  dans la somme nous obtenons :

$$K_{12}(\tau) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} S_{1nm}^- S_{2mn}^+ \begin{cases} e^{\omega_{nm}\tau} & \tau > 0 \\ e^{\omega_{nm}(\tau+\beta)} & \tau < 0 \end{cases}$$

et en conséquence :

$$K_{12}(\tau < 0) = K_{12}(\tau + \beta)$$

ce qui montre le caractère bosonique de la fonction  $K$  que nous pouvons développer par transformée de Fourier de la façon suivante [?, ?] :

$$K_{12}(\omega_l) = \int_0^\beta d\tau K_{12}(\tau) e^{i\omega_l \tau} \quad \omega_l = \frac{\pi}{\beta} 2l$$

d'où :

$$\begin{aligned}
K_{12}(\omega_l) &= \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} S_{1nm}^- S_{2mn}^+ e^{\omega_{nm}\tau + i\omega_l\tau} = \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} S_{1nm}^- S_{2mn}^+ \frac{e^{\beta\omega_{nm}} - 1}{i\omega_l + E_n - E_m}
\end{aligned}$$

ceci donne :

$$K_{12}(\omega_l) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A_{12}^B(\omega)}{i\omega_l - \omega} \quad (\text{A.19})$$

$$A_{12}^B(\omega) = \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) S_{1nm}^- S_{2mn}^+ \delta(\omega - E_m + E_n) \quad (\text{A.20})$$

où  $A_{12}^B(\omega)$  est la fonction spectrale avec la propriété de normalisation :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega A_{12}^B(\omega) &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} S_{2mn}^+ S_{1nm}^- - e^{-\beta E_n} S_{1nm}^- S_{2mn}^+ = \\
&= \frac{1}{Z} \left( \sum_m \langle m | e^{-\beta H} S_2^+ S_1^- | m \rangle - \sum_n \langle n | e^{-\beta H} S_1^- S_2^+ | n \rangle \right) = \\
&= \langle S_2^+ S_1^- \rangle - \langle S_1^- S_2^+ \rangle = \langle [S_2^+, S_1^-] \rangle = \\
&= \delta_{12} \langle S^z \rangle = \delta_{12} b \quad (\text{A.21})
\end{aligned}$$

## Densité des particules

La densité des particules  $n_B^{HC}$  se calcule à partir de la fonction spectrale ; pour démontrer cela on écrit ainsi la densité<sup>3</sup> :

$$\begin{aligned}
n_B^{HC} &= 2 \langle S_q^+ S_q^- \rangle = \\
&= \frac{2}{Z} \sum_{n,m} \langle m | e^{-\beta H} S_q^+ | n \rangle \langle n | S_q^- | m \rangle = \\
&= \frac{2}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} |\langle n | S_q^- | m \rangle|^2
\end{aligned}$$

---

<sup>3</sup>Nous rappelons que le 2 dans la formule de  $n_B^{HC}$  vient de notre définition des opérateurs de spin :  $S^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (S^x \pm iS^y)$

En utilisant :

$$\begin{aligned} A^B(q, \omega) &= \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) \langle m | S_q^+ | n \rangle \langle n | S_q^- | m \rangle \delta(\omega - E_m + E_n) \\ &= \frac{2\pi}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} (1 - e^{\beta\omega}) |\langle n | S_q^- | m \rangle|^2 \delta(\omega - E_m + E_n) \end{aligned}$$

nous obtenons ainsi :

$$\begin{aligned} n_B^{HC} &= \frac{2}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} |\langle n | S_q^- | m \rangle|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{1 - e^{\beta\omega}} A^B(q, \omega) = \\ &= -2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f_B(\omega) A^B(q, \omega) \end{aligned}$$

le signe “−” devant la formule résulte de notre définition de la fonction de Green des bosons de coeur dur qui a un signe opposé par rapport à la définition habituelle des fonctions de Green pour les bosons standard.

### Application à un gaz de bosons de coeur dur sans interaction

Dans les cas d’un gaz sans interaction, la fonction de Green est (voir formule B.1) :  $K_0 = \frac{b_0}{i\omega_m - E_0}$ , d’où la fonction spectrale :  $A_0^B(\omega) = -2\text{Im}(K_0^{\text{ret}}) = 2\pi b_0 \delta(\omega - E_0)$  avec la condition de normalisation :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_0^B(q, \omega) = b_0$$

ce qui est en parfait accord avec la formule générale A.21 donnée plus haut.

Nous obtenons ainsi l’expression pour la densité :

$$\begin{aligned} n_{B0}^{HC} &= -2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} f_B(\omega) A_0^B(\omega) = \\ &= -\frac{2b_0}{e^{\beta E_0} - 1} = -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta E_0}{2}\right) + \frac{1}{2} = \frac{1}{e^{\beta E_0} + 1} \end{aligned}$$

qui est une densité de type fermionique, comme l'on pouvait s'y attendre pour un ensemble de particules à coeur dur localisées.

### A.3. Calcul du propagateur des Cooperons

Le propagateur des Cooperons dans l'espace réel est :

$$C_{us}(\tau, \tau') = \langle T [c_{u\uparrow}^+(\tau)c_{u\downarrow}^+(\tau)c_{s\downarrow}(\tau')c_{s\uparrow}(\tau')S] \rangle_c$$

$$S = 1 - \int_0^\beta H_{int}(\tau_1)d\tau_1 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 H_{int}(\tau_1)H_{int}(\tau_2) - \dots$$

où nous avons déjà exprimé tous les opérateurs en représentation d'interaction. La contribution au premier ordre en  $v$  est nulle car elle a comme facteur des termes du type  $\langle T c_{u\downarrow} c_{u\uparrow} \rangle$  qui sont manifestement égaux à zéro. Donc finalement nous avons :

$$C_{us}(\tau - \tau') = \langle T c_{u\uparrow}^+(\tau)c_{u\downarrow}^+(\tau)c_{s\downarrow}(\tau')c_{s\uparrow}(\tau') \rangle +$$

$$+ \frac{v^2}{2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{nm} \langle T [c_{u\uparrow}^+(\tau)c_{u\downarrow}^+(\tau)c_{s\downarrow}(\tau')c_{s\uparrow}(\tau') (S_n^+ c_{n\downarrow} c_{n\uparrow} + S_n^- c_{n\uparrow}^+ c_{n\downarrow}^+)$$

$$(S_m^+ c_{m\downarrow} c_{m\uparrow} + S_m^- c_{m\uparrow}^+ c_{m\downarrow}^+)] \rangle.$$

Le terme à l'ordre zéro est (une seule contraction est possible) :

$$\langle T c_{u\uparrow}^+(\tau)c_{u\downarrow}^+(\tau)c_{s\downarrow}(\tau')c_{s\uparrow}(\tau') \rangle = G_{\uparrow\uparrow}^0(s, u; \tau', \tau) G_{\downarrow\downarrow}^0(s, u; \tau', \tau)$$

À l'ordre  $v^2$  seulement deux termes donnent une contribution finie :

$$\frac{v^2}{2} \langle T c_{u\uparrow}^+(\tau)c_{u\downarrow}^+(\tau)c_{s\downarrow}(\tau')c_{s\uparrow}(\tau')c_{n\downarrow}c_{n\uparrow}c_{m\uparrow}^+c_{m\downarrow}^+S_n^-S_m^- \rangle =$$

$$= \frac{v^2}{2} G_{nu\downarrow}^0 G_{nu\uparrow}^0 G_{sm\uparrow}^0 G_{sm\downarrow}^0 bY_{mn}$$

En développant aux termes successifs et en passant dans l'espace de Fourier comme nous l'avons déjà fait pour les fonction de Green des bosons préformés et des électrons nous obtenons l'expression de la figure A.9, qui en termes analytiques correspond à l'expression :

$$C(\mathbf{q}, \omega_m) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \dots \text{Diagram 3} V^2$$

FIG. A.9. – Expression en termes de diagrammes de Feynman du propagateur pour les Cooperons.

$$C(q, \omega_m) = \frac{1}{v^2} \Pi(q, \omega_m) + \frac{1}{v^2} \Pi(q, \omega_m) K(q, \omega_m) \Pi(q, \omega_m)$$



# B. Calculs Numériques

Dans cet appendice nous reportons les démarches essentielles à suivre pour résoudre les équations intégrales couplées qui décrivent notre système. Nous nous concentrons sur les équations contenant seulement le terme en  $b$ .

## B.1. Solution des équations intégrales du BFM

### B.1.1. Description de l'algorithme

En exploitant les résultats de l'appendice A nous pouvons reporter ici l'ensemble complet des équations qui décrivent notre système dans le cas où les termes proportionnels à  $b'$  sont négligés :

$$\begin{aligned} G(k, \omega_n) &= \frac{1}{(G^0)^{-1} - \Sigma(k, \omega_n)} \\ K(q, \omega_m) &= \frac{b}{(K^0(q, \omega_m))^{-1} - b\Pi(q, \omega_m)} \\ \Sigma(k, \omega_n) &= \frac{-v^2}{\beta N} \sum_{q,m} G(q - k, \omega_m - \omega_n) K(q, \omega_m) \\ \Pi(q, \omega_m) &= \frac{v^2}{\beta N} \sum_{k,n} G(q - k, \omega_m - \omega_n) G(k, \omega_n) \end{aligned}$$

les variables  $k = \frac{2\pi}{N}\nu_k$  et  $q = \frac{2\pi}{N}\nu_q$  avec  $\nu \in Z$  et  $\nu \in [-\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2} - 1]$  sont discrètes et limitées dans la zone de Brillouin  $[-\pi, \pi]$ . Elles ne posent donc aucun problème et peuvent être représentées dans l'ordinateur par les nombres entiers  $\nu_k$  et  $\nu_q$  correspondant. Les variables  $\omega_m = \frac{\pi}{\beta}2m$  et  $\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n + 1)$ , avec  $n$  et  $m$  des entiers  $\in [-\infty, \infty]$ , sont elles aussi discrètes, mais elles ne sont pas limitées et il est donc impossible de toutes les représenter dans l'ordinateur. Néanmoins, en sachant que les fonctions de

Green décroissent assez rapidement en  $\omega_n$  [?], nous pouvons nous limiter à considérer un nombre fini de ces valeurs en imposant  $m \in [-M_f, M_f]$  et  $n \in [-M_f, M_f - 1]$ . Le choix asymétrique pour les fermions vient du fait que, la fonction de Green a la partie réelle paire et la partie imaginaire impaire. Pour s'assurer que la propriété de symétrie :

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{Im}\{G(k, \omega_n)\} &= 0 \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \text{Re}\{G(k, \omega_n)\} &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \text{Re}\{G(k, \omega_n)\} \end{aligned}$$

est maintenue dans le cas où  $n$  est borné, il faut avoir le même nombre de points dans le semi-axe positif et dans le semi-axe négatif.

Le choix de  $M_f$  et  $N$  est dicté par un compromis entre la rapidité de calcul et la précision nécessaire pour mettre en évidence tous les phénomènes qui nous intéressent (un grand  $N$  est utile quand on essaye, par exemple, de déterminer la masse effective des particules) sans pour autant choisir une valeur trop grande qui rendrait le calcul excessivement long. Un test crucial que nous avons fait est de vérifier la stabilité des résultats au changement de  $M_f$  ou  $N$ . Après différents essais, nous avons constaté que nos résultats étaient stables et satisfaisants pour  $M_f = 100$  et  $N = 196$ . Une fois les variables choisies, on peut utiliser des tableaux complexes pour stocker les grandeurs  $G, K, \Pi, \Sigma$  dans l'ordinateur.<sup>1</sup>

L'algorithme de solution est le suivant :

1. Fixer un potentiel chimique
2. Calculer les fonction de Green à l'ordre zéro,  $G^0$  et  $K^0$  (voir les formules décrites par la suite)
3. Calculer  $\Sigma$  et  $\Pi$
4. Calculer  $n_B, n_F, n_{tot}$  et  $b$
5. Calculer les nouvelles fonctions  $G$  et  $K$  et l'erreur relative

---

<sup>1</sup>Dans la plupart des langages (comme le C) l'indice des tableaux ne peut être négatif et dans ce cas il faut faire une transformation linéaire pour passer de la variable  $q$  (ou  $k, \omega_n, \omega_m$ ) à son vrai indice dans le tableau. Cela est énormément coûteux en terme de temps dans un problème déjà lourd. Une solution est d'utiliser les pointeurs pour changer la façon avec laquelle le programme accède aux tableaux [?] ou utiliser Fortran 90 qui autorise directement dans ses spécifications les indices négatifs dans les tableaux.

6. Retourner à l'étape 3 jusqu'à obtenir la convergence (erreur relative  $\sim 10^{-9} - 10^{-11}$ )

Une fois la convergence obtenue, on vérifie si le nombre total de particules est celui désiré, sinon on recommence avec un nouveau potentiel chimique de départ. On remarque que la convergence devient particulièrement difficile quand  $b$  s'approche de zéro (bande moitié pleine). Dans ce cas il peut être utile de démarrer le calcul non pas par  $G^0$  et  $K^0$ , mais plutôt par des  $G$  et  $K$  calculés pour des cas où la convergence est plus facilement atteinte.

La grande précision numérique est importante pour pouvoir faire ensuite une approximation de Padé des résultats satisfaisante.

### B.1.2. Calcul des self-énergies

La difficulté du calcul de  $\Sigma$  et  $\Pi$  réside dans le fait que, dans leurs expressions, la somme sur  $n$  ou  $m$  va de  $-\infty$  à  $\infty$  et pour la calculer on ne peut pas la borner tout simplement à une fenêtre avec  $n, m \in [-M_f, M_f]$  car l'erreur induite serait trop grande et la convergence ne serait pas atteinte. La solution consiste à approximer  $\Sigma$  et  $\Pi$  en dehors de la fenêtre  $[-M_f, M_f]$  par les self-énergies calculées analytiquement au premier ordre (c'est-à-dire en utilisant les  $G^0$  et  $K^0$ ). Les formules complètes à utiliser pour  $\Sigma$  et  $\Pi$  sont donc :

$$\begin{aligned} \Sigma(k, \omega_n) &= -\frac{v^2}{\beta N} \sum_q \left[ \sum_{m=-M_f}^{M_f} [G(q-k, \omega_m - \omega_n)K(q, \omega_m) - bG^0 K^0] + \sum_{m=-\infty}^{\infty} bG^0 K^0 \right] \\ &= -\frac{v^2}{\beta N} \sum_q \left[ \sum_{m=-M_f}^{M_f} [G(q-k, \omega_m - \omega_n)K(q, \omega_m) - bG^0 K^0] + \right. \\ &\quad \left. + b\beta \frac{n_F(\varepsilon_{q-k}) + n_B(E_0)}{i\omega_n + \varepsilon_{q-k} - E_0} \right] \\ \Pi(q, \omega_m) &= \frac{v^2}{\beta N} \sum_k \left[ \sum_{n=-M_f}^{M_f-1} (G(q-k, \omega_m - \omega_n)G(k, \omega_n) - bG^0 G^0) + \right. \\ &\quad \left. - \beta \frac{1 - n_F(\varepsilon_{q-k}) - n_F(\varepsilon_k)}{i\omega_m - \varepsilon_{q-k} - \varepsilon_k} \right] \end{aligned}$$

où les sommes  $\sum_{n=-\infty}^{\infty} bG^0 K^0$  et  $\sum_{m=-\infty}^{\infty} G^0 G^0$  sont calculées analytiquement avec les techniques d'analyse complexe usuelles [?]. Dans le cas où  $q-k$  est en-dehors de la zone

de Brillouin il peut y être ramené grâce à la propriété de périodicité. L'opération est effectuée par un pré-calcul de toutes les possibles valeurs de  $q - k$  qui seront stockées dans un vecteur nommé *period* de façon telle que l'indice des tableaux sera  $period[q - k]$  au lieu de  $q - k$ . Même si cette opération nous oblige à allonger le temps de calcul à cause du temps d'accès à la case mémoire du vecteur, elle est de toute façon très rentable par rapport à l'appel d'une fonction ou pire par l'insertion d'une expression *if* dans la procédure de calcul.

Dans le cas de la somme  $\omega_m - \omega_n$  également, pour certaines valeurs de  $n$  et  $m$  ce terme peut être en-dehors de la dimension de nos tableaux, mais cette fois on ne peut pas utiliser la périodicité car elle est absente sur l'axe de Matsubara. Pour résoudre le problème nous avons deux possibilités : soit on augmente la taille de nos tableaux en remplissant les nouvelles cases avec les valeurs de  $G^0$  et  $K^0$ , afin de prévoir toutes les possibles valeurs de  $\omega_m - \omega_n$ ; soit on change les limites des sommes dans les formules de  $\Sigma$  et  $\Pi$  de façon à empêcher l'indice  $\omega_m - \omega_n$  de sortir de la taille des tableaux. La première solution comporte la gestion de tableaux quatre fois plus larges que ce qu'il faut avec la deuxième solution, et cela se traduit par de sérieux problèmes dans la gestion de la mémoire et la vitesse d'exécution. La deuxième solution comporte une erreur qui reste toujours négligeable dans nos calculs.

Pour augmenter encore la vitesse d'exécution, nous avons aussi utilisé le fait que dans les self-énergies, la partie réelle est paire et la partie imaginaire est impaire sur l'axe de Matsubara et toutes les fonctions sont symétriques dans la zone de Brillouin. De cette façon, nous pouvons calculer seulement un quart de chaque tableau et retrouver le reste par symétrie.

### B.1.3. Calcul des fonctions non habillées et des densités des particules

#### Calcul de $G^0$

L'expression de  $G^0(k, \omega_n)$  peut être obtenue à partir de la transformée de Fourier (dans le temps et l'espace) de la définition :

$$G(u, \tau; s, \tau') = - \langle T \tilde{c}_u(\tau) \tilde{c}_s^+(\tau') \rangle_0$$

où la moyenne est prise sur l'hamiltonien  $H_0$  (formule A.16). Le résultat est naturellement la fonction de Green pour un gaz de fermions libres [?] :

$$G^0(k, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k}$$

où  $\varepsilon_k = D - D \cos(k) - \mu$ . Dans la suite, on utilisera  $\varepsilon_k$  normalisée en termes de la bande électronique  $2D$  et donc on aura :

$$\varepsilon_k = 0.5 - 0.5 \cos(k) - \mu$$

où  $\mu$  est le potentiel chimique normalisé en termes de  $2D$ .

### Calcul de $Y$

On peut calculer  $Y$  à partir de sa définition :

$$Y(\tau - \tau') = \frac{\langle T S_i^-(\tau) S_i^+(\tau') \rangle_0}{\langle S_i^z \rangle_0}$$

où la moyenne est calculée sur l'hamiltonien  $H_0$  de la formule A.16. La partie électronique et la constante  $\frac{1}{2}$  commutent avec la partie de spin, l'unique terme de  $H_0$  qui rentre dans le calcul est donc :

$$(\Delta_B - 2\mu) \sum_i S_i^z = E_0 \sum_i S_i^z.$$

en développant les calculs on a :

$$\begin{aligned} Y(\tau - \tau') &= \frac{1}{\langle S_i^z \rangle_0} [\langle S_i^-(\tau) S_i^+(\tau') \rangle_0 \theta(\tau - \tau') + \langle S_i^+(\tau') S_i^-(\tau) \rangle_0 \theta(\tau' - \tau)] \\ &= \frac{e^{-E_0(\tau - \tau')}}{\langle S_i^z \rangle_0} [\langle S_i^-(0) S_i^+(0) \rangle_0 \theta(\tau - \tau') + \langle S_i^+(0) S_i^-(0) \rangle_0 \theta(\tau' - \tau)] \end{aligned}$$

où on a utilisé la formule  $S_i^\pm(\tau) = S_i^\pm(0)e^{\pm E_0\tau}$  qu'on peut déduire de l'expression A.8 :

$$\begin{aligned}
S_i^+(\tau) &= e^{E_0 S_i^z \tau} S_i^+(0) e^{-E_0 S_i^z \tau} = S_i^+(0) + E_0 \tau [S_i^z, S_i^+(0)] + \dots = \\
&= S_i^+(0) e^{E_0 \tau}
\end{aligned}$$

et de façon analogue pour  $S_i^-(\tau)$ . D'ici, on peut facilement obtenir l'expression de  $K^0$  en calculant chaque terme :

$$\begin{aligned}
Z &= \left( \sum_{n_1} \langle n_1 | e^{-\beta E_0 S_i^z} | n_1 \rangle \right)^N \\
\langle S_i^-(0) S_i^+(0) \rangle_0 &= \frac{\sum_{n_1 n_2 \dots} \langle n_1 n_2 \dots | e^{-\beta E_0 \sum_j S_j^z} S_i^- S_i^+ | n_1 n_2 \dots \rangle}{Z} = \\
&= \frac{e^{\frac{\beta}{2} E_0}}{e^{-\frac{\beta}{2} E_0} + e^{\frac{\beta}{2} E_0}} \\
\langle S_i^z \rangle_0 &= \frac{\sum_{n_1 n_2 \dots} \langle n_1 n_2 \dots | e^{-\beta E_0 \sum_j S_j^z} S_i^z | n_1 n_2 \dots \rangle}{Z} = \\
&= \frac{1}{2} \frac{e^{-\frac{\beta}{2} E_0} - e^{\frac{\beta}{2} E_0}}{e^{-\frac{\beta}{2} E_0} + e^{\frac{\beta}{2} E_0}} \\
\langle S_i^+(0) S_i^-(0) \rangle_0 &= \langle S_i^z \rangle_0 + \langle S_i^-(0) S_i^+(0) \rangle_0
\end{aligned}$$

où on a utilisé, on le rappelle, les équations A.3. De là, on a finalement :

$$\begin{aligned}
Y(\tau - \tau') &= e^{-E_0(\tau - \tau')} n_y \theta(\tau - \tau') + e^{-E_0(\tau - \tau')} (n_y + 1) \theta(\tau' - \tau) \\
y &= \beta E_0 \\
n_y &= \frac{1}{e^{-y} - 1}
\end{aligned}$$

Pour finir nous calculons la transformée de Fourier [?] :

$$Y(q, \omega_m) = \int_0^\beta d(\tau - \tau') K^0(\tau - \tau') e^{i\omega_m(\tau - \tau')} = \frac{1}{i\omega_m - E_0} \quad (\text{B.1})$$

où  $\omega_m = \frac{\pi}{\beta} 2m$   $m \in Z$ . Nous rappelons que, à l'ordre zéro, nous avons pour la fonction de Green bosonique :  $K^0 = b_0 Y$ .

### Calcul de $b_0(y)$

Il nous reste maintenant à calculer le paramètre  $b(y)$ . Si jusqu'à présent on a identifié  $\langle S^z \rangle_0$  avec  $b$  pour s'uniformiser à la notation standard, il est en général judicieux de faire une distinction entre le  $b_0(y) = \langle S^z \rangle_0$  et le  $b(y) = \langle S^z \rangle$ . On a :

$$b_0(y) = \langle S^z \rangle_0 = -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{y}{2}\right) = -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta E_0}{2}\right)$$

En ce qui concerne le  $b_0(y)$  renormalisé, c'est-à-dire  $b(y)$ , on peut le calculer à partir de l'expression

$$b(y) = \langle S^z \rangle = 2 \langle S^+ S^- \rangle - \frac{1}{2} = n_B - \frac{1}{2}$$

où  $n_B$  est la densité des bosons que l'on peut calculer directement à partir de  $K$ .

### Calcul de la densité des bosons $n_B$

$n_q^B$  est la densité des bosons avec une impulsion  $q$ . En rappelant les définitions A.3 nous obtenons avec  $K(q, \tau) = \langle T S_q^-(\tau) S_q^+(0) \rangle$  :

$$\begin{aligned} n_q^B &= 2 \langle S_q^+(0) S_q^-(0) \rangle \\ K(q, 0^-) &= \langle S_q^+(0) S_q^-(0^-) \rangle = \frac{n_q^B}{2} \end{aligned}$$

Et finalement :

$$\begin{aligned} n_q^B = 2 \langle S_q^+(0) S_q^-(0) \rangle &= 2 \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \langle T S_q^-(\tau) S_q^+(0) \rangle = \\ &= 2 \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m = -\infty}^{+\infty} e^{-i\tau\omega_m} K(q, \omega_m) \end{aligned}$$

Afin de calculer cette quantité numériquement, il faut approximer  $K$  avec  $K^0$  en-dehors d'une certaine fréquence  $\omega_{M_f} = \frac{2\pi}{\beta} M_f$  comme déjà discuté pour les self-énergies. L'approximation est justifiée par le fait que  $K \sim \frac{1}{\omega_m}$  (voir [?]) pour les hautes fréquences. Numériquement,  $\omega_{M_f}$  sera choisie de telle façon que changer cette limite n'influencera

pas les résultats obtenus. On a donc :

$$\begin{aligned} n_q^B &= 2 \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{1}{\beta} \sum_{m=-M_f}^{M_f} e^{-i\tau\omega_m} [K(q, \omega_m) - bK^0(q, \omega_m)] + \\ &+ \frac{2b}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-i\tau\omega_m} \frac{1}{i\omega_m - E_0} \end{aligned}$$

où  $m \in Z$ . Pour finir il nous reste à calculer la somme sur  $m$ . Pour cela, on définit l'intégrale suivante :

$$\int_{R \rightarrow \infty} dz \frac{e^{-z0^-}}{z - E_0} \frac{1}{e^{\beta z} - 1}$$

qui est identiquement nulle, vu que :

$$\begin{cases} si \Re(z) \rightarrow \infty \implies \frac{1}{e^{(\beta+0^-)z} - e^{z0^-}} \rightarrow 0 \\ si \Re(z) \rightarrow -\infty \implies \frac{e^{-z0^-}}{e^{\beta z} - 1} \rightarrow 0 \end{cases}$$

Néanmoins, par le théorème des résidus on a :

$$0 = \int_{R \rightarrow \infty} dz \frac{e^{-z0^-}}{z - E_0} \frac{1}{e^{\beta z} - 1} = \frac{1}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\tau\omega_m}}{i\omega_m - E_0} + \frac{e^{E_0 0^-}}{e^{\beta E_0} - 1}$$

d'où :

$$\frac{1}{\beta} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\tau\omega_m}}{i\omega_m - E_0} = -\frac{1}{e^{\beta E_0} - 1}$$

### Calcul de la densité des fermions $n_F$

Nous pouvons écrire la fonction de Fermi de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
f_F(\varepsilon_k) &= \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k} + 1} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_k}{2}\right) = \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\frac{\pi}{\beta}(2n+1) - \varepsilon_k}
\end{aligned}$$

car :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\frac{\pi}{\beta}(2n+1) - \varepsilon_k} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{i\pi(2n+1) - \beta\varepsilon_k} + \frac{1}{i\pi(-2n-1) - \beta\varepsilon_k} \\
= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-2\beta\varepsilon_k}{\pi^2(2n+1)^2 + (\beta\varepsilon_k)^2} &= -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_k}{2}\right)
\end{aligned}$$

où, pour le dernier passage, on peut utiliser [?] ou Mathematica [?]. D'ici, en utilisant la formule standard pour la densité des fermions [?], nous avons :

$$\begin{aligned}
n_k^F = \langle c_k^+ c_k \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_k}{2\pi} f_F(\varepsilon_k) A_F(k, \varepsilon_k) = \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G(k, i\omega_n)
\end{aligned}$$

où  $A_F$  est la fonction spectrale des fermions et où nous avons utilisé les relations [?] :

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_k}{2\pi} A_F(k, \varepsilon_k) &= 1 \\
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_k}{2\pi} \frac{A_F(k, \varepsilon_k)}{i\omega_n - \varepsilon_k} &= G(k, \varepsilon_k)
\end{aligned}$$

Pour calculer numériquement  $n_k^F$  il faut, comme pour les bosons, approximer la fonction habillée par la fonction nue en-dehors de la fenêtre  $\omega_n \in [\omega_{-M_f}, \omega_{M_f-1}]$  et donc nous avons :

$$\begin{aligned}
n_k^F &= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-M_f}^{M_f-1} [G(k, \omega_n) - G^0(k, \omega_n)] + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G^0(k, \omega_n) = \\
&= f_F(\varepsilon_k) + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-M_f}^{M_f-1} [G(k, \omega_n) - G^0(k, \omega_n)]
\end{aligned}$$

### Calcul de la densité totale $n_{tot}$

La densité totale des particules sera donc :  $n_{tot} = 2n_F + 2n_B$ , car il faut compter les états de spin pour les fermions et se rappeler qu'un boson à coeur dur est formé par deux électrons.

#### B.1.4. Continuations analytiques

Après avoir résolu les équations en travaillant sur l'axe de Matsubara, nous connaissons les fonctions de Green et les self-énergies dans un ensemble de points discrets et nous devons alors recourir à une continuation analytique pour retourner sur l'axe réel, afin d'obtenir des propriétés physiques.

On définit la continuation analytique d'une fonction  $G$  donnée sur un ensemble  $\mathcal{A} \subset \mathbb{C}$ , par la fonction  $\overline{G}$  qui correspond à  $G$  sur l'ensemble  $\mathcal{A}$  et qui est analytique sur un domaine qui contient  $\mathcal{A}$ .

Le théorème de Mermin et Baym [?] nous assure que, dans notre cas, où toutes les fonctions de corrélations qui nous intéressent décroissent comme  $\frac{1}{z}$  pour  $|z| \rightarrow \infty$ , la continuation analytique existe et est unique. La procédure la plus utilisée et la plus simple pour obtenir une telle continuation est l'approximation de Padé<sup>2</sup>[?] qui consiste à écrire la fonction  $\overline{G}$  comme une fraction continue du type :

$$\overline{G}(z) = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2(z-z_1)}{1 + \frac{a_3(z-z_2)}{1 + \frac{a_4(z-z_3)}{\dots + a_N(z-z_{N-1})}}}$$

et trouver les différents coefficients en imposant :

---

<sup>2</sup>La structure de l'approximation de Padé, constituée par une fonction rationnelle nous permet de traiter aussi des fonctions qui contiennent des pôles et qui seraient difficilement traitables avec d'autres techniques.

$$\overline{G}(i\omega_n) = G(i\omega_n)$$

Une fois les coefficients déterminés, on peut évaluer  $\overline{G}$  sur l'ensemble des points  $\omega + i\delta$  pour obtenir la fonction de Green retardée ou la fonction spectrale.

Les algorithmes utilisés pour obtenir l'approximation de Padé sont aujourd'hui très répandus et ont été appliqués avec succès pour la première fois il y a longtemps à des cas bien plus complexes et problématiques que le nôtre [?]. Néanmoins, l'opération reste délicate d'un point de vue numérique et la précision des données en entrée comme le nombre de points sur l'axe de Matsubara restent des paramètres importants pour que la procédure soit satisfaisante. Dans un problème tel que la solution des équations d'Eliashberg où la structure des fonctions sur l'axe réel reste compliquée, une précision de  $10^{-17}$  est nécessaire et le nombre des points sur l'axe de Matsubara doit être choisi avec beaucoup de précaution. Certains algorithmes modernes [?] vont même plus loin et se basent sur des langages de programmation qui permettent une implémentation logicielle de la précision numérique, qui peut être exploitée pour avoir un nombre arbitraire de chiffres significatifs. Nous n'avons pas utilisé ces algorithmes car ils apportent une réelle amélioration seulement si on peut travailler avec des données d'une précision de plus de 120 chiffres et cela reste largement hors de la portée des langages de programmation traditionnels tel que C et Fortran. D'autre part, les langages interprétés tels que Maple ou Mathematica qui permettent une précision arbitraire ne sont pas encore assez rapides pour résoudre des problèmes numériques complexes.

Pour notre problème, cette méthode de Padé est suffisamment précise pour que nous puissions obtenir des renseignements sur la modification de la DOS montrant l'ouverture du pseudogap en utilisant une précision de  $10^{-9} \div 10^{-12}$  dans les données de départ et en vérifiant qu'une précision plus élevée n'apportait pas de différence. Il est important aussi de remarquer qu'ajouter des points sur l'axe de Matsubara ne peut augmenter la qualité du résultat et peut même la dégrader [?]. Le nombre de points nécessaires change naturellement avec la température. En particulier, quand cette dernière est assez basse, il faut s'assurer que les points  $\omega_m$  sont assez nombreux pour couvrir toute la zone où la fonction est significativement différente de zéro. Notre choix oscille entre 20 et 80 points selon la température et le facteur de remplissage de la bande. Le choix du  $\delta$  dans les points au-dessus de l'axe réel  $\omega + i\delta$  où calculer la continuation analytique est à choisir de façon à ce que de petits changements de sa valeur n'en induisent pas de gros dans la fonction spectrale. Un critère utile est de toujours vérifier la normalisation des fonctions continuées et en tout cas de contrôler si

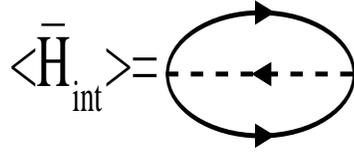


FIG. B.1. – Diagramme de la moyenne du terme d'interaction intervenant dans le calcul de la chaleur spécifique.

l'approximation sur l'axe imaginaire, où nous connaissons exactement les fonctions à approximer, est de bonne qualité. Dans notre cas, la normalisation atteignait souvent des précisions de  $10^{-5}$ .

## B.2. Calcul de la chaleur spécifique

Pour déterminer la formule opérationnelle de la chaleur spécifique pour un système de bosons et d'électrons en interaction, nous partons de l'énergie interne  $U$  exprimée comme la moyenne de l'hamiltonien du BFM dans l'espace de Fourier  $\overline{H} = \overline{H}_0 + \overline{H}_{int}$ . Nous avons :

$$\begin{aligned}
 U(T) = \langle \overline{H} \rangle &= \frac{2}{N} \sum_k \xi_k \langle c_k^+ c_k \rangle + \frac{\Delta_B}{N} \sum_q \langle S_q^z + \frac{1}{2} \rangle + \\
 &+ v \langle TF \left\{ \sum_i S_i^+ c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \right\} \rangle = \\
 &= \frac{2}{N} \sum_k \xi_k n_k^F + \Delta_B n_B - \frac{2}{\beta N} \sum_{q, \omega_m} \Pi(q, \omega_m) K(q, \omega_m)
 \end{aligned}$$

Pour obtenir la moyenne  $\langle \overline{H}_{int} \rangle$ , le terme d'interaction dans l'espace réel a été, avant tout, développé en diagrammes de Feynman et sa transformée de Fourier a ensuite été effectuée. Le résultat sous forme de diagramme est montré dans la figure B.1.

Le calcul des contributions cinétiques de  $U$  est immédiat car la solution des équations intégrales du BFM nous permet d'évaluer les nombres d'occupation fermioniques et bosoniques. En ce qui concerne le terme d'échange, notre connaissance de la self-énergie  $\Pi$  et de la fonction de Green  $K$  étant limitée à un nombre de fréquences fini, il faut trouver une façon approximée de calculer la somme sur  $\omega_m$  de  $-\infty$  à  $+\infty$ . Même si nous savons déjà que la contribution des termes à fréquence élevée ne sera pas très importante car le produit  $\Pi(q, \omega_m) K(q, \omega_m)$  décroît rapidement, le fait que la détermination de la chaleur spécifique implique le calcul, plutôt délicat, d'une dérivée

numérique, nous incite à ne pas prendre de risques en négligeant une partie que nous ne savons pas estimer *a priori*. Nous suivons donc la même stratégie que celle utilisée dans le calcul des self-énergies et nous approximations le produit  $\Pi(q, \omega_m)K(q, \omega_m)$  par  $\Pi^0(q, \omega_m)K^0(q, \omega_m)$  en dehors de la fenêtre  $m \in [-M_f, M_f]$ . D'ici nous avons :

$$\begin{aligned} \langle \overline{H_{int}} \rangle &= -\frac{2}{\beta N} \sum_q \left\{ \sum_{\omega_m=-M_f}^{M_f} [\Pi(q, \omega_m)K(q, \omega_m) - b\Pi^0(q, \omega_m)K^0(q, \omega_m)] + \right. \\ &\quad \left. - \frac{v^2}{N} \sum_k \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1 - n_F(\varepsilon_{q-k}) - n_F(\varepsilon_k)}{i\omega_m - \varepsilon_{q-k} - \varepsilon_k} \frac{b}{i\omega_m - E_0} \right\} \end{aligned}$$

En calculant analytiquement la somme sur  $m$ , nous obtenons finalement :

$$\begin{aligned} \langle \overline{H_{int}} \rangle &= -\frac{2}{\beta N} \sum_q \left\{ \sum_{\omega_m=-M_f}^{M_f} [\Pi(q, \omega_m)K(q, \omega_m) - b\Pi^0(q, \omega_m)K^0(q, \omega_m)] + \right. \\ &\quad \left. - \frac{v^2}{N} \sum_k \frac{-bz(q, k)\beta}{2[E_0 + w(q, k)]} \left[ \coth\left(\frac{\beta E_0}{2}\right) + \coth\left(\frac{\beta w}{2}\right) \right] \right\} \end{aligned}$$

où nous avons :

$$\begin{aligned} z(q, k) &= 1 - n_F(\varepsilon_{q-k}) - n_F(\varepsilon_k) \\ w(q, k) &= -\varepsilon_{q-k} - \varepsilon_k. \end{aligned}$$

Pour certaines valeurs de  $q$  et  $k$ , la quantité  $E_0 + w(q, k)$  tend vers zéro et il faut donc gérer ces cas de façon à éliminer analytiquement cette singularité grâce au numérateur. En effet, en calculant la limite, nous obtenons :

$$\lim_{E_0 + w(q, k) \rightarrow 0} \frac{z}{E_0 + w} \frac{2(e^{\beta(E_0 + w)} - 1)}{1 - e^{\beta w} - e^{\beta E_0} + e^{\beta(E_0 + w)}} = \frac{2\bar{z}\beta}{2 - e^{\beta\bar{w}} - e^{\beta E_0}}$$

où  $\bar{z}$  et  $\bar{w}$  sont les valeurs de  $z$  et  $w$  calculées pour les  $k$  et  $q$  pour lesquels  $E_0 + w(q, k) \rightarrow 0$ .

Notre connaissance de l'énergie interne ainsi calculée est limitée à certaines valeurs de la température. Le calcul de la chaleur spécifique :

$$C_V(T) = \frac{dU(T)}{dT}$$

doit donc être effectué sur une interpolation polynomiale de l'énergie.

### B.2.1. Calcul de $C_V$ pour un gaz de bosons et fermions sans interaction

Par comparaison avec le cas précédant, nous calculons aussi la chaleur spécifique d'un gaz de bosons de coeur dur et de fermions libres sans interaction d'échange entre eux.

Pour les fermions nous avons :

$$\begin{aligned} E_{kin}^F &= \frac{2}{N} \sum_k \xi_k \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} \\ \varepsilon_k &= \xi_k - \mu = 0.5 - 0.5 \cos(k) - \mu \end{aligned}$$

où  $\varepsilon_k$  est la relation de dispersion pour des électrons sur un réseau 1D, normalisée à la valeur de la bande électronique. Pour les bosons de coeur dur nous avons :

$$E_{kin}^B = \frac{1}{N} \sum_q \Delta_B \frac{1}{e^{\beta E_0} - 1}$$

Le potentiel chimique  $\mu$  est choisi de telle manière que

$$n_{tot} = 2n_F + 2n_B = \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} + \frac{2}{e^{\beta E_0} - 1}$$

soit celui imposé. La chaleur spécifique est naturellement :

$$C_V(T) = \frac{dU(T)}{dT} = \frac{d}{dT} [E_{kin}^F(T) + E_{kin}^B(T)].$$

## C. Le modèle XY sur deux sites

L'hamiltonien à étudier est :

$$H = -2J (S_1^+ S_2^- + S_2^+ S_1^-) + E_0 (S_1^z + S_2^z)$$

où les opérateurs sont les opérateurs de spin  $S$  définis dans le paragraphe 2.2. Pour les vecteurs d'états nous utilisons la notation :

$$|+ \rangle = |\uparrow\rangle \quad |- \rangle = |\downarrow\rangle .$$

Les vecteurs et valeurs propres, calculables en diagonalisant la matrice associée à  $H$  dans la base  $|\{\pm\} \rangle \otimes |\{\pm\} \rangle$ , sont les suivants :

$$\begin{aligned} |x \rangle &= |- \rangle \otimes |- \rangle = |-- \rangle \\ |z \rangle &= |++ \rangle \\ |u \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+- \rangle - |-+ \rangle) \\ |v \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+- \rangle + |-+ \rangle) \\ \lambda_x &= -E_0 \\ \lambda_z &= E_0 \\ \lambda_u &= -J \\ \lambda_v &= J. \end{aligned}$$

D'ici, en utilisant la définition de fonction spectrale donnée dans l'équation A.20, nous

pouvons calculer :

$$\begin{aligned}
A_{12}^B(\omega) &= \frac{2\pi}{Z} \sum_{nm} (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) \rho_{1nm}^- \rho_{2mn}^+ \delta(\omega - E_m + E_n) \\
&= \frac{2\pi}{Z} \left[ \frac{e^{\beta J} + e^{-\beta J} - e^{\beta E_0} - e^{-\beta E_0}}{2Z} \delta(\omega + J - E_0) + \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{\beta J} + e^{-\beta J} - e^{\beta E_0} - e^{-\beta E_0}}{2Z} \delta(\omega - J - E_0) \right]
\end{aligned}$$

où  $Z = \sum_{n=1}^4 e^{-\beta E_n} = e^{\beta E_0} + e^{\beta J} + e^{-\beta J} + e^{-\beta E_0}$ . La formule de normalisation A.21 est respectée car (dans le calcul précédent nous avons imposé que le site 1 et 2 soient différents) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{12}^B(\omega) = 0.$$

Nous calculons aussi la fonction spectrale  $A_{11}(\omega)$  :

$$\begin{aligned}
A_{11}^B(\omega) &= \frac{2\pi}{Z} \sum_{nm} (e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}) \rho_{1nm}^- \rho_{1mn}^+ \delta(\omega - E_m + E_n) = \\
&= \frac{2\pi}{2Z} \{ [\sinh(\beta J) - \sinh(\beta E_0)] \delta(\omega + J - E_0) + \\
&\quad - [\sinh(\beta J) + \sinh(\beta E_0)] \delta(\omega - E_0 - J) \}
\end{aligned}$$

d'où :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{11}^B(\omega) = -\frac{\sinh(\beta E_0)}{2 \cosh(\beta E_0) + 2 \cosh(\beta J)}.$$

Nous remarquons que, aussi dans ce cas, la condition A.21 est satisfaite car :

$$\langle S_1^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^4 e^{-\beta E_n} \langle n | S_i^z | n \rangle = -\frac{\sinh(\beta E_0)}{2 \cosh(\beta E_0) + 2 \cosh(\beta J)}.$$

On peut aussi vérifier que :

$$\begin{aligned}
A_{22}^B &= A_{11}^B \\
A_{21}^B &= A_{12}^B
\end{aligned}$$

En utilisant l'ensemble de fonctions orthogonales  $\left\{ e^{ikm\frac{2\pi}{N}} \right\}$  où  $N = 2$  et  $k \in \{1, 2\}$  nous calculons la fonction spectrale dans l'espace réciproque :

$$\tilde{A}_{kl} = \sum_{mn} A_{mn}^B e^{-i(mk+nl)\pi}$$

d'où :

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{11} &= 2A_{11}^B - 2A_{12}^B \\ &= \frac{2\pi}{Z} [(e^{-\beta E_0} - e^{-\beta J}) \delta(\omega + J - E_0) + (e^{-\beta J} - e^{\beta E_0}) \delta(\omega - J - E_0)] \\ \tilde{A}_{22} &= 2A_{11}^B + 2A_{12}^B \\ &= \frac{2\pi}{Z} [(e^{-\beta E_0} - e^{\beta J}) \delta(\omega - J - E_0) + (e^{\beta J} - e^{\beta E_0}) \delta(\omega + J - E_0)] \\ \tilde{A}_{12} &= \tilde{A}_{21} = 0 \end{aligned}$$



# Bibliographie

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, 1970.
- [2] A. S. Alexandrov and J. Ranninger. *Phys. Rev. B*, 23 :1796, 1981.
- [3] A. S. Alexandrov and J. Ranninger. *Phys. Rev. B*, 24 :11164, 1981.
- [4] S. Allen, H. Touchette, S. Moukouri, Y. M. Vilk, and A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :4128, 1999.
- [5] H. Alloul *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 63 :1700, 1989.
- [6] P. W. Anderson. *Science*, 235 :1196, 1987.
- [7] G. A. Baker. *Essentials of Padé Approximants*. academic Press, New York, 1975.
- [8] A. Bansil and M. Lindroos. *J. Phys. chem. Solids*, 59 :1879, 1998.
- [9] D. N. Basov, C. C. Homes, E. J. Singley, M. Strongin, T. Timusk, G. Blumberg, and D. van der Marel. *Phys. Rev. B*, 63 :134514, 2001.
- [10] B. Batlogg and C. M. Varma. *Physics World*, vol 13 issue 2, 2000.
- [11] G. Baym and L. P. Kadanoff. *Phys. Rev.*, 124 :287, 1961.
- [12] G. Baym and D. Mermin. *J. Math. Phys.*, 2 :232, 1961.
- [13] K. S. D. Beach, R. J. Gooding, and F. Marsiglio. cond-mat/9908477, Nov 1999.
- [14] G. J. Bednorz and K. A. Müller. *Z. Phys. B*, 64 :189, 1986.
- [15] A. Bianconi. *Solid State Comm.*, 91 :1, 1994.
- [16] D. K. Brock, E. K. Track, and J. M. Rowell. *IEEE Spectrum*, pages 40–46, December 2000.
- [17] B. K. Chakraverty. *Physica*, C 341 :75, 2000.
- [18] B. K. Chakraverty and J. Ranninger. *Phil. Mag*, B 52 :669, 1985.
- [19] B. K. Chakraverty, J. Ranninger, and D. Feinberg. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :433, 1998.
- [20] B. Chakraverty *et al.* *Phys. Rev. B*, 17 :3781, 1978.

- [21] H.-Y. Choi, Y. Bang, and D. K. Campbell. *Phys. Rev. B*, 61 :9748, 2000.
- [22] J. Corson, R. Mallozzi, J. Orenstein, J. N. Eckstein, and I. Bozovic. *Nature*, 398 :221, 1999.
- [23] G. Deutscher. *Nature*, 397 :410, 1999.
- [24] P. Devillard and J. Ranninger. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :5200, 2000.
- [25] J. T. Devreese. cond-mat/0004497.
- [26] H. Ding *et al.* *Nature*, 382 :51, 1996.
- [27] T. Domanski and J. Ranninger. *Unpublished*, 1998.
- [28] T. Domanski, J. Ranninger, and J.-M. Robin. *Solid State Commun.*, 105 :473, 1997.
- [29] V. J. Emery and S. A. Kivelson. *Nature*, 374 :434, 1995.
- [30] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, New York, 1971.
- [31] S. Fratini. *Cristallisation des polarons à basse densité et transition isolant-métal : effet de l'interaction coulombienne à longue portée*. PhD thesis, Université Grenoble I, 1999.
- [32] R. Gehlig and E. Salje. *Phil. Mag.*, 47 :229, 1983.
- [33] B. Giovannini and C. Berthold. *Phys. Rev. B*, 63 :144516, 2001.
- [34] T. Holstein. *Ann. Phys. (USA)*, 8 :343–389, 1959.
- [35] C. C. Homes, T. Timusk, D. A. Bonn, R. Liang, and W. N. Hardy. *Phys. Rev. Lett.*, 71 :1645, 1993.
- [36] I. Iguchi, T. Yamaguchi, and A. Sugimoto. *Nature*, 412 :420, 2001.
- [37] Yu. Izyumov and Yu. Skryabin. *Statistical mechanics of magnetically ordered systems*. Consultant Bureau, New York, 1988.
- [38] Yu. A. Izyumov, N. I. Chaschin, and V. Yu. Yushankhai. *Phys. Rev. B*, 65 :214425, 2002.
- [39] L. P. Kadanoff and P. C. Martin. *Phys. Rev.*, 124 :670, 1961.
- [40] E. Kochetov and M. Mierzejewski. cond-mat/0204420.
- [41] T. K. Kopec. *Phys. Rev. B.*, 65 :54509, 2002.
- [42] A. A. Kordyuk *et al.* *Phys. Rev. B*, 66 :14502, 2002.
- [43] V. M. Krasnov *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 84 :5860, 2000.

- [44] M. Kugler *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4911, 2001.
- [45] B. Kyung, S. Allen, and A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. B*, 64 :75116, 2001.
- [46] S. Lakkis *et al.* *Phys. Rev. B*, 14 :1429, 1976.
- [47] J. W. Loram *et al.* *Physica C*, 341 :831, 2000.
- [48] S. Lupi, P. Calvani, M. Capizzi, and P. Roy. *Phys. Rev. B*, 62 :12418, 2000.
- [49] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Plenum Press, New York, 1981.
- [50] D. S. Marshall *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 76 :4841, 1996.
- [51] M. Merz *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 80 :5192, 1998.
- [52] R. Micnas *et al.* *Phys. Rev. B.*, 52 :16223, 1995.
- [53] C. P. Moca and B. Janko. *Phys. Rev. B.*, 65 :52503, 1995.
- [54] A. Mysyrowicz, E. Benson, and E. Fortin. *Phys. Rev. Lett.*, 77 :896, 1996.
- [55] F. Onufrieva, P. Pfeuty, and M. Kiselev. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :2370, 1999.
- [56] C. Panagopoulos, J. R. Cooper, T. Xiang, Y. S. Wang, and C. W. Chu. *Phys. Rev. B*, 61 :R3808, 2000.
- [57] W. H. Press *et al.* *Numerical Recipes in C (second Edition)*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [58] M. Randeria. in '*Bose Einstein Condensation*' ed. A. Griffin, D. Snoke and S. Stringari. p. 355, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 1995.
- [59] M. Randeria. in '*Models and phenomenology for Conventional and High-temperature superconductivity*'; *Proc. Int. School of Physics 'Enrico Fermi' Course CXXXVI* ed. G. Iadonisi *et al.* IOP Press, Amsterdam, 1998.
- [60] M. Randeria *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 69 :2001, 1992.
- [61] M. Randeria *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 74 :4951, 1995.
- [62] J. Ranninger, R. Micnas, and S. Robaszkiewicz. *Ann. Phys. Fr*, 13 :455, 1988.
- [63] J. Ranninger and S. Robaszkiewicz. *Physica*, 135B :468, 1985.
- [64] J. Ranninger and J.-M Robin. *Physica C*, 253 :279, 1995.
- [65] J. Ranninger and J.-M Robin. *Solid State Commun.*, 96 :559, 1996.
- [66] J. Ranninger, J.-M. Robin, and M. Eschrig. *Phys. Rev. Lett.*, 74 :4027, 1995.
- [67] J. Ranninger and A. Romano. *Phys. Rev. B*, 66 :094508, 2002.
- [68] J. Ranninger and L. Tripodi. *Solid State Commun.*, 112 :345, 1999.

- [69] L. E. Rehn, R. P. Sharma, and P. M. Baldo. *in 'Lattice Effects in High-Tc Superconductors'* ed. Y. Bar-Yam, T. Egami, J. Mustre de Leon and A. R. Bishop. World Scientific, Singapore, 1992.
- [70] C. Renner *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 80 :149, 1998.
- [71] T. M. Rice. *in 'Models and phenomenology for Conventional and High-temperature superconductivity'*; *Proc. Int. School of Physics 'Enrico Fermi' Course CXXXVI* ed. G. Iadonisi *et al.* IOP Press, Amsterdam, 1998.
- [72] G. Rickayzen. *Green's Functions and Condensed Matter*. Academic Press, London, 1980.
- [73] J.-M. Robin. *Supraconductivité dans un mélange de fermions et de bosons*. PhD thesis, Université Grenoble I, 1995.
- [74] J.-M. Robin, A. Romano, and J. Ranninger. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :2755, 1998.
- [75] J. Rossat-Mignod *et al.* *Physica B*, 180 :383, 1991.
- [76] S. Sachdev. *Nature*, 288 :75, 2000.
- [77] A. Schnell, G. Roepke, and P. Schuck. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :1926, 1999.
- [78] A. Sewer and H. Beck. *Phys. Rev. B*, 64 :224524, 2001.
- [79] T. Shibauchi *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 86 :5763, 2001.
- [80] M. Suzuki and T. Watanabe. *Phys. Rev. Lett.*, 85 :4787, 1991.
- [81] D. B. Tanner *et al.* *Physica B*, 244 :1, 1998.
- [82] O. Tchernyshyov. *Phys. Rev. B*, 56 :3372, 1997.
- [83] T. Timusk and B. Stratt. *Rep. Prog. Phys.*, 62 :61, 1999.
- [84] H. Tolentino *et al.* *Physica C*, 192 :115, 1992.
- [85] J. M. Tranquada. *Phys. Rev. B*, 52 :3581, 1995.
- [86] N. Trivedi and M. Randeria. *Phys. Rev. Lett.*, 75 :312, 1995.
- [87] N. Trivedi and M. Randeria. *J. of Superconductivity*, 9 :13, 1996.
- [88] V. G. Vaks, A. I. Larkin, and S. A. Pikin. *Soviet Physics JETP*, 26 :188, 1968.
- [89] V. G. Vaks, A. I. Larkin, and S. A. Pikin. *Soviet Physics JETP*, 26 :647, 1968.
- [90] C. Varma. *Phys. Rev. Lett.*, 63 :1996, 1989.
- [91] C. M. Varma. *Phys. Rev. B*, 61 :R3804, 1999.
- [92] H.J. Vidberg and J. Serene. *Journal of Low Temperature Physics*, 29 :179, 1977.
- [93] Y. M. Vil'k and A. M. S. Tremblay. *J. Phys. I (France)*, 7 :1309, 1997.

- [94] W. W. Warren *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 59 :1860, 1987.
- [95] S. A. Wolf. *in 'The Gap Symmetry and Fluctuations in High-T<sub>c</sub> superconductors'*; edited by Bok *et al.* Plenum Press, New York, 1998.
- [96] S. Wolfram. *The Mathematica Book*. Wolfram Media/Cambridge University Press, 1999.
- [97] Z. A. Xu, N. P. Ong, T. Kakeshita, and S. Uchida. *Nature*, 406 :486, 2000.
- [98] V. A. Yurovski and A. Ben-Reuven. cond-mat/0205267.

Dans cette thèse nous étudions le phénomène de la supraconductivité à haute température critique sur la base d'un modèle d'un gaz de bosons et d'électrons en interaction. Les bosons sont des paires électroniques localisées avec une forte répulsion à courte portée (cœur dur) alors que les fermions sont des électrons itinérants. En utilisant un développement en diagrammes de Feynman qui tient compte des fortes corrélations entre bosons, nous étudions le comportement du système en fonction du dopage. Nous traçons en particulier le diagramme de phase en mettant en évidence ses similitudes avec celui des supraconducteurs à haute température critique. La température d'ouverture du pseudogap  $T^*$ , déterminée par l'apparition d'un creux dans la densité d'états électronique, varie en fonction du dopage (donné par la concentration totale des bosons plus les fermions) de façon opposée par rapport à la température critique  $T_0$ . Cette dernière est estimée par l'échelle d'énergie de la rigidité de la phase liée à son tour au rapport entre le nombre de porteurs de charges superfluides et leur masse. L'importante variation de la masse à cause des corrélations électroniques qui deviennent de plus en plus importantes lorsque la concentration des bosons augmente, est responsable de l'augmentation de la température critique avec le dopage. Nous analysons dans ce contexte la transition graduelle entre un mécanisme de fluctuations de phase qui contrôle la supraconductivité pour des faibles dopages et un mécanisme de fluctuations d'amplitude qui détermine la transition vers la phase supraconductrice pour des dopages élevés.

## **ON PHASE AND AMPLITUDE FLUCTUATIONS IN PRECURSOR PAIRING SUPERCONDUCTORS**

In this thesis we study the high temperature superconductivity phenomenon on the basis of a mixture of interacting bosons and fermions. The bosons are localized electrons pairs with strong on site repulsion (hard core) and the fermions are constituted by itinerant electrons. Using a diagrammatic approach taking into account the hard core nature of the bosons, we can examine the behavior of the system as a function of doping. We focus on the phase diagram showing its connection with the experimental phase diagram of the high temperature superconductors. The pseudogap opening temperature  $T^*$ , determined from the appearance of a dip in the électronique density of states, has an opposite variation as a function of doping (given by the total concentration of fermions plus bosons) as compared with the superconducting critical temperature  $T_0$ . We determine that latter from the energy scale of the phase stiffness connected with the ratio of the charge carriers density and their mass. In this scenario, the increasing of  $T_0$  with doping is related to the variation of the mass rather than to the variation of the superfluid charge carriers density. We analyze in this context the change-over from the phase- to amplitude-fluctuation driven superconductivity going from low to high doping.

**Discipline** : Physique.

**Mots-clés** : Supraconductivité à haute température critique. Pseudogap. Fluctuations de phase. Appariement précurseur. Systèmes électroniques fortement corrélés.