

THESE

présentée par

Denis PETER

pour obtenir le titre de

Docteur de l'Université Joseph Fourier - Grenoble I
(arrêté ministériel du 5 juillet 1984)

**CONTRIBUTION A L'ETUDE
DE L'ANTIFERROMAGNETISME
DANS LES OXYDES SUPRACONDUCTEURS**

Soutenue le 14 décembre 1990

Composition du Jury :

Président :	P. NOZIERES
Examineurs :	F. GAUTIER
	R. LEMAIRE
	M. CYROT
	D. MAYOU
Invité :	E.R. PIKE

Thèse préparée au sein du Laboratoire Louis Néel
- CNRS - Grenoble -

Cette thèse a été effectuée au sein du Laboratoire de magnétisme "Louis Néel" dirigé par R. LEMAIRE. J'en remercie tous les membres pour une ambiance sympathique dont je n'ai eu que trop peu le temps de bénéficier.

Je suis très touché par l'intérêt que P. NOZIERES, Professeur au Collège de France, a apporté à ce travail. Je le remercie pour l'honneur qu'il me fait en présidant le jury de cette thèse. Je remercie de même les autres personnalités qui ont accepté faire partie du jury, en particulier, E.R. PIKE, Professeur au King's College et F. GAUTIER, Professeur à l'Université Joseph Pasteur. Je remercie tout particulièrement R. LEMAIRE, Directeur du Laboratoire Louis Néel, pour le grand plaisir qu'il me fait en participant au jury de cette thèse .

Une mention spéciale doit être faite de deux personnes sans lesquelles, cette thèse n'aurait, en aucun cas, pu exister. Il s'agit d'abord de M. CYROT, Professeur à l'Université Joseph Fourier, qui a dirigé cette thèse. Je lui fait part de toute ma reconnaissance pour la gentillesse et la disponibilité dont il a fait preuve à mon égard ainsi que pour les orientations opportunes qu'il a données à ce travail. Il s'agit, enfin, de D. MAYOU, Chargé de recherche au CNRS. Qu'il trouve ici toute ma gratitude pour le temps considérable et agréable qu'il m'a consacré. Un certain nombre d'idées et de résultats mentionnés dans ce mémoire lui sont dus.

Je remercie également les membres du laboratoire Louis Néel avec lesquels j'ai eu de fructueuses discussions ou qui m'ont rendu service à diverses occasions. Il s'agit, en particulier, de C. LACROIX, C. BASTIDE, B. BARBARA, R. BALLOU, P. MORIN, J. PIERRE, D. SCHMITT, Y. RANC, I. ZANONI ... Je ne saurais oublier J.P. JULIEN qui m'a initié à la méthode de récursion ainsi que D. GUENICHE pour son précieux soutien en informatique. Enfin, je remercie M. JAUDON et B. PICHAND pour le tirage de la thèse.

SOMMAIRE SIMPLIFIE

INTRODUCTION GENERALE	P. 1
I LA METHODE DE GUTZWILLER	P. 7
I.A RUDIMENTS	
I.B APPROCHE DE GUTZWILLER ET PREMIERES APPLICATIONS	
I.C GENERALISATION DE LA METHODE DE GUTZWILLER	
II LE MODELE DE HUBBARD DU RESEAU CARRE	P. 41
II.A MODELISATION DES OXYDES SUPRACONDUCTEURS	
II.B LE COMPOSE NON DOPE	
II.C LE COMPOSE DOPE	
III LE MODELE A DEUX BANDES DU PLAN CuO_2	P. 89
III.A LE MODELE A DEUX BANDES	
III.B LE COMPOSE PARAMAGNETIQUE	
III.C LE COMPOSE ANTIFERROMAGNETIQUE	
IV LES FORTES CORRELATIONS	P.133
IV.A LE MODELE t - J ET LES PHASES A FLUX	
IV.B STRUCTURE ELECTRONIQUE SOUS CHAMP MAGNETIQUE	
IV.C DIAMAGNETISME DE LANDAU SUR RESEAU	
IV.D STABILITE DES PHASES A FLUX UNIFORMES	
CONCLUSION GENERALE	P.201

Thanks for many things,
Michel.

Hiro Koga

le. 04.08.95



TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE	P. 1
I LA METHODE DE GUTZWILLER	
INTRODUCTION	P. 9
I.A RUDIMENTS	
A.1 Le formalisme des liaisons fortes	P. 10
1.a L'espace quantique	P. 10
1.b Quelques opérateurs	P. 11
A.2 L'hamiltonien de Hubbard	P. 12
I.B APPROCHE DE GUTZWILLER ET PREMIERES APPLICATIONS	
B.1 Le calcul de Gutzwiller	P. 14
1.a Au delà de l'approximation de Hartree-Fock	P. 14
1.b La fonction d'onde variationnelle de Gutzwiller	P. 15
1.c L'approximation de Gutzwiller	P. 16
1.d Le facteur de Gutzwiller	P. 19
B.2 Premières applications au modèle de Hubbard	P. 21
2.a Le modèle de Hubbard paramagnétique	P. 21
2.b La transition de Mott	P. 24
I.C GENERALISATION DE LA METHODE DE GUTZWILLER	
C.1 La formulation de Nozières	P. 27
1.a Au delà d'une méthode variationnelle	P. 27
1.b Les matrices densités partielles	P. 28
1.c Les opérateurs	P. 30
1.d Les facteurs de renormalisation	P. 31
α Les hypothèses de Nozières	P. 31
β Opérateurs dépendant des deux spins	P. 32
γ Opérateurs ne dépendant que d'un spin	P. 33
1.e Approximations physiques	P. 33
C.2 Généralisations	P. 35
2.a Possibilités d'amélioration	P. 35
2.b extension à un état non homogène	P. 36
CONCLUSION	P. 38

REFERENCES	P. 39
II LE MODELE DE HUBBARD DU RESEAU CARRE	
INTRODUCTION	P. 43
II.A MODELISATION DES OXYDES SUPRACONDUCTEURS	
A.1 Les électrons de valence	P. 44
A.2 Le modèle à une bande	P. 47
II.B LE COMPOSE NON DOPE	
B.1 L'approximation de Hartree-Fock	P. 50
1.a Le critère de Stoner	P. 50
1.b La susceptibilité magnétique	P. 52
1.c L'instabilité par rapport à l'antiferromagnétisme	P. 53
B.2 La méthode de Gutzwiller	P. 54
2.a La procédure générale	P. 54
2.b Le facteur de renormalisation	P. 56
2.c Faibles répulsions	P. 57
2.d Répulsion quelconque	P. 58
2.e Résultats numériques	P. 61
II.C LE COMPOSE DOPE	
C.1 L'antiferromagnétisme	P. 64
1.a l'approximation de Hartree-Fock	P. 64
1.b Principe du calcul	P. 65
1.c Résultats	P. 66
1.d Interprétation	P. 71
C.2 Autres formes plus complexes de magnétisme	P. 72
2.a Le ferrimagnétisme de Penn	P. 72
2.b L'onde statique de spin incommensurable	P. 73
2.c Les solitons	P. 73
2.d Les spin bags	P. 75
2.e La séparation de phases	P. 76
CONCLUSION	P. 80
APPENDICE	P. 82
REFERENCES	P. 86

III LE MODELE A DEUX BANDES DU PLAN CUO₂	
INTRODUCTION	P. 91
III.A LE MODELE A DEUX BANDES	
A.1 l'hamiltonien	P. 92
A.2 Les paramètres du modèle	P. 93
2.a La transformation électron-trou	P. 93
2.b Estimations des paramètres	P. 94
2.c L'hybridation cuivre-oxygène	P. 96
III.B LE COMPOSE PARAMAGNETIQUE	
B.1 Le composé non dopé	P. 99
1.a Le transfert de charge	P. 99
1.b L'énergie totale	P.100
1.c La limite covalente	P.100
1.d La transition métal-isolant	P.102
B.2 Le composé dopé	P.104
2.a Propriétés	P.104
2.b Généralisation des sous-bandes de Hubbard	P.107
2.c Effet de l'interaction en dehors des sites de cuivre	P.109
III.C LE COMPOSE ANTIFERROMAGNETIQUE	
C.1 Le composé non dopé	P.110
1.a La méthode de Hartree-Fock	P.110
1.b La méthode de Gutzwiller	P.110
1.c La limite covalente	P.113
1.d Ionicité quelconque	P.115
C.2 Le composé dopé	P.118
2.a Effet de la covalence sur l'antiferromagnétisme	P.118
2.a α La susceptibilité	P.118
2.a β Les corrélations antiferromagnétiques	P.118
2.b Evolution des propriétés avec le dopage	P.122
2.c Effet de l'interaction en dehors des sites de cuivre	P.124
CONCLUSION	P.125
APPENDICE	P.128
REFERENCES	P.131

IV LES FORTES CORRELATIONS

INTRODUCTION	P.137
IV.A LE MODELE t-J ET LES PHASES A FLUX	
A.1 Le modèle de Hubbard fortement corrélé	P.139
1.a cas d'une très forte répulsion	P.139
1.b Le modèle t-J	P.140
A.2 Le fondamental de l'hamiltonien t-J	P.142
2.a L'ordre antiferromagnétique	P.142
2.b Choix d'une fonction d'onde	P.143
2.c Les phases à flux	P.144
IV.B STRUCTURE ELECTRONIQUE SOUS CHAMP MAGNETIQUE	
Introduction	P.146
B.1 Electrons libres à deux dimensions	P.147
B.2 Electrons de Bloch à deux dimensions	P.150
2.a Electrons presque libres	P.150
2.b Electrons fortement liés	P.152
2.c Origine des gaps dans la structure de bande	P.154
2.d Le réseau carré	P.158
d.α Le diagramme d'Hofstadter	P.158
d.β Densité d'états et états propres	P.159
B.3 Electrons à trois dimensions	P.160
IV.C DIAMAGNETISME DE LANDAU SUR RESEAU	
Introduction	P.162
C.1 Electrons à 2 dimension	P.163
1.a Electrons libres	P.163
1.b Le réseau carré	P.164
b.α Conséquence des gaps	P.164
b.β La conjecture de Wiegmann	P.167
b.γ Calcul de l'énergie cinétique	P.168
b.δ Résultats	P.169
1.c Autres réseaux	P.171

C.2 électrons à 3 dimension	P.171
2.a Position du problème	P.171
2.b Faible couplage interplan	P.173
2.c Fort couplage interplan	P.174
2.d Couplage quelconque	P.177
d.α Calculs numériques	P.177
d.β Résultat	P.177
IV.D STABILITE DES PHASES A FLUX UNIFORMES	
Introduction	P.181
D.1 Energie moyenne d'une phase à flux	P.182
D.2 Une approche variationnelle	P.186
2.a Linéarisation de l'espace variationnel	P.186
2.b L'hamiltonien effectif	P.187
D.3 La stabilité des phases à flux	P.190
3.a Le composé non dopé	P.190
3.b Le composé dopé	P.192
CONCLUSION	P.196
REFERENCES	P.198
CONCLUSION GENERALE	P.203

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Malgré un nombre important d'investigations expérimentales et une prolifération de théories proposées, l'origine de la supraconductivité dans les nouveaux matériaux découverts par Bednorz et Müller, n'est toujours pas comprise. Cette situation conduit à prendre un certain recul : il paraît intéressant de bien comprendre les propriétés électroniques de ces composés indépendamment du phénomène de supraconductivité.

Ces nouveaux matériaux sont des oxydes dont la structure cristallographique présente un point commun à tous : c'est une superposition de plans "CuO₂". Pour fixer les idées, nous limiterons la discussion à la famille de composés de formule chimique : La_{2-x}Sr_xCuO₄. Ces composés dérivent tous d'un même cristal de base : La₂CuO₄, dans lequel, une fraction des atomes de lanthane ont été substitués par des atomes de strontium. La fraction, x, d'atomes substitués est le "dopage" du composé. Une demi-maille primitive du cristal de La₂CuO₄ est représentée sur la figure 0.1.

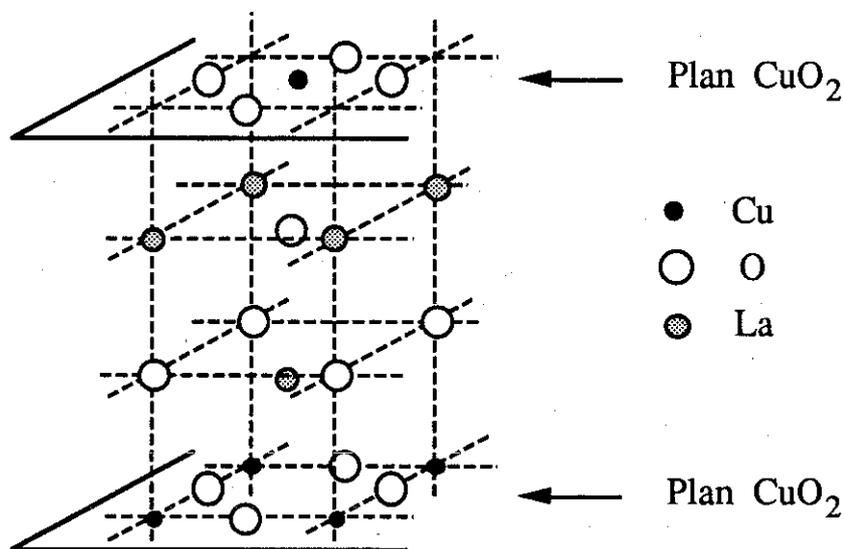


Figure 0.1 : Demi-maille primitive du composé La₂CuO₄. (Une maille primitive s'obtient en complétant par symétrie par rapport à l'un des plans CuO₂).

Les principales propriétés électroniques de ces composés, en fonction du dopage et de la température sont schématisées sur la figure 0.2. Le composé non dopé, La_2CuO_4 , ($x=0$) présente un ordre antiferromagnétique à longue distance : les ions de cuivre possèdent un moment moyen alterné d'environ $0.5\mu_B$. Cet ordre disparaît rapidement avec le dopage pour laisser place, aux environs de $x=5\%$, à la phase supraconductrice. Cependant, même à dopage élevé ($x>5\%$), il semble persister d'importantes corrélations antiferromagnétiques : les moments portés par deux sites de cuivre proches voisins ont tendance à s'aligner antiparallèlement. En outre, le composé non dopé est isolant au-dessus de sa température de Néel tandis qu'à dopage suffisant, il devient métallique.

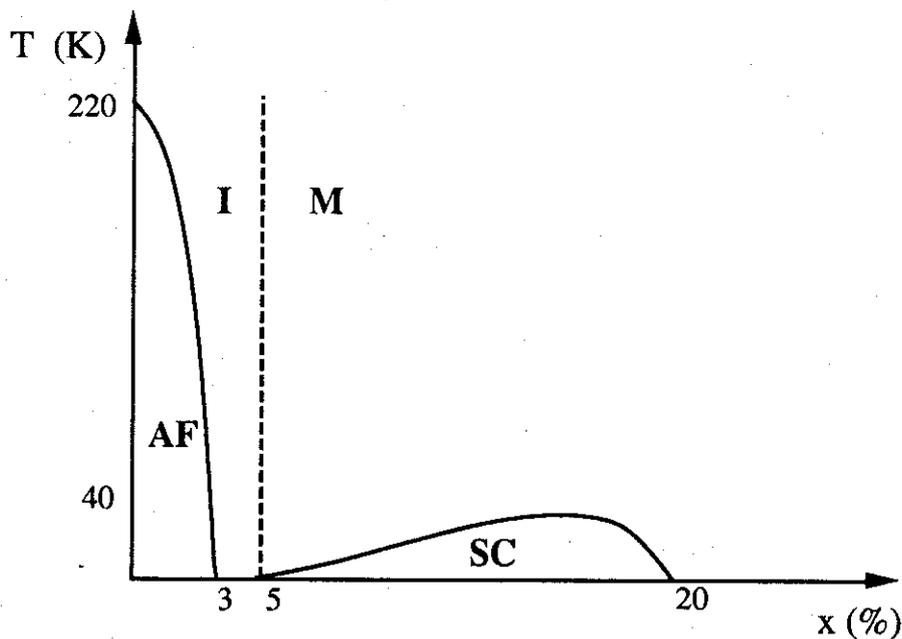


Figure 0.2 : Diagramme de phases simplifié de la famille de composés $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ dans le plan (x,T) . x est le dopage et T est la température. Les valeurs portées sont seulement indicatives. AF : phase antiferromagnétique ; SC : phase supraconductrice ; I : isolant ; M : métal.

La possible coexistence de corrélations antiferromagnétiques et de supraconductivité de ces matériaux a inspiré un certain nombre de théories, invoquant l'antiferromagnétisme afin d'expliquer la supraconductivité. D'où l'intérêt qu'il y a à bien comprendre l'antiferromagnétisme dans ces composés. Dans ce mémoire, nous ne nous intéressons pas à la supraconductivité mais seulement à l'antiferromagnétisme dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Notre préoccupation principale est de vérifier, dans le cadre de modèles simples, si l'on prévoit de l'antiferromagnétisme, quelle est sa nature et comment il évolue avec le dopage.

Les modèles que nous utilisons constituent une simplification extrême du problème si l'on pense à la complexité des matériaux réels. Ils ont été néanmoins introduits à la suite de tout un ensemble de travaux expérimentaux et de calculs de structure de bande. Tous ces modèles consistent à ne considérer que certains électrons de valence localisés dans un plan CuO_2 . De plus, le réseau ionique est supposé fixe. Les théories de la supraconductivité basées sur ces modèles ne prennent donc pas en compte l'interaction des électrons avec les vibrations du réseau, contrairement à la théorie B.C.S. expliquant la supraconductivité classique. De plus, nous faisons l'approximation des liaisons fortes.

En fin de compte, l'étude du composé réel est ramenée à celle d'un système de fermions de spins $1/2$ (les électrons), libres de se déplacer sur un réseau bi-dimensionnel et interagissant électrostatiquement. On voit donc que l'objet de notre étude dépasse largement le cadre de l'antiferromagnétisme dans les oxydes supraconducteurs à haute température critique. Les conséquences de la répulsion coulombienne, au premier rang desquelles, figure le magnétisme, constituent donc notre centre d'intérêt sous-jacent.

Nous nous intéressons aux propriétés du système à basse température. Pour simplifier, on peut supposer la température nulle : le système est décrit par son état fondamental. Même ainsi simplifié, le problème est très loin d'être exactement soluble. Bien qu'elle ne soit justifiée que dans la limite où l'énergie d'interaction entre les électrons est faible devant leur énergie cinétique, l'approximation de Hartree-Fock a pourtant eu un succès considérable en physique du solide. Elle s'avère toutefois nettement insuffisante pour rendre compte de certains phénomènes. Il semble fort que ce soit le cas en ce qui concerne certaines propriétés des nouveaux supraconducteurs.

Dans un premier chapitre, nous présentons une méthode de type "variationnel" qui permet d'aller au-delà de l'approximation de Hartree-Fock : la méthode de Gutzwiller. Après avoir rappelé l'idée originale de Gutzwiller, nous adoptons une approche due à Nozières qui nous permet d'étendre le domaine d'application usuel de la méthode de Gutzwiller à des états pouvant, en particulier, présenter un ordre antiferromagnétique.

Au cours des chapitres suivant, cette méthode est appliquée au modèle de Hubbard du réseau carré et au modèle de Hubbard étendu au réseau " CuO_2 ", afin d'étudier l'antiferromagnétisme dans les oxydes supraconducteurs.

Dans les chapitres II et III, nous adoptons le point de vue du magnétisme itinérant généralement justifié dans le cas où l'énergie d'interaction coulombienne entre les électrons est très inférieure à leur énergie cinétique. Cependant, l'utilisation de la méthode de Gutzwiller permet d'envisager le cas où ces deux énergies sont du même ordre de grandeur.

Afin d'étudier l'antiferromagnétisme dans le composé non dopé, et la possibilité de corrélations antiferromagnétiques dans le composé dopé, nous adoptons une "fonction d'onde" d'essai pouvant présenter un ordre antiferromagnétique. Dans le chapitre II, nous dégageons une bonne partie de la physique en nous plaçant dans le cadre du modèle de Hubbard simple qui ne considère qu'un réseau carré de sites de cuivre. Dans le chapitre III, nous adoptons un modèle a priori plus réaliste qui prend en compte les sites d'oxygène d'un plan CuO_2 au même titre que les sites de cuivre (le modèle à deux bandes). Cela nous permet d'étudier l'effet de la covalence cuivre-oxygène sur l'antiferromagnétisme et de tirer des conclusions plus précises concernant l'antiferromagnétisme et les paramètres du modèle.

Au chapitre IV, nous adoptons, au contraire, le point de vue du magnétisme localisé justifié lorsque l'énergie d'interaction coulombienne entre électrons est très supérieure à leur énergie cinétique.

Plus précisément, nous décrivons le système à l'aide du modèle t-J qui consiste à prendre en compte simultanément la possibilité de mouvement des électrons dans le composé dopé et un couplage de type Heisenberg entre les spins des sites premiers voisins. Nous examinons une forme particulière de l'état du système qui présente des corrélations antiferromagnétiques à courte distance et qui a été proposée récemment comme pouvant expliquer certaines propriétés supraconductrices. Ce type de fonction d'onde, appelée "phase à flux", s'obtient à partir de la fonction d'onde du gaz d'électrons indépendants en présence d'un champ magnétique fictif. Ce dernier point nous amènera à nous intéresser au problème du diamagnétisme de Landau en présence d'un potentiel cristallin avant d'étudier la stabilité des différentes phases à flux uniformes en fonction du dopage.

CHAPITRE I

LA METHODE DE GUTZWILLER

PLAN DU CHAPITRE I

INTRODUCTION

I.A RUDIMENTS

A.1 Le formalisme des liaisons fortes

1.a L'espace quantique

1.b Quelques opérateurs

A.2 L'hamiltonien de Hubbard

I.B APPROCHE DE GUTZWILLER ET PREMIERES APPLICATIONS

B.1 Le calcul de Gutzwiller

1.a Au delà de l'approximation de Hartree-Fock

1.b La fonction d'onde variationnelle de Gutzwiller

1.c L'approximation de Gutzwiller

1.d Le facteur de Gutzwiller

B.2 Premières applications au modèle de Hubbard

2.a Le modèle de Hubbard paramagnétique

2.b La transition de Mott

I.C GENERALISATION DE LA METHODE DE GUTZWILLER

C.1 La formulation de Nozières

1.a Au delà d'une méthode variationnelle

1.b Les matrices densités partielles

1.c Les opérateurs

1.d Les facteurs de renormalisation

α Les hypothèses de Nozières

β Opérateurs dépendant des deux spins

γ Opérateurs ne dépendant que d'un spin

1.e Approximations physiques

C.2 Généralisations

2.a Possibilités d'amélioration

2.b extension à un état non homogène

CONCLUSION

INTRODUCTION

Afin de traiter le problème d'un grand nombre d'électrons en interaction, on fait souvent l'hypothèse que les électrons se déplacent indépendamment les uns des autres (approximation de Hartree-Fock). Cela ne signifie pas que l'effet de l'interaction soit ne soit pas pris en compte. Le mouvement d'un électron est influencé par l'ensemble des autres mais dépend seulement de là où ils sont en moyenne et non pas de là où ils sont réellement à un instant donné.

Le défaut principal de cette approche est de surestimer, dans l'état paramagnétique, la probabilité qu'ont deux électrons d'être très proches l'un de l'autre. On s'attend, en effet, à ce que la répulsion coulombienne diminue cette probabilité. Cela est particulièrement vrai pour 2 électrons de spins opposés, car, dans le cas contraire, cette probabilité est déjà réduite par la statistique de Fermi (principe de Pauli).

L'esprit de la méthode de Gutzwiller est d'élargir l'espace variationnel de Hartree-Fock de façon à abaisser cette probabilité.

Dans une première partie, nous introduisons succinctement le formalisme nécessaire et le modèle de Hubbard.

Dans une seconde partie, nous présentons l'idée originale de Gutzwiller et nous montrons ce qu'elle permet de dire du gaz d'électrons paramagnétique sur un réseau carré.

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous adoptons une approche différente de celle de Gutzwiller, due à Nozières. Cette approche nous permet de mettre en évidence les approximations physiques qui sont faites dans la méthode de Gutzwiller et de généraliser le résultat de Gutzwiller au cas d'un état inhomogène (où la densité locale d'électrons d'un spin donné peut varier spatialement).

I.A RUDIMENTS

A.1 Le formalisme des liaisons fortes

1.a L'espace quantique

Comme nous l'avons dit dans l'introduction générale, les propriétés physiques qui nous intéressent sont essentiellement dues à quelques électrons du cristal (c'est du moins l'hypothèse que l'on fait). L'espace quantique dans lequel nous travaillons est l'espace décrit par l'ensemble des variables de spin et de position de ces électrons.

Un électron a deux états de spin possibles (spin orienté vers le haut ou vers le bas). Il est, en outre, décrit par sa fonction d'onde qui donne sa probabilité de présence en tout point de l'espace. Dans un solide, les électrons de plus basse énergie sont localisés au voisinage des noyaux. A l'inverse, un électron presque libre (électron de valence dans un métal normal) a une probabilité de présence pratiquement uniforme dans tout l'échantillon. Les électrons auxquels nous nous intéressons sont dans une situation intermédiaire. Ils peuvent se déplacer dans tout l'échantillon mais se trouvent beaucoup plus souvent au voisinage d'un noyau qu'à mi-chemin entre deux noyaux.

Tout naturellement, nous faisons l'approximation des liaisons fortes. De plus, les modèles que nous adopterons ne prennent en compte qu'une orbitale par atome. Ainsi, à chaque ion du cristal pris en compte par le modèle, est associée une fonction d'onde localisée au voisinage de son noyau (une orbitale atomique ou une fonction de Wannier) et l'on suppose que la fonction d'onde d'un électron est une superposition de ces fonctions d'ondes locales. On remplace ainsi le continuum spatial par un réseau de "sites" correspondant aux ions du cristal modèle.

L'objet de notre étude n'est pas un électron isolé mais un très grand nombre d'électrons en interaction. Un état spatial instantané du système est une répartition quelconque de N électrons sur les L sites de l'échantillon chaque électron étant muni de son spin. A cause du principe de Pauli, il ne peut y avoir plus d'un électron de même spin par site. Nous appellerons un tel état spatial une "configuration". La figure A.1 illustre un

tel état. Soit N^σ , le nombre total d'électrons de spin σ dans notre système. On vérifie aisément que le nombre total, \mathcal{N} , de configurations est donné par :

$$\mathcal{N} = \binom{L}{N^\uparrow} \binom{L}{N^\downarrow} \quad \text{avec} \quad \binom{L}{N} = \frac{L!}{N! (L-N)!} \quad [\text{A.1}]$$

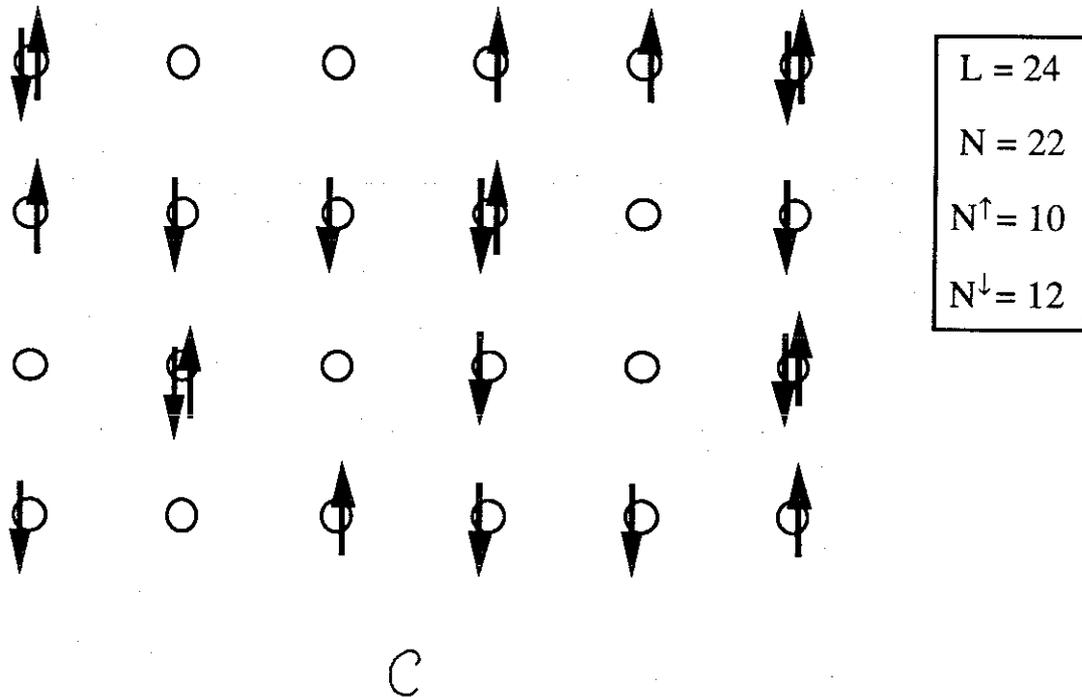


Figure A.1 : Exemple de configuration électronique sur un réseau carré de 24 sites.

Un état quelconque du système est une superposition de configurations. Il peut être représenté par sa fonction d'onde $\Psi_{(C)}$ où C désigne une configuration quelconque. L'espace quantique est un espace vectoriel de dimension \mathcal{N} (\mathcal{N} est donné en [A.1]).

1.b Quelques opérateurs

Les électrons sont des fermions. Tous les opérateurs peuvent s'écrire à l'aide des opérateurs création et annihilation d'un spin σ sur le site i , $C_{i\sigma}^+$ et $C_{i\sigma}$ qui vérifient les relations d'anticommuation propres à la statistique de Fermi. Il est commode de définir un certain nombre d'opérateurs élémentaires. $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma}$ est l'opérateur diagonal sur la base des configurations dont la valeur propre pour une configuration est égale à 1 si le site i est occupé par un électron de spin σ et est égale à 0 dans le cas contraire. De

même, l'opérateur, $d_i = n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, est l'opérateur diagonal dont la valeur propre est 1 si le site i est doublement occupé par deux électrons (qui sont alors nécessairement de spins opposés) et 0 sinon. On peut aussi définir l'opérateur diagonal D dont la valeur propre pour une configuration est le nombre de sites doublement occupés qu'elle comporte :

$$D = \sum_j d_j \quad [A.2]$$

La sommation dans [A.2] porte sur tous les sites du réseau. Enfin, nous noterons, $\chi_{ij\sigma} = C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma}$ l'"opérateur de saut" qui fait sauter un électron de spin σ du site j vers le site i .

Si les ions correspondant aux différents sites ont des niveaux atomiques différents, l'"énergie potentielle" est représentée par l'opérateur :

$$H_p = \sum_{j,\sigma} \varepsilon_j n_{j\sigma} \quad [A.3]$$

où la sommation porte sur tous les sites j et les spins σ . ε_j est l'"énergie de site" du site j . Si les électrons peuvent sauter d'un site à l'autre, l'"énergie cinétique" est représentée par l'opérateur :

$$H_c = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \chi_{ij\sigma} \quad [A.4]$$

où la sommation porte sur tous les couples de sites et où t_{ij} est l'"intégrale de saut" du site j vers le site i .

A.2 L'hamiltonien de Hubbard

Afin de modéliser l'interaction coulombienne des électrons, une approximation due à Hubbard consiste à ne prendre en compte l'énergie d'interaction entre deux électrons que lorsqu'ils se trouvent sur le même site / Hubbard 63 /. Cette approximation peut paraître surprenante quand on sait que la répulsion coulombienne est une interaction à longue portée. Elle se comprend néanmoins, si l'on sait que le potentiel électrostatique dû à un électron a tendance à être fortement écranté par la réponse des autres électrons. Si l'on fait l'"approximation de Hubbard", l'opérateur traduisant l'interaction coulombienne s'écrit donc :

$$H_i = \sum_j U_j d_j \quad [A.5]$$

où U_j est l'énergie d'interaction électrostatique entre deux électrons occupant simultanément le site j . Notons, que dans ce modèle, à cause du principe de Pauli, seuls les électrons de spins opposés interagissent.

Une modélisation très simple pour étudier l'interaction coulombienne d'électrons fortement liés dans un réseau à deux dimensions consiste à placer les électrons sur un réseau carré où tout les sites sont équivalents ($\epsilon_i=0$) avec une intégrale de saut entre sites premiers voisins seulement et à faire l'approximation de Hubbard. On obtient ainsi l'hamiltonien de Hubbard, somme d'un terme cinétique, H_c et d'un terme d'interaction, H_i :

$$H = H_c + H_i = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \chi_{ij}^\sigma + \chi_{ji}^\sigma + U \sum_j d_j \quad [A.6]$$

La notation $\langle ij \rangle$ signifie que l'on somme sur les paires de sites premiers voisins. Notons que cet hamiltonien ne dépend que de deux paramètres, t et U , caractérisant respectivement la mobilité des électrons et leur répulsion mutuelle.

Pour un réseau quelconque, on peut décrire le système par l'"hamiltonien de Hubbard étendu" :

$$\begin{aligned} H &= H_c + H_p + H_i \\ &= \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \chi_{ij}^\sigma + \sum_{j,\sigma} \epsilon_j n_{j\sigma} + \sum_j U_j d_j \end{aligned} \quad [A.7]$$

où t_{ij} est l'intégrale de saut du site i vers le site j , ϵ_j est l'énergie de site du site j et U_j est la répulsion coulombienne sur le site j .

Dans ce qui suit, nous nous intéressons à l'état fondamental de l'hamiltonien de Hubbard simple donné en [A.6].

I.B APPROCHE DE GUTZWILLER ET PREMIERES APPLICATIONS

B.1 Le calcul de Gutzwiller

1.a Au delà de l'approximation de Hartree-Fock

Dans le cas général, l'état fondamental de l'hamiltonien de Hubbard n'est pas connu exactement. Afin de se faire une idée de cet état, on est réduit à adopter des méthodes d'approximation. Parmi celles-ci, on trouve les méthodes variationnelles. Il s'agit de trouver une forme de fonction d'onde dans laquelle la valeur moyenne de l'hamiltonien de Hubbard est la plus faible possible.

Le terme cinétique, H_c , de l'hamiltonien de Hubbard (voir [A.6]) est un hamiltonien de particules indépendantes (il ne déplace qu'un électron à la fois). Un état propre pour un tel opérateur ou "état de particules indépendantes" s'obtient en résolvant un problème à un corps ce qui est une des rares choses que l'on sache faire à peu près bien. Dans la limite où le paramètre de répulsion coulombienne, U , est faible, l'hamiltonien de Hubbard tend donc vers un hamiltonien de particules indépendantes. D'où la méthode de Hartree-Fock qui consiste à adopter comme état variationnel un état de particules indépendantes.

Un tel état peut toujours être vu comme le fondamental d'un hamiltonien de particules indépendantes effectif, H_v . Puisque l'on ne considère qu'une orbitale par site, la diagonalisation du problème à un corps correspondant donne, au total, $2L$ états à une particule. Ceux-ci sont généralement répartis en une bande d'énergie. Le "remplissage" de la bande, $n=N/L$, est donc compris entre 0 et 2.

Notons qu'en général, l'hamiltonien effectif diffère du terme cinétique, H_c . L'état de Hartree-Fock prend donc en compte l'interaction coulombienne d'une certaine façon. Cependant, dans un tel état, les électrons de spins opposés sont indépendants. Or, on s'attend à ce que leurs mouvements soient corrélés puisqu'ils se repoussent.

1.b La fonction d'onde variationnelle de Gutzwiller

L'espace variationnel de Hartree-Fock est bien adapté à la minimisation du terme cinétique mais pas à la minimisation du terme d'interaction. Si l'on raisonne dans l'espace des configurations, le terme d'interaction équivaut à un "potentiel" dont la valeur en une configuration, C , croît avec le nombre de sites doublement occupés, $D(C)$, qu'elle comporte :

$$H_I |C\rangle = U D(C) |C\rangle \quad [B.3]$$

Il paraît donc souhaitable de diminuer le poids de la fonction d'onde variationnelle sur les configurations comportant beaucoup de sites doublement occupés.

Gutzwiller a proposé d'adopter une fonction d'onde de la forme :

$$\Psi_{(C)} = \eta^{D(C)} \Psi_{0(C)} \quad [B.4]$$

où $\Psi_{0(C)}$ est une fonction d'onde de particules indépendantes et où η est un paramètre variationnel compris entre 0 et 1 / Gutzwiller 63 /. La fonction d'onde $\Psi_{(C)}$, appelée "fonction d'onde de gutzwiller" a un poids d'autant plus faible sur la configuration C que $D(C)$ est élevé et que η est faible.

Lorsque, U/t tend vers l'infini, on s'attend à minimiser l'énergie pour $\eta \equiv 0$. Dans ce cas, l'opérateur de Gutzwiller, η^D , tend vers le projecteur sur l'espace des configurations pour lesquelles le nombre de sites doublement occupés est minimum (soit : $D=0$ pour $N < L/2$). Dans le cas opposé où U est nul, l'espace variationnel permet bien de retrouver un état de particules indépendantes ($\eta=1$). L'espace variationnel de Gutzwiller est donc un élargissement de l'espace variationnel de Hartree-Fock. Le paramètre supplémentaire, η , permettant de prendre en compte les corrélations coulombiennes.

Reste maintenant à calculer la valeur moyenne de l'hamiltonien de Hubbard dans l'état de Gutzwiller. Dans ce but, Metzner et Volhardt ont développé une méthode diagrammatique / Metzner & Volhardt 87 /. Ils sont ainsi parvenu à calculer exactement l'énergie moyenne dans l'état de Gutzwiller lorsque le réseau est une chaîne à une dimension. Cette approche reste très lourde et il n'y a pas de résultats exact lorsque la dimension est finie et strictement supérieure à 1. On peut néanmoins faire des calculs par des méthodes de type "Monte Carlo" / Yokoyama & Shiba 87 ; Zhang & al. 88 /.

1.c L'approximation de Gutzwiller

D'une façon générale, il est difficile de calculer la valeur moyenne d'un opérateur, A , dans l'état de Gutzwiller. Par contre, sa valeur moyenne dans l'état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$, s'obtient aisément par les techniques de calcul de bande. Il suffirait donc d'estimer le rapport :

$$g_A = \frac{\langle A \rangle}{\langle A \rangle_0} \quad [\text{B.5}]$$

où $\langle A \rangle$ est la valeur moyenne de A dans l'état de Gutzwiller, $|\Psi\rangle$, et $\langle A \rangle_0$ est sa valeur moyenne dans l'état de particules indépendantes $|\Psi_0\rangle$ (donné par [B.4]). Ce rapport est le "facteur de renormalisation" pour l'opérateur A .

Cette estimation reste très difficile à cause de la complexité de la fonction d'onde de particules indépendantes qui présente des corrélations d'échange entre électrons de même spin dues à la statistique de Fermi. Afin d'estimer simplement ce facteur de renormalisation, Gutzwiller a eu l'idée de faire comme si ces corrélations n'existaient pas. De plus, il s'est limité au cas où la fonction d'onde de particules indépendantes est un état "homogène" c'est-à-dire tel que les électrons sont répartis uniformément sur tous les sites ($\langle n_{i\sigma} \rangle_0 = N^\sigma/L$). La fonction d'onde $\Psi_{0(C)}$ peut donc être prise constante en module. On est alors ramené à de simples problèmes de dénombrement. C'est l'approximation de Gutzwiller / Gutzwiller 66 ; Ogawa 75 /.

A titre d'exemple, faisons le calcul de Gutzwiller pour l'opérateur de saut χ_{ij}^\uparrow . Si l'on suppose constante la fonction d'onde $\Psi_{0(C)}$, il vient :

$$|\Psi_{0(C)}|^2 = \frac{1}{\mathcal{N}} \quad [\text{B.6}]$$

où \mathcal{N} est le nombre total de configurations donné en [A.1]. La valeur moyenne de l'opérateur de saut χ_{ij}^\uparrow dans l'état $|\Psi_0\rangle$ s'écrit :

$$\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle_0 = \langle \Psi_0 | \chi_{ij}^\uparrow | \Psi_0 \rangle = \sum_{C, C'} \Psi_{0(C)} \Psi_{0(C')}^* \langle C' | \chi_{ij}^\uparrow | C \rangle \quad [\text{B.8}]$$

Les seuls éléments de matrice $\langle C' | \chi_{ij}^\uparrow | C \rangle$ non nuls sont ceux pour lesquels, dans la configuration C , le site j est occupé par un électron de spin vers le haut tandis qu'il n'y en

a pas sur le site i et la configuration C' se déduit de la configuration C par déplacement de cet électron de j vers i . Le nombre de termes non nuls dans la somme de [B.8] est donc :

$$\mathcal{N}_{i\uparrow} = \binom{L-2}{N\uparrow-1} \binom{L}{N\downarrow} \quad [\text{B.9}]$$

Il vient donc (d'après [B.6] et [B.8]) :

$$\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle_0 = \frac{\mathcal{N}_{i\uparrow}}{\mathcal{N}} \langle\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle\rangle \quad [\text{B.10}]$$

où $\langle\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle\rangle$ est la valeur moyenne des éléments de matrice non nuls $\langle C' | \chi_{ij}^\uparrow | C \rangle$. Ces éléments de matrice peuvent valoir -1 ou 1 et la valeur d'un élément de matrice particulier dépend de la convention de signe adoptée lors de l'antisymétrisation propre à la statistique de Fermi. La valeur moyenne $\langle\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle\rangle$ ne dépend que de l'ensemble des configurations des spins vers le haut.

Estimons, maintenant, la valeur moyenne de χ_{ij}^\uparrow dans l'état de Gutzwiller. Pour simplifier, supposons que le nombre d'électrons, N , soit inférieur à $L/2$ et plaçons nous dans la limite des très fortes répulsions ($\eta \rightarrow 0$). Il suffit de faire les mêmes dénombrements que précédemment en se rappelant que, cette fois, les doubles occupations de site (par deux électrons de spin opposé) sont interdites. Le nombre de configurations permises est :

$$\mathcal{N}^\infty = \binom{L}{N\uparrow} \binom{L-N\uparrow}{N\downarrow} \quad [\text{B.11}]$$

La fonction de Gutzwiller vérifie :

$$|\Psi_{(C)}|^2 = \frac{1}{\mathcal{N}^\infty} \quad [\text{B.12}]$$

On vérifie aisément que le nombre de termes non nuls dans l'expression de la valeur moyenne de l'opérateur de saut $\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle$ dans l'état de Gutzwiller est :

$$\mathcal{N}_{i\uparrow}^\infty = \binom{L-2}{N\uparrow-1} \binom{L-N\uparrow-1}{N\downarrow} \quad [\text{B.13}]$$

et :

$$\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle = \frac{\mathcal{N}_{i\uparrow}^\infty}{\mathcal{N}^\infty} \langle\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle\rangle \quad [\text{B.14}]$$

Le rapport des expressions [B.14] et [B.10] donne une estimation du facteur de renormalisation de l'énergie cinétique :

$$g_t = \frac{\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle}{\langle \chi_{ij}^\uparrow \rangle_0} = \frac{N_{i\uparrow}^\infty N}{N^\infty N_{i\uparrow}}$$

$$g_t = \frac{1-n}{1-n^\uparrow} \quad \text{avec} \quad n=N/L \text{ et } n^\uparrow=N^\uparrow/L \quad [\text{B.15}]$$

L'expression [B.15] a été utilisée par plusieurs auteurs / Rice & Ueda 86 ; Zhang & al. 87 /.

On vérifie que g_t est plus petit que 1 et s'annule lorsqu'il y a un électron par site ($n=1$). L'énergie cinétique est donc réduite par les corrélations et s'annule pour la bande demi-pleine. Ce résultat est physiquement satisfaisant car, en interdisant les doubles occupations de site, on réduit les possibilités de mouvement des électrons et, lorsqu'il y a un électron par site, tous les sites sont occupés, les électrons ne peuvent donc plus bouger.

Lorsque la valeur de U est finie, le facteur de renormalisation peut être estimé en faisant des dénombrements comme nous l'avons fait pour le cas où U tend vers l'infini. Les formules obtenues se simplifient dans la limite thermodynamique ($L, N^\uparrow, N^\downarrow \gg 1$). Dans cette limite, seules les configurations comprenant un certain nombre de sites doublement occupés, D_m , ont un poids significatif. La valeur moyenne de l'opérateur d_i , $d = \langle d_i \rangle = D_m/L$, est reliée au paramètre η (défini en [B.4]) par :

$$\eta^2 = \frac{d(1-n+d)}{(n^\uparrow-d)(n^\downarrow-d)} \quad [\text{B.16}]$$

Pour un opérateur donné, A , le facteur de renormalisation obtenu dépend de l'état de Gutzwiller et donc de η . η peut être éliminé grâce à l'équation [B.16] et l'on obtient une expression de g_A qui ne dépend que des valeurs moyennes élémentaires que sont n^\uparrow , n^\downarrow et d . Notons que la géométrie du système n'apparaît pas dans le facteur de renormalisation lorsque l'on fait l'approximation de Gutzwiller.

1.d Le facteur de Gutzwiller

L'expression ainsi obtenue pour le facteur de renormalisation de l'opérateur de saut χ_{ij}^σ et donc, pour l'énergie cinétique, H_c , est :

$$g_{t\sigma} = \frac{(\sqrt{(1-n+d)(n^\sigma-d)} + \sqrt{d(n^\sigma-d)})^2}{n^\sigma(1-n^\sigma)} \quad [\text{B.17}]$$

$g_{t\sigma}$ est souvent appelé "facteur de Gutzwiller". L'expression [B.17] vérifie la symétrie électron-trou ($n^\sigma \rightarrow 1-n^\sigma$, $d \rightarrow 1-n+d$). On vérifie, en outre, que le facteur de Gutzwiller est toujours inférieur à 1. De plus, il est égal à 1 pour $d=n^\uparrow n^\downarrow$. On retrouve donc bien la méthode de Hartree-Fock lorsque les particules de spins opposés sont indépendantes. Dans la limite inverse où d tend vers zéro, on retrouve l'expression [B.15].

L'allure de la dépendance en d du facteur de Gutzwiller, n^\uparrow et n^\downarrow étant fixés, est portée sur la figure B.1. Du fait de la symétrie électron-trou, on peut se limiter à la bande moins qu'à moitié pleine : $n \leq 1$. De plus, du fait du signe de l'interaction coulombienne ($U > 0$), on peut se limiter à : $0 < d < n^\uparrow n^\downarrow$. $g_{t\sigma}$ est une fonction croissante de d . Elle présente une pente horizontale en $d=n^\uparrow n^\downarrow$. Au voisinage de $d=0$, elle présente un comportement différent selon que la bande est demi-pleine ($n=1$) ou non. Dans le cas où la bande n'est pas demi-pleine, le facteur de Gutzwiller tend vers une valeur non nulle avec une pente infinie tandis que, lorsque la bande est demi-pleine, il s'annule avec une pente finie. Nous verrons plus loin (en 2.a), quelles sont les conséquences de ces propriétés.

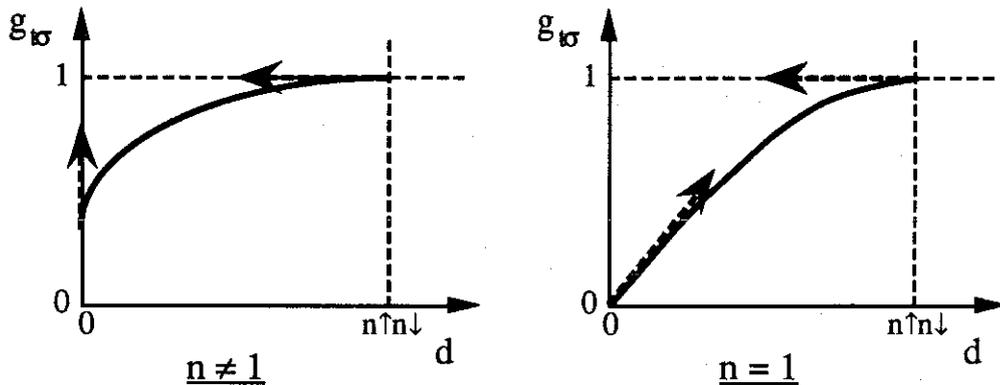


Figure B.1 : Allure de la dépendance du facteur de Gutzwiller, $g_{t\sigma}$, par rapport au facteur de double occupation, d .

Dans l'état de Gutzwiller, on vérifie, pour deux sites i et j quelconques :

$$\begin{aligned} \langle C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} \rangle &= g_{i\sigma} \langle C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} \rangle_0 & \text{si } i \neq j & \quad (C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} = \chi_{ij}^\sigma) \\ \langle C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} \rangle &= \langle C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} \rangle_0 & \text{si } i = j & \quad (C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} = n_{i\sigma}) \end{aligned} \quad [\text{B.18}]$$

Soit $n_{k\sigma}$, l'opérateur densité dans l'espace des k :

$$n_{k\sigma} = C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} \quad ; \quad C_{k\sigma}^+ = \sum_j e^{i k \cdot R_j} C_{j\sigma}^+ \quad [\text{B.19}]$$

Par transformation de Fourier, on déduit aisément de [B.18], la distribution dans l'espace des k , $\langle n_{k\sigma} \rangle$, de l'état de Gutzwiller.

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = g_{i\sigma} (\langle n_{k\sigma} \rangle_0 - n^\sigma) + n^\sigma \quad [\text{B.20}]$$

où $\langle n_{k\sigma} \rangle_0$ est la distribution dans l'espace des k de l'état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$. Dans le cas où $|\Psi_0\rangle$ est le fondamental d'un hamiltonien à une particule qui ne diffère du terme cinétique que par une constante (pouvant dépendre du spin), $\langle n_{k\sigma} \rangle_0$ est nul au-dessus d'une surface de Fermi et vaut 1 en dessous. La distribution $\langle n_{k\sigma} \rangle$ a donc la forme portée sur la figure B.2.

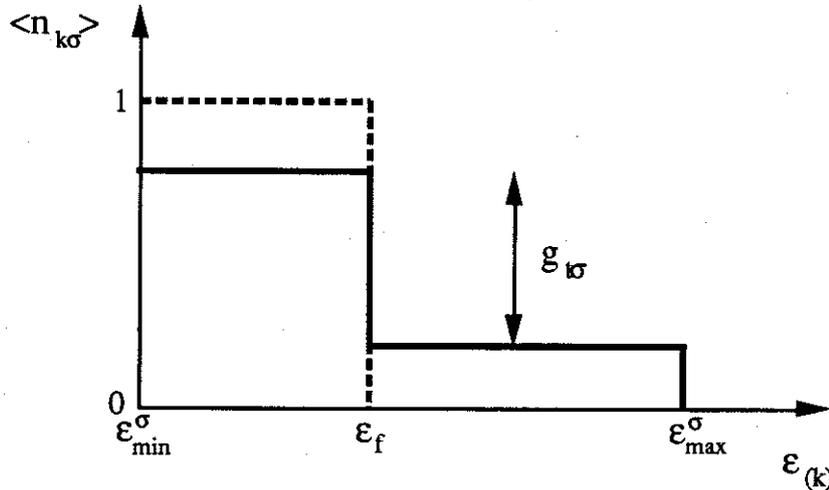


Figure B.2 : Distribution moyenne dans l'espace des k , $\langle n_{k\sigma} \rangle$, pour un état de Gutzwiller d'ondes planes (trait plein) et pour l'état de particules indépendantes correspondant (tirets). $\langle n_{k\sigma} \rangle$ ne dépend que de l'énergie à une particule, $\epsilon(k)$. Nous avons donc porté cette dernière quantité en abscisse.

La surface de Fermi est inchangée sous l'effet des corrélations ce qui est en accord avec le théorème de Luttinger. Ce dernier affirme la conservation du volume englobé sous cette surface / Luttinger 60 /. La discontinuité au niveau de Fermi est réduite de 1 à $g_{t\sigma}$ par les corrélations. Le facteur de renormalisation, $g_{t\sigma}$, prend donc une nouvelle signification physique : c'est la discontinuité de $\langle n_{k\sigma} \rangle$ au niveau de Fermi. On voit donc que tant que $g_{t\sigma}$ est non nul, l'état est conducteur et qu'il est isolant dans le cas contraire.

Dans la théorie de Landau des liquides de Fermi, cette discontinuité est reliée à la renormalisation de la masse des quasiparticules :

$$g_{t\sigma} = m / m^* \quad [B.21]$$

$g_{t\sigma}^{-1}$ est donc l'alourdissement des quasiparticules dû aux corrélations. En fait, on peut montrer que l'approche de Gutzwiller fournit un cadre naturel à la théorie de Landau / Vollhardt 84 ; Nozières 86 /.

B.2 Premières applications au modèle de Hubbard

2.a Le modèle de Hubbard paramagnétique

Dans l'approximation de Gutzwiller, la valeur moyenne de l'hamiltonien de Hubbard dans l'état de Gutzwiller s'écrit donc :

$$\langle H \rangle = g_{t\uparrow} \langle H_{c\uparrow} \rangle_0 + g_{t\downarrow} \langle H_{c\downarrow} \rangle_0 + U L d \quad [B.22]$$

où $g_{t\sigma}$ est donné par [B.17]. Cette expression ne dépend que de l'état $|\Psi_0\rangle$ et du nombre moyen de sites doublement occupés, d . d peut être pris comme paramètre variationnel à la place de η qui n'apparaît plus. La minimisation de [B.22] par rapport à d et aux paramètres variationnels dont dépend éventuellement $|\Psi_0\rangle$ devrait permettre une meilleure estimation des propriétés du fondamental de l'hamiltonien de Hubbard que la méthode de Hartree-Fock.

L'exemple d'application le plus simple de la méthode de Gutzwiller consiste à prendre comme état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$, le fondamental de l'hamiltonien cinétique, H_c . Ainsi, d est notre seul paramètre variationnel. De plus, on a $n^\uparrow = n^\downarrow = n/2$ et l'expression [B.22] se simplifie :

$$\langle H \rangle = g_t \langle H_c \rangle_0 + U L d \quad [\text{B.23}]$$

$g_t = g_{t\uparrow} = g_{t\downarrow}$. Pour une valeur donnée du nombre d'électrons par site, n , la valeur de $\langle H_c \rangle_0$ est fixée et est négative.

La variation de l'énergie totale avec d s'obtient donc aisément en ajoutant au terme cinétique, dont la variation est donnée par celle du facteur de Gutzwiller étudiée plus haut (voir figure B.1), le terme d'interaction qui varie linéairement avec d . La figure B.3a illustre le cas de la bande moins qu'à moitié remplie tandis que les courbes de la figure B.3b correspondent à un cas où la bande est exactement demi-pleine.

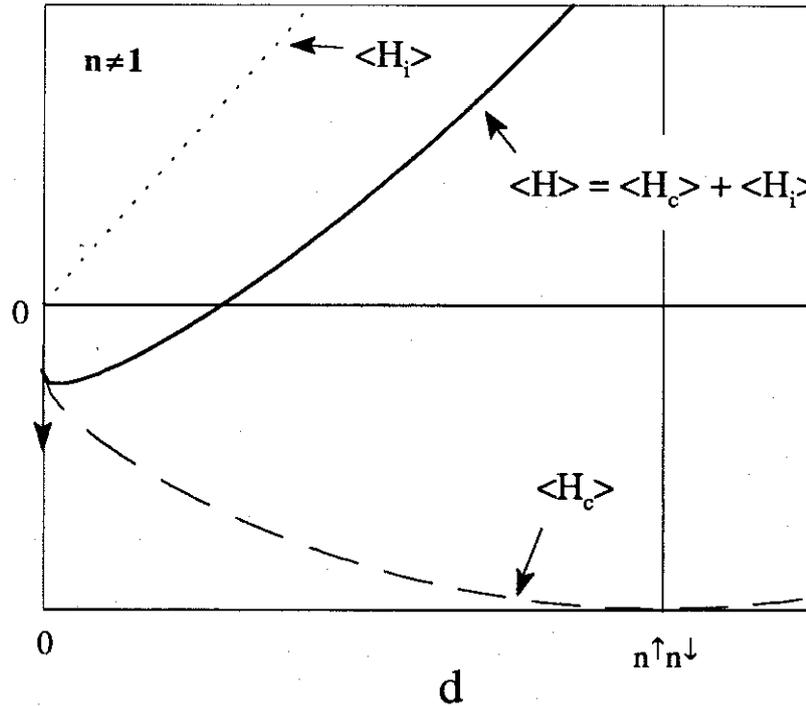


Figure B.3a : Variation de l'énergie cinétique, $\langle H_c \rangle$, de l'énergie d'interaction, $\langle H_i \rangle = Ud$, et de l'énergie totale, $\langle H \rangle$, en fonction de la probabilité de double occupation de site, d . (voir formule [B.23]).

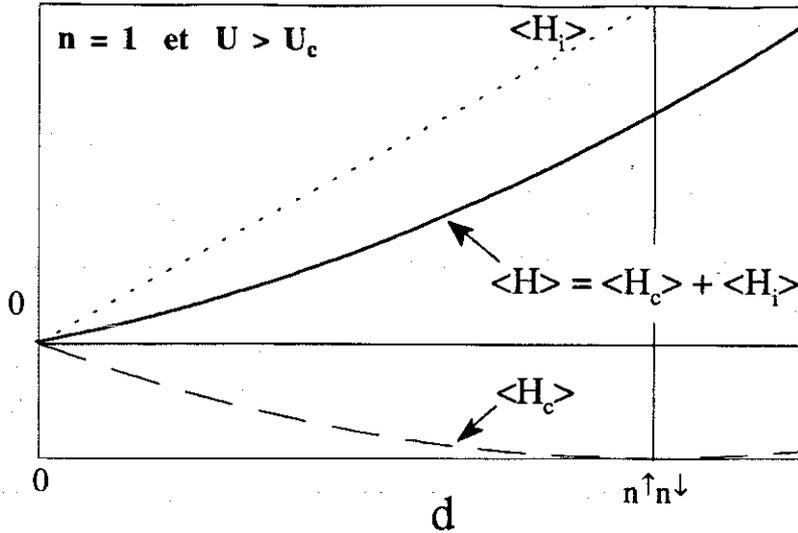


Figure B.3b : Idem que figure B.3a mais dans le cas où la bande est demi-pleine ($n=1$) et où la répulsion coulombienne est supérieure à la valeur critique, U_c , donnée par l'équation [B.24].

De ces figures, on tire immédiatement les conclusions suivantes dans le cadre de notre approximation :

_ Dès que l'interaction coulombienne, U , est différente de 0 et quelque soit la densité d'électrons, l'état fondamental présente des corrélations : $d \langle n^\uparrow n^\downarrow \rangle$ (à cause de la pente nulle de g_t en $d=n^\uparrow n^\downarrow$).

_ Après minimisation par rapport à d (minimum de la courbe en trait plein), l'énergie reste toujours négative ou nulle. Rappelons que, par la méthode de Hartree-Fock, l'énergie obtenue (point d'intersection de la courbe en trait plein avec l'axe $d=n^\uparrow n^\downarrow$) tend vers l'infini lorsque U tend vers l'infini. Cette remarque illustre l'importance de la prise en compte des corrélations électroniques lorsque l'on souhaite étudier l'effet d'une forte répulsion coulombienne.

_ Pour $n \neq 1$, l'énergie et le facteur de Gutzwiller ne sont jamais nuls (à cause de la valeur non nulle de g_t en $d=0$). L'état est donc toujours conducteur. De plus, la probabilité de double occupation n'est jamais nulle (à cause de la pente infinie de g_t en $d=0$).

- Par contre, pour $n=1$, il existe une valeur critique de l'interaction, U_c , au-dessus de laquelle, les doubles occupations sont interdites ($d=0$), le système est isolant ($g_t=0$) et l'énergie cinétique est nulle (à cause de la pente finie de g_t en $d=0$). Cette valeur critique est donnée par :

$$U_c = 8 \langle H_c \rangle_0$$

[B.24]

2.b La transition de Mott

Lorsque la bande est demi-pleine ($n=1$), cette dernière situation où les électrons sont figés sur leurs sites respectifs est celle que l'on attend pour une répulsion, U , infinie : du fait de l'impossibilité de double occupation de site, tous les sites sont occupés et un électron ne peut donc sauter sur un site voisin. Ce qui est remarquable, c'est que l'on trouve cette situation pour des valeurs finies de U . Néanmoins, on s'attend à ce qu'il y ait effectivement une transition métal-isolant de l'état paramagnétique pour une valeur finie de U / Mott 49 /. On sait, en effet, que le système est conducteur pour U tendant vers zéro (car l'état de particules indépendantes paramagnétique est conducteur) et qu'il est isolant pour des valeurs finies suffisamment élevées de U (par la théorie des perturbations). La méthode de Gutzwiller prévoit donc la "transition de Mott".

Cependant, on obtient une probabilité de double occupation nulle ($d=0$), dès que U est supérieur à U_c . Cela est manifestement inexact car on sait (par la théorie des perturbations) que, dans la limite des fortes répulsions, cette probabilité est de l'ordre de $(t/U)^2$ et est donc non nulle. Cette possibilité de mouvement des électrons joue un rôle capital dans l'étude de la limite des très fortes répulsions comme nous le verrons en IV.A. La comparaison avec les résultats exacts a permis d'établir qu'à une dimension, c'est l'approximation de Gutzwiller (et non pas le choix de la fonction d'onde de Gutzwiller) qui est à l'origine de cet artefact / Metzner & Volhardt 87 /. Cette transition brutale propre à la méthode de Gutzwiller a été soulignée pour la première fois par Brinkman et Rice / Brinkman & Rice 70 /.

La transition de Mott peut se comprendre intuitivement. Isolons un électron, et fixons la position des autres. Le déplacement de cet électron sur un site voisin coûte une énergie égale à U (la bande est demi-pleine). Il se trouve donc dans un puits de potentiel de profondeur finie. Or, lorsque sa profondeur est suffisante, un puits de potentiel est à l'origine d'états liés.

Hubbard a essayé de garder cette idée en considérant un nombre quelconque d'électrons dans l'échantillon. Rappelons que, dans le modèle de Hubbard, seuls les électrons de spins opposés interagissent (à cause du principe de Pauli). Fixons les électrons de spin vers le bas dans une configuration donnée. Un électron de spin vers le haut voit alors un potentiel égal à zéro sur les sites vides et égal à U sur les sites occupés. On se trouve donc en présence d'un modèle d'électrons indépendants dans un alliage binaire, la différence, $\Delta\varepsilon$, entre les énergies de site des deux types d'atomes étant égale à U . D'après le théorème de Perron-Frobenius / Bellman 60 /, lorsqu'un alliage est tel que $\Delta\varepsilon$ est supérieur à la largeur de bande en l'absence de potentiel, W , il existe un gap en milieu de bande. Si l'on fait donc l'"analogie d'alliage de Hubbard", on trouve un état isolant lorsque la bande est demi-pleine ($n=1$) et $U > 8t$ (pour le réseau carré). Cependant, il ne faut pas oublier qu'en réalité les électrons de spin vers le bas sont mobiles et interagissent avec les électrons de spin vers le haut.

Dans l'approche de Hubbard, le système devient isolant au voisinage de la bande demi-pleine par raréfaction du nombre de porteurs (trous sous le gap ou électrons au dessus du gap) tandis que, dans l'approche de Gutzwiller, le système devient isolant par divergence de la masse des quasiparticules ($m^*/m = g_t^{-1} \rightarrow \infty$). Les deux approches semblent donc fondamentalement différentes. Néanmoins, comme nous le montrons ci-après que, la méthode de Gutzwiller permet bien de trouver une discontinuité du potentiel chimique (gap) au dessus de la transition de Mott.

Dans un modèle d'électrons indépendants, le niveau de Fermi, ε_f , est le potentiel chimique, μ , du système. Par ailleurs, la densité d'états, ρ , est la compressibilité, $n^2\kappa$, du gaz d'électrons. La fonction $n^2\kappa(\mu)$ est donc, dans le cas d'électrons en interaction, une généralisation de la densité d'états du système d'électrons indépendants. Dans le cas général, le potentiel chimique et la compressibilité sont donnés par les formules :

$$\mu = \frac{\partial \langle H \rangle / L}{\partial n} \quad [\text{B.25}]$$

$$\frac{1}{n^2\kappa} = \frac{\partial^2 \langle H \rangle / L}{\partial^2 n} \quad [\text{B.26}]$$

où $\langle H \rangle$ est l'énergie totale du système et n est le nombre d'électrons par site. Par la méthode de Gutzwiller (minimisation de [B.23]) on obtient donc aisément ces quantités. x

Sur la figure B.4, nous avons porté la compressibilité, $n^2\kappa$, en fonction du potentiel chimique (obtenus par la méthode de Gutzwiller). On observe, sur cette "densité généralisée", l'apparition d'un gap en centre de bande lorsque la répulsion est supérieure à la valeur critique U_c donnée en [B.24]. Pour le réseau carré, $U_c \cong 13t$.

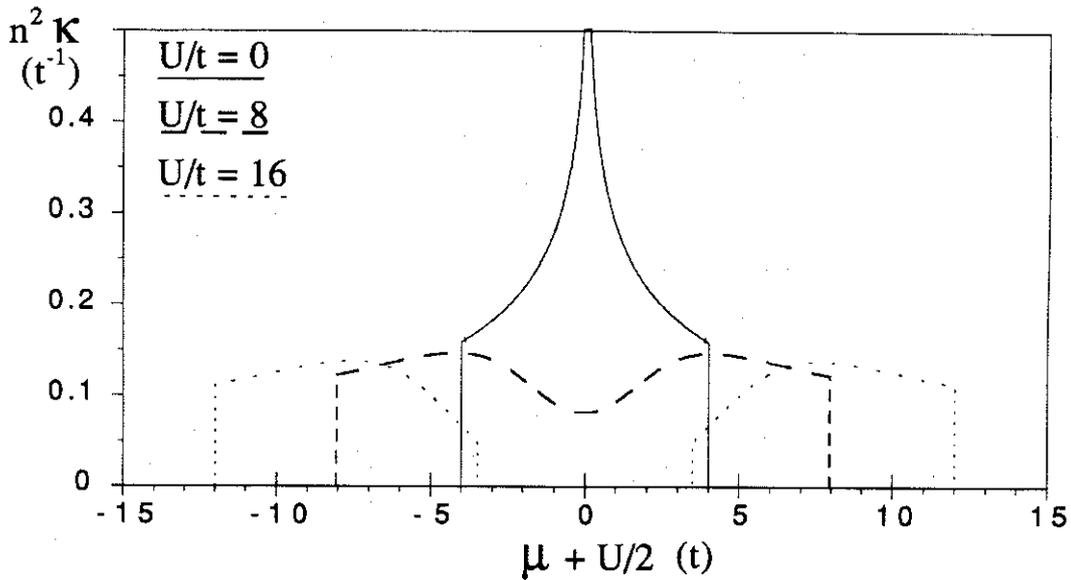


Figure B.4 : Compressibilité en fonction du potentiel chimique. Lorsque la répulsion coulombienne intrasite, U , est nulle (trait plein), on retrouve la densité d'états d'électrons indépendants sur un réseau carré. Lorsque la répulsion est supérieure à $U_c = 8 \langle H_C \rangle_0 = -128/\pi^2 t$, le potentiel chimique présente une discontinuité en $n=1$. Ainsi, la courbe en pointillés illustre les deux "sous-bandes de Hubbard".

I.C GENERALISATION DE LA METHODE DE GUTZWILLER

C.1 La formulation de Nozières

1.a Au delà d'une approche variationnelle

Comme on vient de le voir, l'approche originale de Gutzwiller consiste à adopter une fonction d'onde variationnelle et à calculer son énergie de façon approchée. En toute rigueur, on ne peut donc pas parler de "méthode variationnelle", puisque l'on ne calcule pas de façon exacte l'énergie de l'état variationnel. De plus, si l'on veut pouvoir faire un calcul exact de l'énergie dans une fonction d'onde variationnelle, on est réduit à imposer une forme peu réaliste à cette dernière. Ainsi, on perd, au début, la fiabilité que l'on gagne par la suite. Afin de dépasser cette situation, Nozières a adopté une présentation différente de la méthode de Gutzwiller / Nozières 86 /.

La valeur moyenne d'un opérateur peut s'exprimer à l'aide d'une matrice densité. Nozières a obtenu de façon très simple le résultat de Gutzwiller (l'équation [B.17]), en faisant quelques hypothèses sur une matrice densité de l'état censé prendre en compte les corrélations coulombiennes. On a ainsi une présentation plus transparente de la méthode de Gutzwiller où n'apparaît pas, par exemple, la forme particulière de la fonction d'onde de Gutzwiller.

Dans ce qui suit, nous adoptons l'approche de Nozières en poursuivant un double objectif : faire un minimum d'approximations et obtenir un résultat le plus général possible. Ainsi, après avoir exposé l'approche de Nozières de façon très générale, nous généraliserons la méthode de Gutzwiller aux états non homogènes (n_i^σ dépendant de i). Cela nous permettra, en particulier, d'étudier l'antiferromagnétisme dans le modèle de Hubbard du réseau carré (chapitre II) et dans le modèle de Hubbard étendu au plan CuO_2 (chapitre III).

1.b Matrices densité partielles

Dans tous les modèles qui nous intéressent, l'hamiltonien s'exprime comme une somme d'opérateurs élémentaires dont les éléments de matrice ne dépendent que de l'état de quelques sites. C'est le cas, par exemple, de l'opérateur de saut, χ_{ij}^σ , qui ne fait intervenir que les sites i et j . Considérons un ensemble, \mathbf{L} , de l sites du réseau et notons \mathbf{E} l'ensemble des $L-l$ autres sites du réseau.

La matrice densité totale d'un état $|\Psi\rangle$ est donnée par ses éléments de matrice :

$$\rho_{C,C'} = \Psi(C)\Psi^*(C') \quad [\text{C.1}]$$

où C et C' sont deux configurations. Il est intéressant de définir la matrice densité partielle pour l'ensemble \mathbf{L} par :

$$\rho_{L,L'} = \sum_{\mathbf{E}} \rho_{LE,L'E} \quad [\text{C.2}]$$

où L et L' sont deux configurations de \mathbf{L} , où la sommation porte sur toutes les configurations de \mathbf{E} et où LE est la configuration du réseau pour laquelle les sites de \mathbf{L} sont dans la configuration L et les sites de \mathbf{E} sont dans la configuration E .

La valeur moyenne d'un opérateur, A , ne dépendant que des sites de \mathbf{L} est donnée par la formule :

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_{L,L'} \rho_{L,L'} A_{L',L} \quad [\text{C.3}]$$

où $A_{L',L}$ est l'élément de matrice de A entre les configurations $L'E$ et $L'E$ le choix de E étant indifférent. Cette expression a l'intérêt de ne faire intervenir que des configurations de \mathbf{L} .

De même, on peut définir la matrice densité partielle pour les configurations des spins up de \mathbf{L} par :

$$\rho_{L^\uparrow, L^\uparrow} = \sum_{L^\downarrow, E} \rho_{L^\uparrow L^\downarrow E, L^\uparrow L^\downarrow E} \quad [C.4]$$

où L^\uparrow et L^\downarrow sont deux configurations des électrons de spin vers le haut de \mathcal{L} et où la sommation porte sur toutes les configurations des électrons de spin vers le bas, L^\downarrow , de \mathcal{L} et sur toutes les configurations, E , de \mathcal{E} . Notons que le type de matrice densité considéré est indiqué par la nature des configurations en indice.

Les éléments de matrice diagonaux d'une matrice densité sont les probabilités des configurations correspondantes :

$$\rho_{C,C} = P_C \quad [C.5]$$

Dans ce qui suit, nous notons ρ^0 les matrices densité pour un état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$, et ρ les matrices densité d'un état, $|\Psi\rangle$, ne différant de $|\Psi_0\rangle$ que par la prise en compte de corrélations entre électrons de spins opposés. De même, nous notons, p^0 et p , les probabilités correspondantes.

Notons $n_j^{\sigma g}$, le nombre moyen d'électrons de spins σ sur le site j et d_j la probabilité de double occupation du site j dans l'état $|\Psi\rangle$. Notons n_j^σ , le nombre moyen d'électrons de spin σ sur le site j dans l'état $|\Psi_0\rangle$. Dans le cas où \mathcal{L} est réduit à un seul site, une configuration de \mathcal{L} , ne peut prendre que les quatre valeurs portées dans la colonne de gauche du tableau C.1. Les probabilités de ces configurations dans les états $|\Psi\rangle$ et $|\Psi_0\rangle$ s'expriment comme indiqué dans le tableau C.1. Dans un état homogène, par conservation du nombre total de particules d'un spin donné, $n_j^{\sigma g}$ est égal à n_j^σ .

\mathcal{L}	$P^0(\mathcal{L})$	$P(\mathcal{L})$
\emptyset	$(1-n^\uparrow)(1-n^\downarrow)$	$1-n^g+d$
\uparrow	$n^\uparrow(1-n^\downarrow)$	$n^\uparrow g-d$
\downarrow	$(1-n^\uparrow)n^\downarrow$	$n^\downarrow g-d$
$\uparrow\downarrow$	$n^\uparrow n^\downarrow$	d

Tableau C.1 : probabilités des différentes configurations, \mathcal{L} , d'un site j dans l'état de particules indépendantes $|\Psi_0\rangle$ (P_0) et dans l'état $|\Psi\rangle$ (P). L'indice j est implicite.

1.c les opérateurs

Nous allons nous restreindre à deux catégories d'opérateurs particulièrement simples. La première est celle des opérateurs, A , qui ne couplent que deux configurations de \mathcal{L} , \mathcal{L}_i et \mathcal{L}_f , et dont tous les autres éléments de matrice, $A_{\mathcal{L},\mathcal{L}'}$ ($\mathcal{L} \neq \mathcal{L}_i, \mathcal{L}' \neq \mathcal{L}_f$), sont nuls. Un exemple est l'opérateur de spin flip, $\chi_{12}^\downarrow \chi_{21}^\uparrow$, qui, dans l'ensemble $\mathcal{L} = \{1,2\}$ (1 et 2 désignent deux sites), associe à la configuration, $\mathcal{L}_i = \{1:\downarrow; 2:\uparrow\}$, la configuration, $\mathcal{L}_f = \{1:\uparrow; 2:\downarrow\}$.

La valeur moyenne d'un tel opérateur se réduit à un élément de matrice de la matrice densité partielle pour \mathcal{L} :

$$\langle A \rangle = \rho_{\mathcal{L}_i, \mathcal{L}_f} \quad [\text{C.6}]$$

Le facteur de renormalisation est donc simplement :

$$g_A = \frac{\langle A \rangle}{\langle A \rangle_0} = \frac{\rho_{\mathcal{L}_i, \mathcal{L}_f}}{\rho_{\mathcal{L}_i, \mathcal{L}_f}^0} \quad [\text{C.7}]$$

La deuxième catégorie est celle des opérateurs, A^σ , qui ne dépendent que d'un spin, σ , et qui ne couplent que deux configurations, \mathcal{L}_i^σ et \mathcal{L}_f^σ , de ce spin. C'est le cas de l'opérateur de saut, χ_{12}^\uparrow , qui, dans l'ensemble $\mathcal{L} = \{1,2\}$, associe à la configuration, $\mathcal{L}_i^\uparrow \mathcal{L}_f^\downarrow = \{1\uparrow:0; 2\uparrow:1\} \mathcal{L}_f^\downarrow$, la configuration, $\mathcal{L}_f^\uparrow \mathcal{L}_i^\downarrow = \{1\uparrow:1; 2\uparrow:0\} \mathcal{L}_i^\downarrow$. \mathcal{L}_f^\downarrow décrit l'ensemble des configurations des spins vers le bas, $j\uparrow:0$ signifie qu'il n'y a pas de spin vers le haut sur le site j , $j\uparrow:1$ signifie qu'il y en a un.

Considérons un opérateur, A^\uparrow , ne dépendant que du spin up, sa valeur moyenne s'écrit :

$$\langle A^\uparrow \rangle = \rho_{\mathcal{L}_i^\uparrow, \mathcal{L}_f^\uparrow} = \sum_{\mathcal{L}_f^\downarrow} \rho_{\mathcal{L}_i^\uparrow \mathcal{L}_f^\downarrow, \mathcal{L}_i^\uparrow \mathcal{L}_f^\downarrow} \quad [\text{C.8}]$$

où la sommation porte sur les configurations des spins \downarrow de \mathcal{L} . Le facteur de renormalisation s'écrit donc :

$$g_{A^\uparrow} = \frac{\rho_{\mathcal{L}_i^\uparrow, \mathcal{L}_f^\uparrow}}{\rho_{\mathcal{L}_i^\uparrow, \mathcal{L}_f^\uparrow}^0} \quad [\text{C.9}]$$

1.d Les facteurs de renormalisation

1.d.α Les hypothèses de Nozières

Notre objectif est d'exprimer les facteurs de renormalisation g_A et g_{A^\dagger} en fonction des quantités connues que sont les n_i^\uparrow et n_i^\downarrow et en fonction des facteurs de double occupation, d_i , qui sont, dans l'application au modèle de Hubbard, les paramètres variationnels prenant en compte les corrélations coulombiennes. Nous montrons, ci-après, que, lorsque l'état $|\Psi_0\rangle$ est homogène, les deux hypothèses [C.10] et [C.11] suffisent à y parvenir, l'hypothèse [C.11] devant être remplacée par l'hypothèse [C.12] pour le calcul de g_{A^\dagger} .

$$\frac{p_{L,L'}}{p_{L,L'}^0} = \sqrt{\frac{p_L p_{L'}}{p_L^0 p_{L'}^0}} \quad [\text{C.10}]$$

$$\frac{p_L}{p_L^0} = \prod_{j=1,l} \frac{p_L^j}{p_L^{0j}} \quad [\text{C.11}]$$

$$\frac{p_L}{p_{L^\dagger}^0} = \prod_{j=1,l} \frac{p_L^j}{p_{L^\dagger}^{0j}} \quad [\text{C.12}]$$

$L^{\uparrow j}$ est la configuration des spins vers le haut du $j^{\text{ème}}$ site de L ($L^{\uparrow j}=0$ ou 1).

Ces hypothèses ont été introduites par Nozières afin de retrouver le résultat de Gutzwiller. Nous reviendrons plus loin (en 1.e) sur leur signification physique. La première ([C.10]) va nous permettre d'éliminer des expressions de g_A et g_{A^\dagger} ([C.7] et [C.9]), les éléments non diagonaux des matrices densité. La deuxième ([C.11] ou [C.12]), ramènera l'indétermination aux seules probabilités des configurations à un site. Ces probabilités sont données au tableau C.1. Ainsi, pour un état homogène, on obtiendra bien l'expression recherchée.

1.dβ Opérateurs dépendant des deux spins

Soit un opérateur, A, de la première catégorie définie plus haut (voir 1.c). L'application des hypothèses [C.10] et [C.11] à l'expression [C.7] donne immédiatement la formule générale :

$$g_A = \prod_{j=1,1} q_A^j \quad \text{avec} \quad q_A^j = \sqrt{\frac{P_{L_i^j} P_{L_f^j}}{P_{L_i^j} P_{L_f^j}}} \quad [C.13]$$

où L_i^j est la configuration initiale du $j^{\text{ème}}$ site de \mathcal{L} et L_f^j est sa configuration finale. Il ne reste plus qu'à utiliser le tableau C.1.

Comme exemple d'application, considérons l'opérateur de spin-flip (voir 1.c). Il vient :

$$q_{\chi_{i2}^{\uparrow} \chi_{21}^{\downarrow}}^j = \sqrt{\frac{(n_j^{\uparrow} - d_j)(n_j^{\downarrow} - d_j)}{n_j^{\uparrow}(1 - n_j^{\uparrow})n_j^{\downarrow}(1 - n_j^{\downarrow})}} \quad [C.14]$$

où j désigne un des deux sites dont les spins ont été échangés ($j=1$ ou 2). Dans le cas homogène ($n_j^{\sigma} = n_j^{\sigma}$) et paramagnétique ($n^{\uparrow} = n^{\downarrow}$), le facteur de renormalisation de l'opérateur de spin-flip s'écrit :

$$g_j = 4 \left(\frac{n - 2d}{n(2 - n)} \right)^2 \quad [C.15]$$

L'opérateur $S_i \cdot S_j$ qui couple les spins des sites i et j dans l'hamiltonien de Heisenberg quantique est une somme d'opérateurs du type A (voir [IV.D.4]). De plus, on vérifie que dans le cas homogène et paramagnétique, tous ces opérateurs sont renormalisés par le même facteur, g_j , (donné en [C.15]) il vient donc :

$$\langle S_i \cdot S_j \rangle = g_j \langle S_i \cdot S_j \rangle_0 \quad [C.16]$$

1.d) Opérateurs ne dépendant que d'un spin

Soit un opérateur, A^\uparrow , de la seconde catégorie définie plus haut (voir 1.c). Les électrons de spins opposés sont indépendants dans $|\Psi_0\rangle$. Cela se traduit sur les matrices densité par :

$$\rho_{L^\uparrow L^\downarrow, L^\uparrow L^\downarrow}^0 = \rho_{L^\uparrow, L^\uparrow}^0 \rho_{L^\downarrow, L^\downarrow}^0 \quad [\text{C.17}]$$

L'équation [C.9] peut donc se mettre sous la forme :

$$g_{A^\uparrow} = \sum_{L^\downarrow} \frac{\rho_{L^\uparrow L^\downarrow, L^\uparrow L^\downarrow}}{\rho_{L^\uparrow, L^\uparrow}^0 \rho_{L^\downarrow, L^\downarrow}^0} p_{L^\downarrow}^0 \quad [\text{C.18}]$$

L'application des hypothèses [C.10] et [C.12] donne :

$$g_{A^\uparrow} = \prod_{j=1,1} q_{A^\uparrow}^j \quad \text{avec} \quad q_{A^\uparrow}^j = \frac{1}{\sqrt{p_{L_i^\uparrow}^0 p_{L_f^\uparrow}^0}} \sum_{L^\downarrow_j} \sqrt{p_{L_i^\uparrow L^\downarrow_j} p_{L_f^\uparrow L^\downarrow_j}} \quad [\text{C.19}]$$

La somme sur les configurations, L^\downarrow_j , du site j pour le spin vers le bas dans [C.19], ne comprend que 2 termes puisqu'un site comporte soit 0 soit 1 électron d'un spin donné. L'exemple qui nous intéresse est l'opérateur de saut (voir 1.c). La substitution des probabilités dans [C.19] par leur expression donnée au tableau C.1 donne :

$$g_{\chi_{12}^\uparrow} = q_{\chi_{12}^\uparrow}^1 q_{\chi_{12}^\uparrow}^2 \quad ; \quad q_{\chi_{12}^\uparrow}^j = \frac{\sqrt{(1-n_j^\uparrow + d_j)(n_j^\uparrow - d_j)} + \sqrt{(n_j^\uparrow - d_j) d_j}}{\sqrt{n_j^\uparrow (1-n_j^\uparrow)}} \quad [\text{C.20}]$$

Dans le cas homogène ($n_j^{\uparrow\sigma} = n_j^\sigma$), on retrouve bien l'expression [B.17] du facteur de Gutzwiller.

1.e Approximations physiques

La première hypothèse de Nozières, [C.10], est automatiquement vérifiée si l'on admet que la phase de la fonction d'onde, $\Psi(C)$, de l'état $|\Psi\rangle$ n'est pas modifiée par rapport à celle de la fonction d'onde de particules indépendantes, $\Psi^0(C)$:

$$\Psi_{(C)}/\Psi^0_{(C)} \in \mathbb{R}^+ \quad [\text{C.21}]$$

et si l'on suppose que les corrélations entre \mathbf{L} et son environnement ne sont pas modifiées par rapport à celles qui existent dans l'état de particules indépendantes :

$$\frac{\rho_{LE,L'E'}}{\rho_{L,L'}\rho_{E,E'}} = \frac{\rho^0_{LE,L'E'}}{\rho^0_{L,L'}\rho^0_{E,E'}} \quad [\text{C.22}]$$

En effet, D'après [C.22], il vient :

$$\frac{\rho_{LE,L'E}}{\rho^0_{LE,L'E}} = \frac{\rho_{L,L'}\rho_E}{\rho^0_{L,L'}\rho^0_E} \quad [\text{C.23}]$$

Par ailleurs, d'après la définition d'une matrice densité totale [C.1] puis l'hypothèse [C.21] :

$$\frac{\rho_{LE,L'E}}{\rho^0_{LE,L'E}} = \sqrt{\frac{\rho_{LE}}{\rho^0_{LE}}} \sqrt{\frac{\rho_{L'E}}{\rho^0_{L'E}}} \quad [\text{C.24}]$$

En appliquant [C.22] aux éléments diagonaux ρ_{LE} et $\rho_{L'E}$ dans l'expression [C.24], il vient :

$$\frac{\rho_{LE,L'E}}{\rho^0_{LE,L'E}} = \sqrt{\frac{\rho_L\rho_{L'}}{\rho^0_L\rho^0_{L'}}} \frac{\rho_E}{\rho^0_E} \quad [\text{C.25}]$$

En égalant les seconds membres de [C.23] et [C.25], on retrouve bien la première hypothèse de Nozières.

La deuxième hypothèse de Nozières ([C.11] ou [C.12]) revient à négliger les corrélations entre les différents sites de \mathbf{L} (pour les probabilités seulement). Il apparaît donc que le calcul du facteur de renormalisation par la méthode de Gutzwiller ne néglige pas purement et simplement les corrélations d'échange dans la fonction d'onde de particules indépendantes (comme le calcul de Gutzwiller présenté en B.1.c pouvait le laisser croire) mais néglige seulement la variation des corrélations intersites par rapport à la fonction d'onde de particules indépendantes.

Signalons que les hypothèses [C.11] et [C.12] sont équivalentes si l'on néglige les corrélations intersites entre électrons de spin vers le bas. D'ailleurs, si l'on

néglige les corrélations intersites, on peut étendre la méthode de Gutzwiller à des opérateurs plus généraux que ceux spécifiés en 1.c.

Considérons un produit quelconque d'opérateurs création et annihilation. Un tel opérateur impose la configurations des spin σ dans l'état initial et final pour certains sites, j_σ , et les configurations des deux spin dans l'état initial et final pour les autres sites, $j_{\uparrow\downarrow}$. Le facteur de renormalisation correspondant s'écrit :

$$g = \prod_{j=1,l} q^j \quad \text{avec} \quad q^j = \frac{1}{\sqrt{p_{G_i^j}^0 p_{G_f^j}^0}} \sum_{H^j} \sqrt{p_{G_i^j H^j} p_{G_f^j H^j}} \quad [\text{C.26}]$$

où G_i^j (G_f^j) désigne la partie imposée de la configuration initiale (finale) du site j et H^j décrit la partie non imposée éventuelle de la configuration du site j .

C.2 Généralisations

2.a Possibilités d'amélioration

La présentation de Nozières se prête aisément à des améliorations. Ainsi, on peut ne pas faire les hypothèses [C.11] ou [C.12] et introduire des paramètres variationnels supplémentaires qui prendraient en compte la variation des corrélations intersites sous l'effet de l'interaction coulombienne.

Kotliar et Ruckenstein ont retrouvé la méthode de Gutzwiller en faisant une approximation de point selle dans le cadre d'un formalisme de Bosons esclaves / Kotliar & Ruckenstein 86 /. Metzner et Wolhardt ont montré que, lorsque la dimension géométrique du réseau est infinie, l'approximation de Gutzwiller est exacte / Metzner & Wolhardt 87 /. Leur méthode de développement diagrammatique permet de corriger l'approximation de Gutzwiller par des perturbations en $1/d$ où d est la dimension du réseau / Gebhard 90 /. Ces différentes approches permettent donc, elles aussi, d'améliorer la méthode de Gutzwiller sur la voie d'une meilleure prise en compte des corrélations coulombiennes.

2.b Extension à un état non homogène

Si l'on rajoute aux hypothèses de Nozières, la troisième hypothèse selon laquelle le nombre moyen d'électrons de spin σ sur un site est le même dans l'état $|\Psi\rangle$ et dans l'état $|\Psi_0\rangle$:

$$n_i^{\sigma g} = n_i^{\sigma} \quad [\text{C.27}]$$

on généralise les expressions de g_A et $g_{A\uparrow}$ données en [C.13], [C.19] et [C.26] au cas d'un état non homogène.

En particulier, l'expression du facteur de Gutzwiller ([C.20]) où l'on a appliqué cette hypothèse ([C.27]) donne :

$$g_{t\sigma}^{ij} = q_{(n_i^{\sigma}, n_i^{-\sigma}, d)} q_{(n_j^{\sigma}, n_j^{-\sigma}, d)} \quad \text{avec} \quad [\text{C.28}]$$

$$q_{(n_1, n_2, d)} = \frac{\sqrt{(1-n_1-n_2+d)(n_1-d)} + \sqrt{d(n_2-d)}}{\sqrt{n_1(1-n_1)}} \quad [\text{C.29}]$$

où $g_{t\sigma}^{ij}$ est le facteur de renormalisation de l'opérateur de saut d'un électron de spin σ entre les sites i et j .

L'expression, [C.28], permet d'étudier la possibilité d'un état fondamental inhomogène pour l'hamiltonien de Hubbard. Un exemple est un état présentant une onde statique de densité de charge :

$$n_i^{\sigma} = (n + \delta n \sin(Q \cdot R_i - \phi)) / 2 \quad [\text{C.30}]$$

R_i est la position du site i sur le réseau, Q est le vecteur d'onde de l'onde de densité de charge, δn est son amplitude et ϕ , sa phase à l'origine.

Un autre exemple est un état présentant une onde statique sinusoïdale de densité de spin :

$$\begin{aligned} n_i^\uparrow &= (n + m \sin(Q \cdot R_i - \phi)) / 2 \\ n_i^\downarrow &= (n - m \sin(Q \cdot R_i - \phi)) / 2 \end{aligned} \quad [C.31]$$

$$m_i = n_i^\uparrow - n_i^\downarrow = m \sin(Q \cdot R_i - \phi) \quad [C.32]$$

m est l'amplitude de l'onde statique, Q est son vecteur d'onde et ϕ , sa phase à l'origine. Le moment magnétique moyen sur un site selon l'axe de quantification du spin est donné par :

$$\mathbf{m}_i = \frac{g\mu_B}{2} m_i \quad [C.33]$$

où g et μ_B sont le facteur de Landé et le magnéton de Bohr ($g \cong 2$, $\mu_B \cong 10^{-23} \text{JT}^{-1}$). La différence entre \mathbf{m}_i et m_i n'est qu'une question d'unités. Dans toute la suite, nous parlerons donc de moment magnétique dans les deux cas, la notation \mathbf{m} ou m faisant la différence.

Notons qu'a priori, les facteurs de double occupation, d_i , dans [C.28], dépendent du site i ce qui fait autant de paramètres variationnels indépendants. Nous étudions, au chapitre II, le cas d'un état antiferromagnétique ce qui correspond à une onde de densité de spin de vecteur d'onde $(\pi/a, \pi/a)$ où a est le paramètre de maille. Dans ce cas particulier, le facteur de double occupation est indépendant de i ce qui simplifie les calculs.

Plus généralement, la méthode de Gutzwiller ainsi généralisée permet d'étudier des hamiltoniens plus complexes que l'hamiltonien de Hubbard du réseau carré. Pour l'hamiltonien de Hubbard étendu quelconque (voir [A.7]), l'expression de l'énergie totale par la méthode de Gutzwiller est :

$$\langle H \rangle = \sum_{i,j,\sigma} g_{t^{ij}\sigma} t_{ij} \langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0 + \sum_{j,\sigma} \epsilon_j n_{j\sigma} + \sum_j U_j d_j \quad [C.34]$$

où $g_{t^{ij}\sigma}$ est donné en [C.28]. ($\langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0$, $n_{j\sigma}$, d_j sont les valeurs moyennes dans l'état de particules indépendantes, des opérateurs χ_{ij}^σ , $n_{j\sigma}$ et d_j respectivement). Ainsi, au chapitre II, nous étudierons le modèle à deux bandes du plan CuO_2 où l'énergie de site et la répulsion coulombienne ne sont pas les mêmes sur les sites de cuivre et sur les sites d'oxygène.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons vu que la méthode de Gutzwiller est, à l'origine, une approche variationnelle, la fonction d'onde d'essai étant obtenue en abaissant, dans une fonction d'onde de particules indépendantes, le poids des configurations comportant un nombre important de sites doublement occupés. L'énergie, dans cet état, est alors obtenue de façon approximative en faisant des dénombrements de configurations.

Cette méthode permet de retrouver la renormalisation de la masse des quasi-particules et la transition de Mott (état isolant pour une bande demi-pleine). Elle est en accord avec le théorème de Luttinger. Par contre, les fluctuations quantiques des électrons localisés par la forte répulsion sont complètement négligées.

Nous avons vu qu'il était particulièrement fructueux de traduire les idées physiques de Gutzwiller en adoptant un formalisme de matrices densités sur lesquelles on fait quelques hypothèses simples (approche de Nozières). Nous avons ainsi obtenu une expression générale du facteur de renormalisation pour un opérateur ne couplant que deux configurations d'un ensemble de sites et pour un opérateur ne couplant que deux configurations de spin d'un ensemble de sites. Surtout, cette approche nous a permis de généraliser la méthode de Gutzwiller à un état pouvant présenter des ondes statiques sinusoïdales de densité de spin ou de charge quelconques et à des hamiltoniens beaucoup plus généraux que l'hamiltonien de Hubbard du réseau carré.

Néanmoins, l'application de la méthode de Gutzwiller à un tel état inhomogène nécessite, a priori, la prise en compte de la probabilité de double occupation sur chaque site comme un paramètre variationnel indépendant. En pratique, Il semble donc que l'on soit limité à des états présentant une symétrie suffisante pour que le nombre de paramètres variationnels reste faible. Dans les deux chapitres qui suivent, nous appliquons cette méthode à des états présentant un ordre antiferromagnétique à longue distance.

REFERENCES

- Bellman R. Introduction to matrix analysis, Mac Grow Hill (60)
- Brinkman W.F. & Rice T.M. Phys. Rev. B 34 P.4302 (70)
- Gebhard F. Phys. Rev. B 41 P.9452 (90)
- Gutzwiller M.C. Phys. Rev. Lett. 10 P.159 (63)
- Gutzwiller M.C. Phys. Rev. 137 P.A1726 (66)
- Hubbard J. Proc. R. Soc. London A276 P.1362 (86)
- Kotliar G. & Ruckenstein A. Phys. Rev. B 57 P.381 (87)
- Luttinger J.M. Phys. Rev. 119 P.1153 (60)
- Metzner W. & Vollhardt D. Phys. Rev. B 37 P.7382 (87)
- Mott N.F. Proc. Phys. Soc. London 62 P.416 (49)
- Nozières P. Cours au collège de France (86)
- Ogawa T. Progr. in theor. phys. 53 P. 614 (75)
- Kanda K. & Matzubara T.
- Rice T.M. & Ueda K. Phys. Rev. B 34 P.6420 (86)
- Vollhardt D. Rev. Mod. Phys. 56 P.99 (84)
- Yokoyama H. & Shiba H. J. Phys. Soc. Japan 56 P.3570 (87)
- Zhang S.C. Superc. Sci. Technol. 1 P.36 (88)
- Gros C. , Rice T.M. & Shiba H.

CHAPITRE II

LE MODELE DE HUBBARD

DU RESEAU CARRE

PLAN DU CHAPITRE II

INTRODUCTION

II.A MODELISATION DES OXYDES SUPRACONDUCTEURS

A.1 Les électrons de valence

A.2 Le modèle à une bande

II.B LE COMPOSE NON DOPE

B.1 L'approximation de Hartree-Fock

1.a Le critère de Stoner

1.b La susceptibilité magnétique

1.c L'instabilité par rapport à l'antiferromagnétisme

B.2 La méthode de Gutzwiller

2.a La procédure générale

2.b Le facteur de renormalisation

2.c Faibles répulsions

2.d Répulsion quelconque

2.e Résultats numériques

II.C LE COMPOSE DOPE

C.1 L'antiferromagnétisme

1.a l'approximation de Hartree-Fock

1.b Principe du calcul

1.c Résultats

1.d Interprétation

C.2 Autres formes plus complexes de magnétisme

2.a Le ferrimagnétisme de Penn

2.b L'onde statique de spin incommensurable

2.c Les solitons

2.d Les spin bags

2.e La séparation de phases

CONCLUSION

INTRODUCTION

Ce chapitre constitue une première approche de l'antiferromagnétisme dans les oxydes supraconducteurs lorsque l'énergie de répulsion n'est pas très supérieure à l'énergie cinétique des électrons. Nous allons voir que la modélisation du système par un simple réseau carré de sites de cuivre semble contenir une bonne partie de la physique.

Dans la partie A, nous montrons de façon très simplifiée comment l'étude des propriétés électroniques d'un oxyde supraconducteur peut se ramener à celle du modèle de Hubbard du réseau carré dont nous avons déjà parlé au chapitre précédent.

Dans la partie B, après un rappel des principaux résultats de la théorie classique du magnétisme itinérant (approximation de Hartree-Fock), nous montrons ce que la méthode de Gutzwiller permet de dire de l'antiferromagnétisme dans le composé non dopé (bande demi-pleine). Lorsque le composé est non dopé, l'étude de l'antiferromagnétisme peut se faire de façon très simple en parallèle avec celle du ferromagnétisme.

La partie C est consacrée à l'effet du dopage sur l'antiferromagnétisme.

Dans un premier temps, nous examinons la stabilité par rapport à la phase paramagnétique d'un état présentant un ordre antiferromagnétique à longue distance mais dont l'essentiel de l'énergie est dû aux corrélations à courte distance. Nous en déduisons un domaine de stabilité de la phase antiferromagnétique en fonction de la densité d'électrons et de la répulsion coulombienne. Nous examinons également diverses propriétés de cet état (aimantation alternée etc...). Cependant la forme du fondamental est probablement plus complexe que celle envisagée dans cette étude. La stabilisation d'un état ordonné antiferromagnétiquement suggère néanmoins la présence de corrélations antiferromagnétiques à courte distance.

Puis, après avoir rappelé quelques structures magnétiques possibles de l'état fondamental, nous montrons que l'ordre antiferromagnétique à longue distance que nous avons envisagé ne correspond pas à la structure magnétique réelle du composé dopé (à température nulle). Nous examinons, la possibilité d'une séparation de phases du système qui peut se produire si les impuretés à l'origine du dopage (lacunes dans $\text{La}_2\text{CuO}_{4-y}$, par exemple) sont suffisamment mobiles.

II.A MODELISATION DES OXYDES SUPRACONDUCTEURS

A.1 Les électrons de valence

Considérons le cristal de La_2CuO_4 dont la maille primitive est représentée sur la figure 0.1. La première question qui se pose est de savoir sur quels sites se trouvent principalement les électrons de valence et combien ils sont. Pour commencer, faisons l'inventaire des couches externes des atomes en présence. Ce sont : La $(5d)^1(6s)^2$, Cu $(3d)^{10}(4s)^1$ et O $(2p)^4$. L'échelle sur la gauche de la figure A.1 situe la position des niveaux atomiques correspondants. On s'attend donc, en première approximation, à ce que les atomes soient ionisés comme indiqué sur la figure A.1.

Niveaux atomiques (eV)	Configurations atomiques	Nombre d'atomes par u.s.*	Nombre d'états atomiques par u.s.*		Nombre d'états ioniques par u.s.*		Configurations ioniques.
			vides	occupés	vides	occupés	
- 5.0	La $(5d)^1(6s)^2$	2		6		0	$\text{La}^{3+}(5d)^0(6s)^0$
- 6.9	Cu $(4s)^1$	1		1		0	$\text{Cu}^{2+}(4s)^0$
- 10.1	Cu $(3d)^{10}$	1	0		1		$\text{Cu}^{2+}(3d)^9$
- 14.1	O $(2p)^4$	4	8		0		$\text{O}^{2-}(2p)^6$

Figure A.1 * u.s. signifie : unité stœchiométrique (ou demi-maille primitive). On s'attend à ce que les électrons se répartissent de façon à occuper les plus bas niveaux d'énergie. D'où le passage d'un état atomique à un état ionique.

On s'attend donc à ce que les sites de cuivre jouent un rôle central puisque ce sont les seuls à posséder une couche incomplète d'après le schéma simpliste de la figure A.1. Bien entendu, les sites de cuivres ne sont pas isolés comme dans l'état atomique et il est nécessaire de prendre en compte l'effet de leur environnement. Ce dernier est représenté sur la figure A.2.

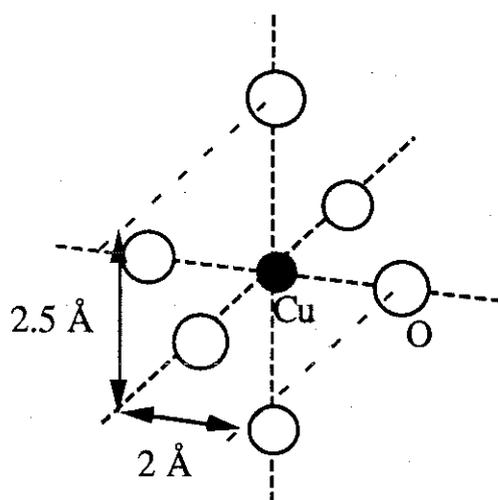


Figure A.2

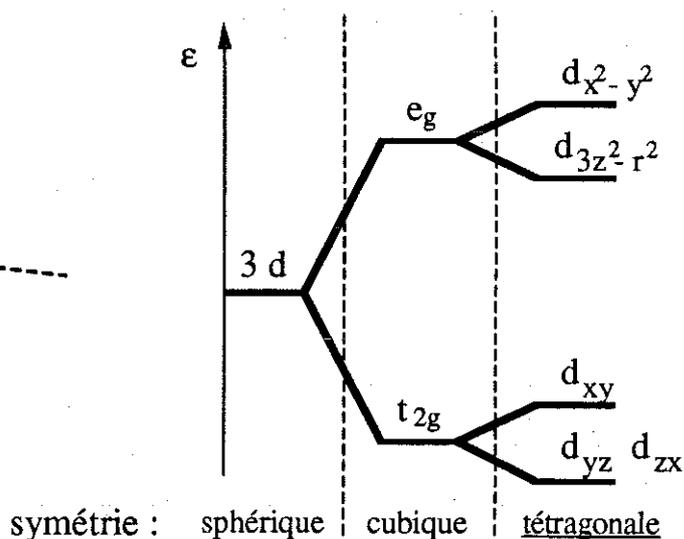


Figure A.3

Le champ cristallin dû à l'environnement de symétrie tétragonale lève la dégénérescence des états d du cuivre comme indiqué sur la figure A.3. On s'attend donc à ce que l'unique trou qui se trouve sur la couche 3d d'un ion de cuivre occupe plus particulièrement l'orbitale $3d_{x^2-y^2}$.

Une autre conséquence de l'insertion de l'atome de cuivre dans un réseau cristallin est l'hybridation de ses orbitales extérieures avec celles des atomes proches voisins. Comme le montre la figure A.2, les ions premiers voisins d'un site de cuivre sont les quatre ions O^{2-} situés dans le plan horizontal de la figure. Ceux-ci sont situés à mi-chemin entre deux sites de cuivre et on obtient ainsi, de proche en proche, le réseau bidimensionnel schématisé sur la figure A.4, appelé "plan CuO_2 ". Sur cette même figure, nous avons représenté la dépendance angulaire de différentes orbitales d du cuivre et p de l'oxygène. Il apparaît que seules les orbitales $d_{x^2-y^2}$ du cuivre et p_{σ} de l'oxygène ont un recouvrement mutuel important. (Les orbitales p_{σ} de l'oxygène sont définies comme étant les orbitales p dont les "lobes" sont orientés dans le plan CuO_2 et dans le sens de la liaison Cu-O, par opposition aux orbitales p_{π}).

Dans un modèle à une particule, le trou résiduel dans l'orbitale $d_{x^2-y^2}$ du cuivre (voir figure A.1), est donc délocalisé dans tout un plan CuO_2 . De plus, l'hybridation n'étant pas considérable du fait, en particulier, de la forte localisation des orbitales d au voisinage des noyaux de cuivre, on peut adopter le formalisme de liaisons fortes que nous avons présenté en I.A. Dans ce formalisme, les orbitales prises en compte sont les orbitales $3d_{x^2-y^2}$ pour les sites de cuivre et $2p_{\sigma}$ pour les sites d'oxygène.

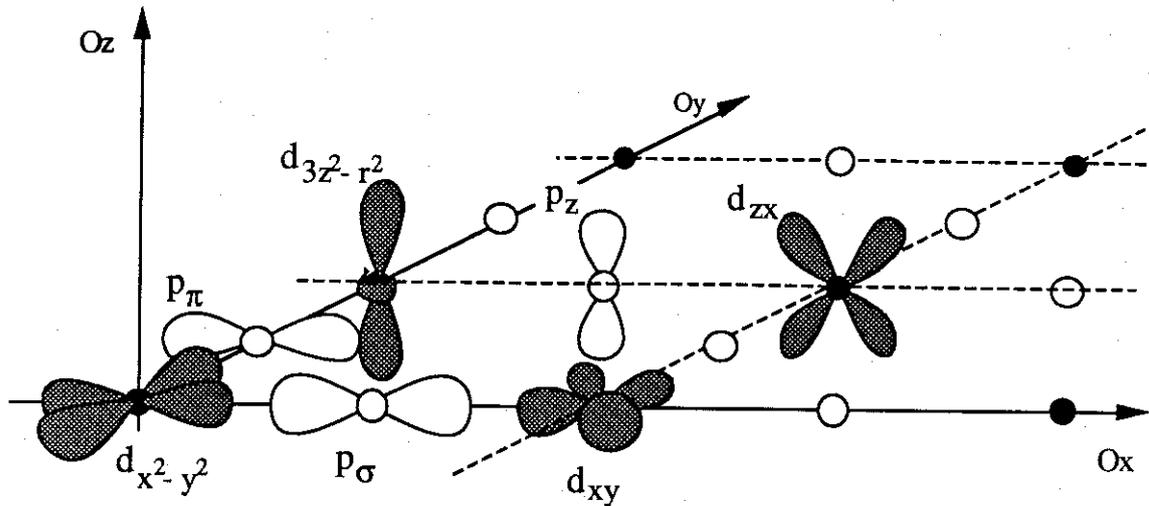


Figure A.4 : Quelques orbitales périphériques des ions d'un plan CuO_2 . Les cercles blancs représentent les ions O^{2-} et les cercles noirs représentent les ions Cu^{2+} .

Pour ce qui est du nombre d'électrons à prendre en considération, nous avons vu que, dans le composé non dopé, il y a un trou par site de cuivre ce qui fait 5 électrons par maille primitive (du plan CuO_2) qui comprend une orbitale de cuivre ($3d_{x^2-y^2}$) et 2 orbitales d'oxygène (p_{σ}).

Le composé dopé, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, diffère du composé non dopé en ce qu'une fraction, x , des atomes de lanthane a été remplacée par des atomes de strontium. La configuration d'une impureté est : $Sr (5s)^2$. Nous avons vu que, dans notre modèle, un atome de lanthane contribuait seulement à donner 3 électrons de valence, ses couches périphériques ayant une énergie trop élevée pour être occupées dans le composé (voir figure A.1). Il en est de même de l'impureté à ceci près que sa couche externe ne comporte que deux électrons au lieu de trois. L'introduction d'une impureté est donc équivalente à rajouter un trou dans notre modèle.

Dans le composé dopé, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, il y a donc $1+x$ trous soit $5-x$ électrons par maille primitive du réseau. La densité de porteurs dans notre modèle est donc de l'ordre de grandeur du nombre de sites. La justification de cette modélisation nécessite, bien sûr, un travail plus conséquent que notre petit raisonnement. Elle découle de tout un ensemble de données expérimentales et de calculs de structure de bande / Julien 87 /.

A.2 Le modèle à une bande

Il ne nous reste plus qu'à savoir quelles sont les valeurs exactes des paramètres du modèle : énergies de sites, intégrales de saut et répulsions coulombiennes. Malheureusement, deux ordres de grandeur essentiels sont assez mal connus.

Il s'agit, premièrement, de l'ordre de grandeur des rapport des principaux paramètres d'interaction (répulsions coulombiennes) aux principaux paramètres d'hybridation (intégrales de saut).

Dans le cas où ces rapports sont très supérieurs à un (et où la densité de porteurs n'est pas très inférieure au nombre de sites), la forme du fondamental est essentiellement déterminée par les corrélations qui ont tendance à localiser les électrons et donc, les moments magnétiques, sur leurs sites respectifs. C'est ce que nous avons vu, au chapitre précédent, avec la transition de Mott. Le magnétisme résulte alors de l'interaction entre les moments de chaque site : c'est le magnétisme localisé.

Si, par contre, ces rapports ne sont pas très supérieurs à l'unité, les corrélations peuvent être traités comme un épiphénomène par rapport à l'hybridation. Les électrons sont délocalisés et un site, au cours du temps, peut prendre les quatre configurations : \emptyset , \uparrow , \downarrow , $\uparrow\downarrow$, de moments respectifs : 0, μ_B , $-\mu_B$, 0. La valeur moyenne du moment magnétique sur un site peut néanmoins être non nulle : C'est le magnétisme itinérant.

Dans ce chapitre et le suivant, nous adopterons une approche de magnétisme itinérant ce qui nous limitera au cas où les paramètres de répulsion coulombienne ne sont pas trop importants devant les intégrales de saut. Nous réservons pour le chapitre IV la discussion de la limite "localisée".

La deuxième grande inconnue du problème est l'écart entre les énergies de site des orbitales $d_{x^2-y^2}$ du cuivre et p_σ de l'oxygène (à ne pas confondre avec les niveaux atomiques).

L'expérience indique que, dans le composé non dopé, les trous sont essentiellement localisés sur les sites de cuivre / Fujimori & al. 87 ; Fuggle & al. 88 /. On peut donc être tenté de placer l'énergie de site (pour les électrons) des sites d'oxygène au-dessous de celle des sites de cuivre.

Si, de plus, nous faisons l'hypothèse que la différence, $\Delta\varepsilon$, entre ces deux énergies de site est très supérieure à l'intégrale de saut, t_0 , entre un site de cuivre et un site d'oxygène premiers voisins, un trou ne se trouve pratiquement jamais sur les sites d'oxygène. Ces derniers jouent cependant un rôle de "ponts" entre les sites de cuivre : on vérifie, par la théorie des perturbations, que les sites de cuivre sont reliés par l'intégrale de saut effective :

$$t^* = t_0^2 / \Delta\varepsilon^0 \quad [\text{A.1}]$$

Les sites de cuivre constituant un réseau carré, on s'est donc ramené, au modèle de Hubbard simple que nous avons présenté en I.A. L'intégrale de saut, t , entre deux sites proches voisins est donnée par l'équation [A.1], la répulsion coulombienne intrasite, U , est l'énergie d'interaction électrostatique, U_d , de deux électrons partageant une orbitale $3d_{x^2-y^2}$ du cuivre et le remplissage, n , de la bande est donné en fonction du dopage par la relation :

$$n = 1 - x \quad [\text{A.2}]$$

Ce modèle est souvent appelé "modèle à une bande" par opposition au "modèle à deux bandes" que nous discuterons au chapitre III.

Lorsque l'on dope le composé, il a été observé que les trous ajoutés se localisent sur les sites d'oxygène / Nücker & al 88 /. Nous verrons, au chapitre III, que ce phénomène peut être compris même en gardant l'hypothèse de forte ionicité, $\Delta\varepsilon \gg t_0$. Dans ce dernier cas, le modèle à une bande peut encore être justifié rigoureusement / Zhang & Rice 88 /. Le paramètre de répulsion change alors de signification :

$$U^* \equiv \left(\frac{1}{U_d} + \frac{1}{\Delta\varepsilon} \right)^{-1} \quad [\text{A.3}]$$

II.B LE COMPOSE NON DOPE

Nous avons vu, dans l'introduction générale, que le composé non dopé La_2CuO_4 présentait un ordre antiferromagnétique à longue distance. Plus précisément, les ions Cu^{2+} présentent un moment moyen non nul d'environ $0.5 \mu_B$ orienté comme l'indique la figure B.1 / Vaknin & al. 87 ; Tranquada & al. 87 /. De plus le couplage effectif entre spins est d'environ 1500K / Shirane & al. 87 /. Nous allons voir que le modèle de Hubbard permet de bien comprendre la présence d'antiferromagnétisme.

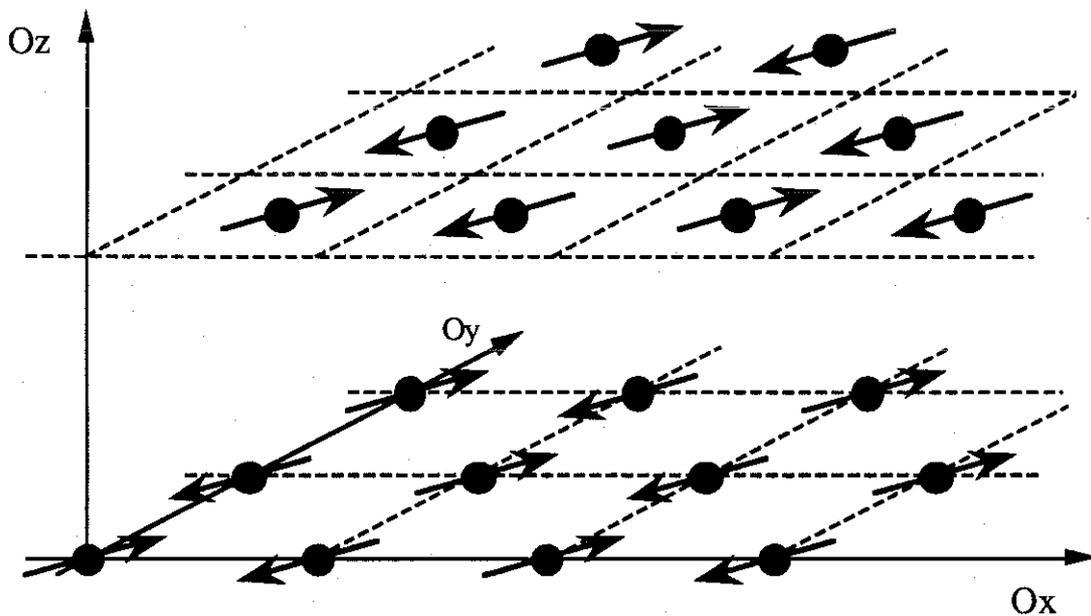


Figure B.1 : Orientation des moments magnétiques portés par les atomes de cuivre dans le composé La_2CuO_4 . Les cercles noirs représentent des atomes de cuivre dans deux plans CuO_2 . Les autres atomes ne sont pas représentés.

B.1 L'approximation de Hartree-Fock

1.a Le critère de Stoner

Toute la théorie usuelle du magnétisme itinérant est basée sur l'approximation de Hartree-Fock qui, rappelons le, consiste à supposer que les électrons se comportent comme des particules sans interaction placées dans un potentiel moyen qui représente leur interaction mutuelle.

Dans un état de particules indépendantes, les électrons de spins opposés se déplacent indépendamment les uns des autres, d'après l'expression de l'hamiltonien de Hubbard donnée en [I.A.6], la valeur moyenne de l'énergie dans un tel état s'écrit :

$$\langle H \rangle_0 = \langle H_c \rangle_0 + U \sum_i n_i^\uparrow n_i^\downarrow \quad [B.1]$$

où n_i^σ est le nombre moyen d'électrons de spin σ sur le site i et $\langle H_c \rangle_0$ est la valeur moyenne de l'énergie cinétique dans l'état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$. Supposons que $|\Psi_0\rangle$ présente une onde statique de densité de spin sinusoïdale d'amplitude, m , et de vecteur d'onde Q (voir I.C.2.b). En introduisant l'expression [I.C.31] dans [B.1], il vient :

$$\langle H \rangle = \langle H_c \rangle_0 + \frac{UL}{4} (n^2 - m^2 f_{(Q,\phi)}) \quad \text{avec } f = L^{-1} \sum_i \sin^2(Q \cdot R_i - \phi) \quad [B.2]$$

où L est le nombre total de sites et n est le nombre moyen de particules par site.

Il apparaît que l'énergie d'interaction (dernier terme dans l'expression [B.2]) est abaissée par la présence d'une onde statique de densité de spin. L'état fondamental de l'hamiltonien cinétique, H_c , est paramagnétique. L'énergie cinétique (premier terme dans l'expression [B.2]) s'oppose donc à toute forme d'ordre magnétique. La présence ou l'absence d'ordre magnétique résulte de la compétition entre le terme d'interaction et le terme cinétique. Il est donc important de connaître la variation exacte du terme d'énergie cinétique, $\langle H_c \rangle_0$, avec le moment magnétique, m .

Ce problème est relié au comportement paramagnétique du gaz d'électrons indépendants. Supposons que la variation de l'énergie cinétique avec l'amplitude de l'onde statique, m , soit parabolique :

$$\langle H_c \rangle_0(m) = L \left(E_0 + \frac{f}{4\chi_0} m^2 + o_{(m^2)} \right) \quad [B.3]$$

$o_{(x)}$ est une fonction de x qui tend vers zéro plus vite que x , E_0 est l'énergie par site du fondamental du gaz d'électrons indépendants. Appliquons au système un champ magnétique variant spatialement :

$$B_{(R_i)} = B_0 \sin(Q \cdot R_i - \phi) \quad [B.4]$$

Il en résulte le terme d'énergie supplémentaire :

$$\langle H_B \rangle_0 = \sum_i B_{(R_i)} \cdot m_i = L f m B_0 \quad [B.5]$$

La minimisation par rapport à m de l'énergie totale obtenue en ajoutant les termes [B.3] et [B.5] donne :

$$m = \chi B_0 \quad \text{avec } \chi = \chi_0 (g\mu_B)^2/2 \quad [B.6]$$

Le paramètre χ_0 dans l'expression [B.3] est donc la susceptibilité en unités réduites du système.

Si l'on introduit [B.3] dans [B.2], on obtient la variation de l'énergie totale du gaz d'électrons en interaction sous l'effet d'une onde statique de densité de spin de faible amplitude :

$$\langle H \rangle_0/L = E_0 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\chi_0} - U \right) m^2 + o_{(m^2)} \quad [B.7]$$

On en déduit le "critère de Stoner", condition d'instabilité de l'état paramagnétique par rapport à une onde statique de densité de spin de vecteur d'onde Q :

$$U \chi_{0(Q)} > 1 \quad [B.8]$$

1.b La susceptibilité

Dans le cas ferromagnétique, ($Q=(0,0)$), χ_0 est la densité d'états au niveau de Fermi. Pour les autres cas, ($Q \neq (0,0)$), la théorie des perturbations donne l'expression de la susceptibilité réduite dans l'espace des k :

$$\chi_0(Q) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{n_{(k+Q)} - n_{(k)}}{\epsilon_{(k)} - \epsilon_{(k+Q)}} \quad [\text{B.10}]$$

ϵ et n sont respectivement la valeur propre pour l'hamiltonien à une particule et la distribution dans l'espace des k de l'état paramagnétique de particules indépendantes.

Cette distribution pour le cas d'un réseau carré avec un électron par site et une intégrale de saut entre premiers voisins seulement est donnée sur la figure B.2 ($n_k=1$ dans la zone en pointillés et $n_k=0$ sinon). Dans ce cas, si l'on cherche à évaluer l'expression [B.10] pour différentes valeurs de Q , on voit que cette expression tend vers l'infini pour $Q_0=(\pi/a, \pi/a)$. Cela provient de ce que la surface de Fermi translatée de ce vecteur d'onde redonne la surface de Fermi (voir figure B.2).

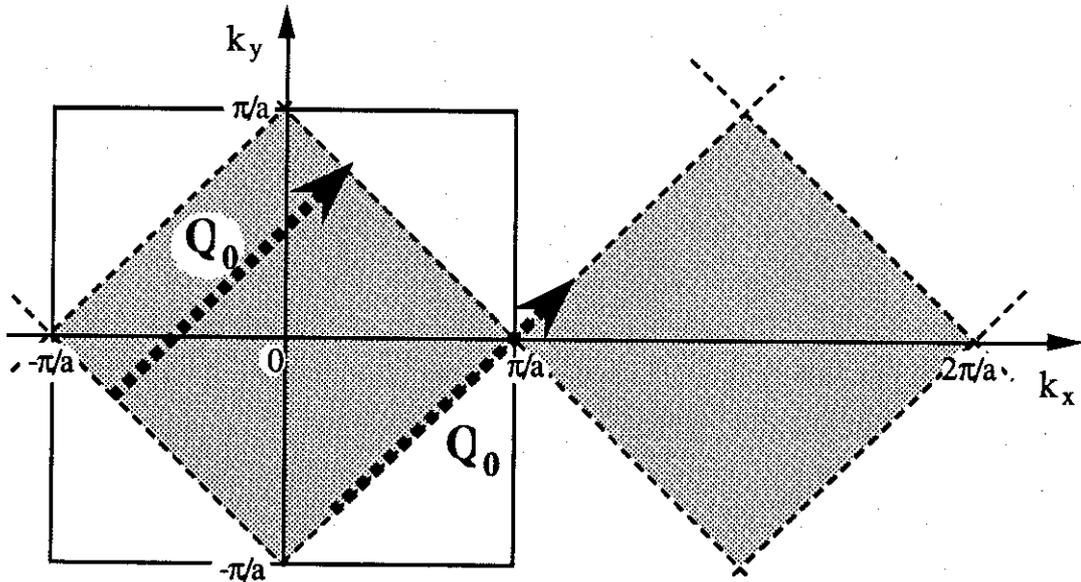


Figure B.2 : Etats occupés dans l'espace des k et parfait emboîtement de la surface de Fermi. Le grand carré blanc correspond à la première zone de Brillouin. La zone en pointillés correspond aux états occupés dans l'état paramagnétique et les tirets correspondent à la surface de Fermi que nous avons prolongée en dehors de la première zone de Brillouin. Q_0 est le vecteur d'onde de l'onde statique de densité de spin correspondant à l'antiferromagnétisme classique : $Q_0=(\pi/a, \pi/a)$.

Ce "parfait emboîtement" de la surface de Fermi est dû au caractère alterné du réseau et à la prise en compte des seules intégrales de saut entre sites premiers voisins. Nous appelons "réseau alterné", un réseau qui peut être scindé en deux sous-réseaux dont chaque site n'admet comme premiers voisins que des sites de l'autre sous-réseau. On vérifie que c'est bien le cas du réseau carré (voir figure B.3).

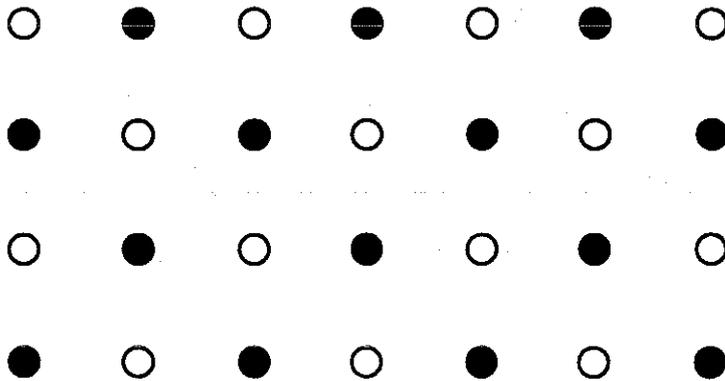


Figure B.3 : Sites d'un réseau carré. Les sites d'une couleur donnée (blanc ou noir) appartiennent à un même sous-réseau (R_+ ou R_-). Les réseaux R_+ et R_- forment une structure "alternée".

1.c L'instabilité par rapport à l'antiferromagnétisme

Le vecteur d'onde $Q_0=(\pi/a,\pi/a)$ correspond à l'antiferromagnétisme : le spin change de sens d'un sous-réseau à l'autre. La susceptibilité par rapport à l'antiferromagnétisme d'un gaz de n électrons par site sur un réseau carré est donc infinie. Dans l'approximation de Hartree-Fock, qui est valable dans la limite où le rapport U/t tend vers zéro, on prévoit donc l'instabilité de l'état paramagnétique par rapport à l'antiferromagnétisme pour une répulsion coulombienne arbitrairement faible.

Dans l'approximation de Hartree-Fock, un électron voit un potentiel proportionnel à la densité locale d'électrons de spins opposés. Ainsi, en présence de ferromagnétisme, les électrons voient un potentiel uniforme de hauteur différente pour chacun des spins. On a donc simplement un décalage des bandes partielles pour chacun des spins égal à Um où m est le moment magnétique par site.

En présence d'antiferromagnétisme, les électrons voient un potentiel alterné d'un sous-réseau à l'autre de vecteur d'onde $Q_0=(\pi/a,\pi/a)$. Par la théorie des perturbations, on en déduit l'apparition d'une discontinuité de la relation de dispersion $\epsilon(k)$

égale à Um (où m est l'"aimantation alternée") pour les valeurs de k vérifiant $k+Q_0=k+G$ où G est un vecteur du réseau réciproque. A cause du parfait emboîtement de la surface de Fermi pour la bande demi-pleine, il apparaît donc un gap en centre de bande quelque soit l'aimantation alternée. Ce gap situé au niveau de Fermi explique la stabilisation de l'antiferromagnétisme pour la bande demi-pleine, il implique aussi que le composé ordonné antiferromagnétiquement est isolant pour ce remplissage.

Comme nous le verrons en IV.A, l'état fondamental est aussi antiferromagnétique dans la limite du magnétisme localisé ($U/t \gg 1$). Ceci est encore une conséquence de la structure alternée de réseau et de la prise en compte des seules "interactions" entre sites premiers voisins : les liaisons antiferromagnétiques ne sont jamais frustrées (ainsi que d'une dimensionnalité suffisante du réseau : les fluctuations quantiques ne tuent pas l'ordre).

Le modèle de Hubbard semble donc bien expliquer la présence d'antiferromagnétisme dans le composé non dopé dans la limite des répulsions, U , très faibles et très fortes. Par extrapolation, on s'attend donc à ce que, pour une valeur quelconque du paramètre d'interaction, U , l'antiferromagnétisme soit stabilisé. Cependant, il n'y a pas de résultat exact dans ce cas général. Dans la partie qui suit, nous examinons qualitativement et quantitativement les propriétés du système pour une valeur quelconque de U .

B.2 La méthode de Gutzwiller

2.a La procédure générale

Au chapitre précédent, nous avons vu que la méthode de Gutzwiller permet d'obtenir un résultat plus physique que la méthode de Hartree-Fock lorsque la répulsion, U , n'est plus négligeable devant l'intégrale de saut, t . De plus, nous avons généralisé cette méthode au cas d'un état pouvant présenter des ondes statiques de densité de spin et de charge. Dans cette partie, nous appliquons cette méthode afin d'étudier les propriétés du composé non dopé et, plus particulièrement, l'antiferromagnétisme.

Décomposons le réseau carré en deux sous-réseaux alternés, R_+ et R_- , comme indiqué sur la figure B.3. Dans un état ordonné antiferromagnétiquement, le nombre moyen d'électrons d'un spin donné sur un site ne dépend que du sous-réseau auquel

appartient ce site. Soit n_v^σ , le nombre moyen d'électrons de spin σ sur un site du sous-réseau R_v . Lorsque l'on passe d'un sous-réseau à l'autre le nombre total d'électrons n'est pas changé tandis que l'aimantation change de signe. On a donc la relation :

$$n_v^\sigma = n_{-v}^{-\sigma} \quad [\text{B.11}]$$

Dans la suite, nous poserons :

$$n^+ = n_{+}^{\uparrow} = n_{-}^{\downarrow} \quad [\text{B.12}]$$

$$n^- = n_{-}^{\uparrow} = n_{+}^{\downarrow} \quad [\text{B.12}]$$

$$m = n^+ - n^- \quad [\text{B.13}]$$

Par symétrie, la probabilité de double occupation est indépendante du site considéré.

L'application de la formule générale [I.C.28] au cas de l'antiferromagnétisme donne :

$$\langle H \rangle / L = g_t \langle H_c \rangle_0 / L + Ud \quad \text{avec} \quad g_t = q_+ q_- \quad [\text{B.14}]$$

$$q_v = \frac{\sqrt{(1-n+d)(n_v-d)} + \sqrt{d(n_v-d)}}{\sqrt{n_v(1-n_v)}} \quad [\text{B.15}]$$

$\langle H \rangle / L$ est l'énergie totale par site dans l'état de Gutzwiller, $\langle H_c \rangle_0$ est l'énergie cinétique de l'état de particules indépendantes correspondant. L'expression [B.15] du facteur de renormalisation est la même que celle calculée exactement par Metzner dans la limite où le réseau est de dimension infinie / Metzner 89 /. D'autres généralisations à l'antiferromagnétisme de la méthode de Gutzwiller basées sur des dénombrements de configurations ne coïncident pas avec la limite des dimensions infinies / Zhang & al. 87 /.

Dans le cas où la bande est demi-pleine, les facteurs q_+ et q_- sont égaux. On obtient donc une expression de l'énergie formellement identique à celle obtenue dans le cas d'un état ferromagnétique (voir [I.B.22]), seule la dépendance de l'énergie cinétique non renormalisée, $\langle H_c \rangle_0$, par rapport au moment (uniforme ou alterné) introduit une différence entre les cas ferromagnétique et antiferromagnétique. Le cas du ferromagnétisme a déjà été examiné en détails par ailleurs / Nozières 86 /.

2.b Le facteur de renormalisation

La dépendance du facteur de renormalisation par rapport au moment magnétique, m , et au facteur de double occupation de site, d est :

$$g_t = \frac{4d(1-2d)}{1-m^2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{m^2}{(1-2d)^2}} \right) \quad [\text{B.16}]$$

L'énergie et l'aimantation du système s'obtiennent donc en minimisant l'expression [B.14] (où g_t est donné en [B.16]) par rapport à m et à d .

Dans cette expression, le terme d'interaction ne dépend que de d tandis que le facteur, $\langle H_c \rangle_0$, ne dépend que de m . La dépendance du facteur de renormalisation, g_t , par rapport à m et à d est schématisée sur la figure B.4. g_t est compris entre 0 et 1, s'annule en $d=0$ et atteint son maximum ($g_t=1$) pour : $d = \frac{1-m^2}{4}$.

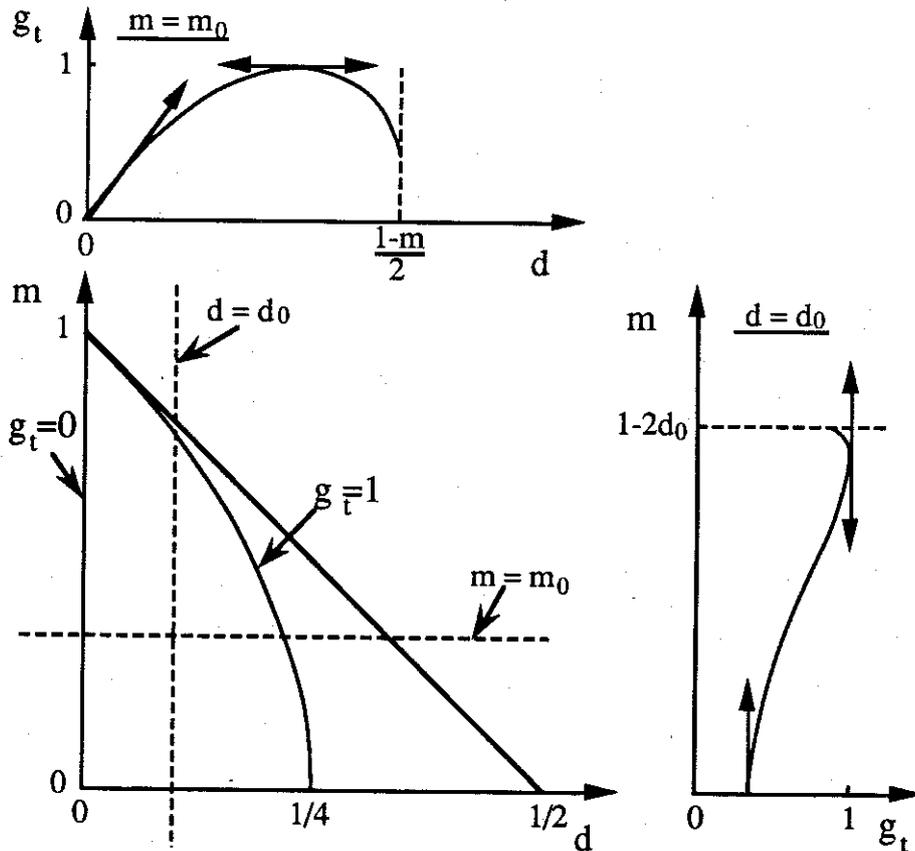


Figure B.4 : Variations du facteur de renormalisation, g_t , en fonction de d et m .

Lorsque la répulsion, U , est nulle, l'énergie est bien minimum pour $d=n^{\uparrow}n^{\downarrow}$ et $m=0$ (puisque $\langle H_c \rangle_0$ croît avec m). Lorsque la répulsion est infinie, d est nul. g_t est donc nul et l'énergie est indépendante de m . On retrouve bien le cas paramagnétique et dégénéré dont nous avons déjà parlé (I.B.2.b). Si U est strictement positif, le minimum d'énergie est nécessairement obtenu pour d strictement inférieur à $n^{\uparrow}n^{\downarrow}$ puisque l'énergie donnée en [B.14] est strictement croissante dans le cas contraire. Comme dans le cas paramagnétique, le système présente donc des corrélations ($d < n^{\uparrow}n^{\downarrow}$) pour toute valeur non nulle de la répulsion coulombienne.

1.c Faibles répulsions

Plaçons nous dans la limite des faibles moments ($m \rightarrow 0$). Le développement du facteur de renormalisation (donné en [B.16]), dans cette limite, est :

$$g_t(m) = g_{t0} (1 + \gamma m^2 + o(m^2)) \quad [B.17]$$

$$\text{avec } g_{t0} = 8d(1-2d) \quad \text{et} \quad \gamma = (1 - (1-2d)^2/4)$$

$o(m^2)$ est une fonction négligeable devant m^2 quand m tend vers 0. On vérifie :

$$0 < g_{t0}, \gamma < 1 \quad [B.18]$$

Rappelons que, dans l'expression de l'énergie totale ([B.14]), seul le terme cinétique dépend de m . Si l'on introduit la dépendance parabolique de l'énergie cinétique des électrons indépendants en fonction du moment, donnée en [B.3], il vient :

$$\langle H \rangle(m) - \langle H \rangle(0) = g_{t0} \left(\frac{1}{4\chi_0} + \gamma E_0 \right) + o(m^2) \quad [B.18]$$

Où E_0 est l'énergie du gaz d'électrons indépendants (paramagnétique).

Nous avons vu que, pour le réseau carré, la susceptibilité, χ_0 , par rapport à l'antiferromagnétisme est infinie. E_0 est une quantité négative, γ et g_{t0} sont positifs. On en déduit l'instabilité de l'état paramagnétique par rapport à l'antiferromagnétisme pour toute valeur strictement positive du paramètre d'interaction sauf si d est exactement nul auquel cas les énergies des deux états sont égales. Nous verrons plus bas que cette dernière éventualité n'arrive jamais pour l'antiferromagnétisme (si U est fini). On retrouve donc le résultat principal du modèle des électrons indépendants à savoir que le système est

antiferromagnétique pour U arbitrairement faible. Ce n'était pas le cas de tentatives anciennes de généralisation à l'antiferromagnétisme de la méthode de Gutzwiller / Ogawa & al. 76 ; Takano & al. 76; Florencio & al. 76 /

Notons que, dans notre cas particulier, la susceptibilité par rapport au ferromagnétisme est aussi infinie (à cause de la singularité de Van Hove logarithmique en centre de bande). Si l'on examine plus finement l'énergie du gaz d'électrons indépendants en présence d'un faible champ magnétique dont la variation spatiale est donnée en [B.4], on vérifie que l'énergie varie comme " $B_0 \ln B_0$ " si le champ est uniforme ($Q=0$) et comme " $B_0 (\ln B_0)^2$ " si le champ est alterné ($Q=(\pi/a, \pi/a)$). Dans la limite des faibles répulsions, c'est donc l'antiferromagnétisme qui est le plus stable.

1.d Répulsion quelconque

Examinons maintenant la dépendance de l'énergie en fonction de d pour une valeur donnée de m . Dans le cas où l'antiferromagnétisme est total ($m=1$), les électrons d'un spin donné se trouvent tous sur un même sous-réseau et ne peuvent donc sauter sur un site voisin sous peine de détruire l'antiferromagnétisme total. Dans ce cas, l'énergie et le facteur de double occupation sont donc nuls.

Fixons m à une valeur strictement inférieure à 1. La variation de g_t avec le facteur de double occupation a toujours l'allure obtenue dans le chapitre précédent pour le cas de la bande demi-pleine paramagnétique, avec une pente finie en $d=0$ (voir figure B.4). La valeur de cette pente est (d'après [B.16]) :

$$\left. \frac{\partial g_t}{\partial d} \right|_{d=0} = 4 \frac{1 + \sqrt{1-m^2}}{1-m^2} \quad [\text{B.19}]$$

La variation de l'énergie totale avec d s'obtient comme indiqué sur la figure I.B.3b et il y a donc une valeur critique du paramètre d'interaction au dessus de laquelle l'énergie est minimum en $d=0$. Cette valeur critique est donnée par :

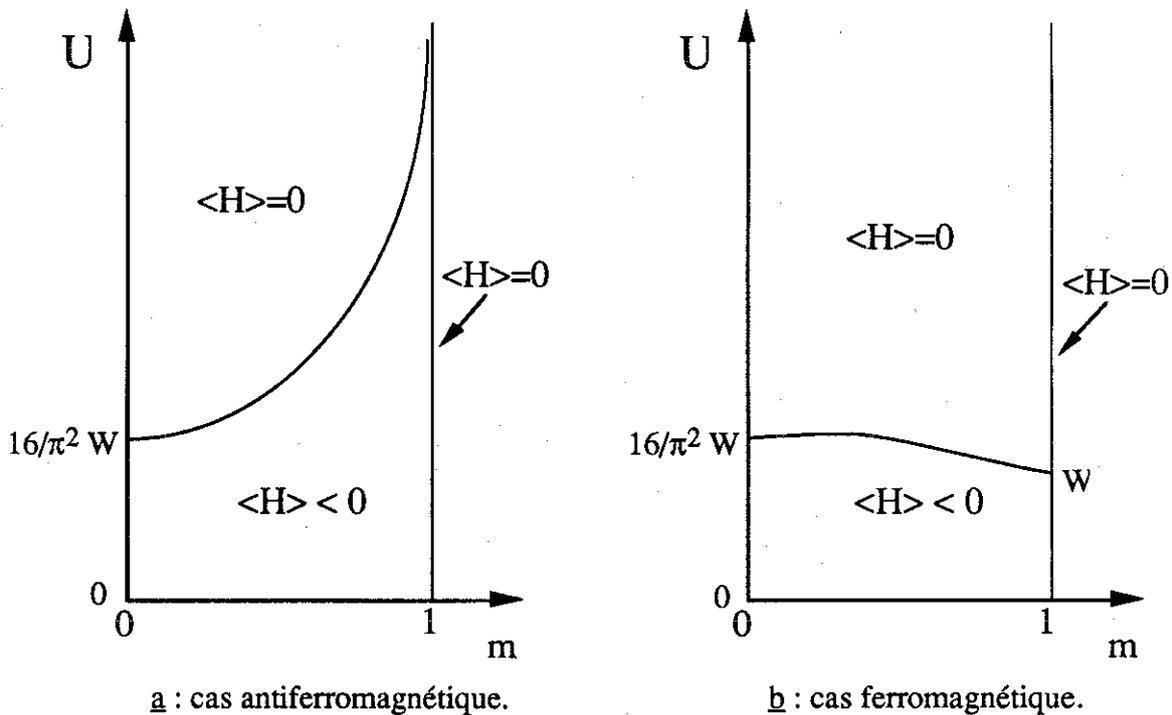
$$U_{c(m)} = \left. \frac{\partial g_t}{\partial d} \right|_{d=0} * \langle H_c \rangle_0 \quad [\text{B.20}]$$

La variation de $\langle H_c \rangle_0$ avec m dépend du type de magnétisme considéré (ferro- ou antiferromagnétisme). Nous avons vu que, pour le réseau carré, cette variation était négligeable devant m^2 pour m tendant vers zéro (susceptibilité infinie). Dans le cas opposé où m tend vers 1, on peut vérifier que, pour une aimantation alternée et uniforme respectivement :

$$\langle H_c \rangle_0^{\text{AF}} = 2t\sqrt{1-m} + o(\sqrt{1-m}) \quad [\text{B.21}]$$

$$\langle H_c \rangle_0^{\text{F}} = 4t(1-m) + o(1-m) \quad [\text{B.22}]$$

En insérant ces expressions dans [B.20], on trouve un comportement fondamentalement différent dans les cas ferro- et antiferromagnétique. La forme de $U_c(m)$ est schématisée sur les figures B.5a et B.5b pour les cas antiferromagnétique et ferromagnétique respectivement. On en déduit, dans le plan (m, U) , les régions pour lesquelles l'énergie minimisée par rapport à d est nulle et celles pour lesquelles cette énergie est strictement négative (voir figures B.5a et B.5b).



Figures B.5 : Courbe $U_c(m)$ pour les cas antiferromagnétique (a) et ferromagnétique (b). Cette courbe délimite deux régions pour lesquelles l'énergie totale est nulle ou strictement négative. L'énergie est nulle pour $m=1$. $W=8t$ est la largeur de bande. Pour le cas antiferromagnétique, $U_c(m)$ varie comme $W/(2\sqrt{1-m})$ quand m tend vers 1.

Etant donné que les propriétés du fondamental s'obtiennent en minimisant l'énergie par rapport à m , on déduit des figures B.5a et B.5b, les points suivant :

- Le cas ferromagnétique présente, comme le cas paramagnétique, une transition de Mott avec un facteur de double occupation et une énergie cinétique nuls au-dessus d'une certaine valeur critique de la répulsion coulombienne.

-Par contre, dans le cas antiferromagnétique, il n'y a pas une telle transition car, quel que soit U , il existe toujours des valeurs de l'aimantation alternée pour lesquelles l'énergie est strictement négative. Rappelons que l'état antiferromagnétique est isolant dès que U est non nul. Ce que montre la figure B.5a, c'est l'absence de seuil d'interaction au-dessus duquel les quantités, d et g_t s'annulent.

-La méthode de Gutzwiller permet donc de retrouver la stabilité de l'antiferromagnétisme par rapport au ferromagnétisme dans la limite des fortes répulsions.

- En outre, la figure B.5a montre que, pour une valeur finie de U , l'antiferromagnétisme n'est jamais total tandis qu'il tend à le devenir dans la limite des fortes répulsions.

Dans la limite des fortes répulsions coulombiennes, m tend vers 1, et la courbe $g_t(d)$ tend vers la droite :

$$y_{(d)} = \frac{2d}{1-m} \quad [\text{B.23}]$$

Dans cette limite, la minimisation se fait donc pour un facteur de double occupation, d , tendant vers $(1-m)/2$ ($d-(1-m)/2=0(1-m)$). Cela signifie que les corrélations et la renormalisation de l'énergie cinétique disparaissent. On retrouve donc, curieusement, l'approximation de Hartree-Fock. On vérifie aisément, en introduisant la dépendance de l'énergie cinétique dans cette limite ([B.21]) et en minimisant l'énergie totale par rapport à m :

$$m = 1 - \frac{4t^2}{U^2} + o\left(\frac{1}{U^2}\right) \quad [\text{B.24}]$$

$$\langle H \rangle = - \frac{4t^2}{U} + o\left(\frac{1}{U}\right) \quad [\text{B.25}]$$

Nous verrons plus loin (IV.A) que, dans la limite des fortes répulsions coulombiennes ($U \gg t$), le système est décrit par l'hamiltonien de Heisenberg quantique où le couplage J , entre spins premiers, voisins est donné par :

$$J = \frac{4t^2}{U} \quad [\text{B.26}]$$

L'énergie du fondamental de l'hamiltonien de Heisenberg est proportionnelle à J ($\cong -0.67J$). Les méthodes de Hartree-Fock et de Gutzwiller donnent donc la bonne

dépendance en U de l'énergie dans cette limite. Cependant, l'énergie est un peu sous-estimée et, surtout, elles donnent un antiferromagnétisme total ($m=1$) tandis que l'état fondamental réel, à deux dimensions, présente un moment alterné moyen nettement réduit ($m \approx 0.6$).

Comme dans le cas paramagnétique, la méthode de Gutzwiller appliquée à un état antiferromagnétique ne donne donc pas de très bons résultats dans la limite des fortes répulsions ($U \gg t$). Contrairement à la méthode de Hartree-Fock, elle prévoit bien la localisation des électrons (transition de Mott). Par contre, elle néglige les fluctuations quantiques des électrons localisés autour de leur position d'équilibre qui sont à l'origine d'une énergie cinétique non nulle dans les états para- et ferromagnétique et d'une réduction du moment alterné dans l'état antiferromagnétique.

1.e Résultats numériques

La minimisation numérique de l'équation [B.14] permet de mettre en lumière un certain nombre de points. Sur la figure B.6, nous avons porté le moment alterné moyen obtenu par les méthodes de Gutzwiller (trait plein) et de Hartree-Fock (tirets). On

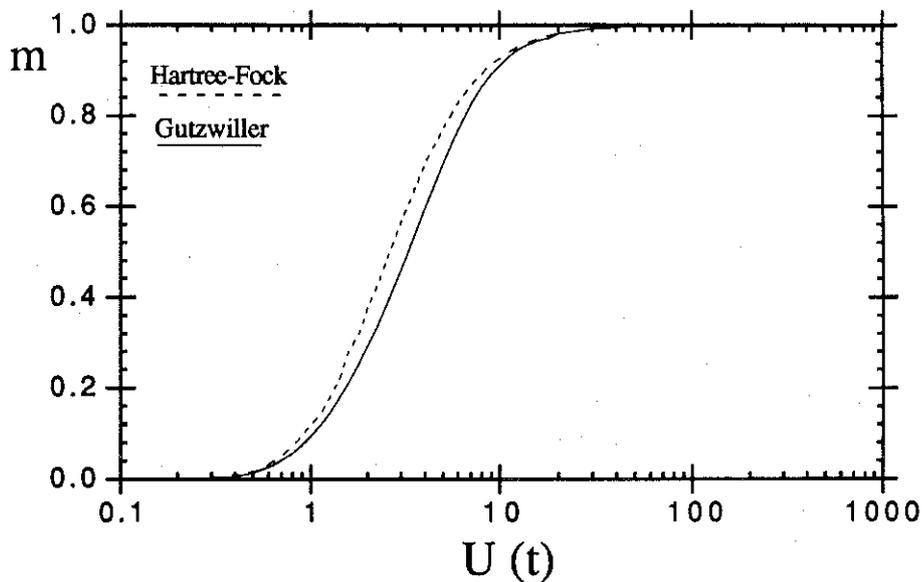


Figure B.6 : Moment alterné moyen pour le modèle de Hubbard avec la bande demi-pleine en fonction du paramètre d'interaction, U , dans les approximations de Hartree-Fock (tirets) et de Gutzwiller (trait plein). L'unité d'énergie est l'intégrale de saut, t , entre deux sites de cuivre premiers voisins.

note que c'est seulement pour U de l'ordre de la largeur de bande, $W=8t$, que cette quantité diffère sensiblement de 0 ou de 1. Les deux méthodes utilisées donnent des résultats extrêmement voisins, le moment étant légèrement abaissé par la prise en compte des corrélations pour $U \cong W/2$ (le facteur de renormalisation de l'énergie cinétique, g_t , ne diffère sensiblement de 1 que dans cette région où il reste supérieur à 0.95).

Le moment alterné est surestimé pour $U \gg W$ mais il est exact pour $U \ll W$. Pour avoir un moment de $0.5\mu_B$, il est nécessaire d'avoir $U > W/2$.

Sur la figure B.7, nous avons porté la différence avec l'énergie de l'état antiferromagnétique (calculée par la méthode de Gutzwiller), des énergies obtenues en minimisant par rapport à certains paramètres variationnels seulement. Ainsi, on a les approximations "Gutzwiller paramagnétique" : minimisation par rapport à d seul, "Hartree-Fock antiferromagnétique" : minimisation par rapport à m seul, "Hartree-Fock paramagnétique" : pas de minimisation ($m=0, d=n^\uparrow n^\downarrow$).

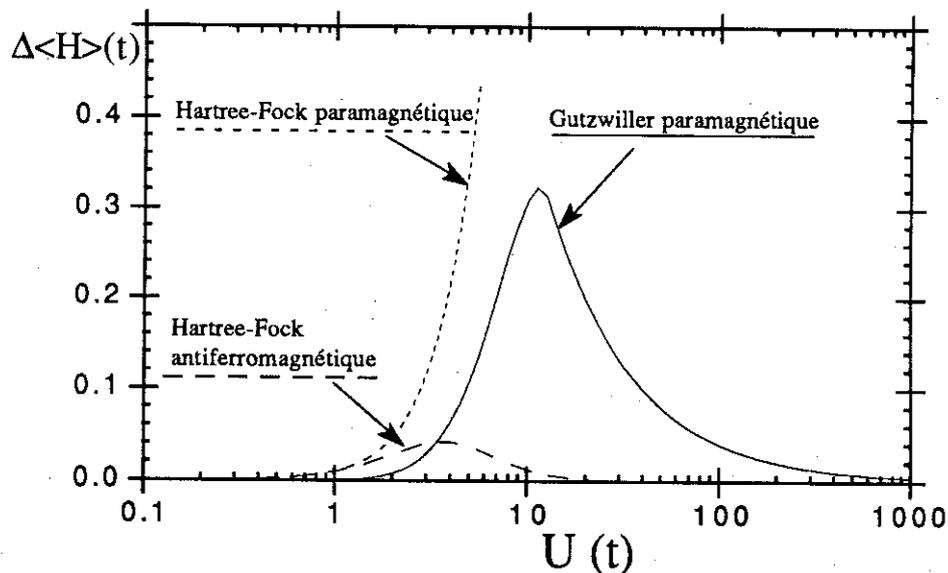


Figure B.8 : Energie gagnée par la prise en compte de l'antiferromagnétisme (trait plein), des corrélations (tirets) et par la prise en compte des deux (pointillés).

On retrouve la très faible différence avec la méthode de Hartree-Fock (tirets) tandis que que la méthode de Hartree-Fock sans prise en compte de l'antiferromagnétisme (pointillés) donne une énergie qui tend rapidement vers l'infini dans la limite des U forts.

La courbe en trait plein (Gutzwiller paramagnétique) représente la stabilité de l'antiferromagnétisme. Cette quantité est souvent associée au couplage effectif entre spins. Cependant, il faut prendre garde à ce que l'on ne prend pas en compte, par cette approche, l'énergie magnétique dans la phase paramagnétique (ordre à courte distance). Ainsi, cette énergie est une estimation par excès de la température de Néel. La stabilisation de l'antiferromagnétisme présente un maximum marqué en $U \cong 3W/2 \cong U_c$ où U_c est la répulsion correspondant à la transition de Mott pour le cas paramagnétique.

En outre, cette énergie tend très rapidement vers zéro dans la limite des faibles répulsions. Pour $U < W/4$, on trouve, $T_N < 100$ K. A l'instar du moment moyen observé dans La_2CuO_4 , la température de Néel importante dans ce composé ($\cong 220\text{K}$) indique que la répulsion coulombienne dans y est au moins de l'ordre de la largeur de bande. Plus généralement, il apparaît que l'argument selon lequel un réseau alterné avec un électron par site est antiferromagnétique pour une répulsion coulombienne arbitrairement faible est assez "théorique" (m et T_N tendent rapidement vers zéro quand U tend vers zéro).

II.C LE COMPOSE DOPE

L'ordre antiferromagnétique observé dans le composé non dopé La_2CuO_4 disparaît très rapidement avec le dopage : la température de Néel s'annule pour un dopage d'environ 3% / Johnston & al. 87 /. Une structure de "verre de spin" a été observée entre 3 et 5% / Harshman & al. 88 / et, au delà de 5%, la supraconductivité commence à apparaître (voir figure 0.2) / Aharoni & al. 88 /. Cependant, d'importantes corrélations antiferromagnétiques de courte portée semblent persister dans la phase supraconductrice / Birgeneau & al. 88 /. En outre, d'autres phénomènes mal compris semblent se produire dans le composé dopé.

C.1 L'antiferromagnétisme

1.a L'approximation de Hartree-Fock

Dans la limite des très faibles répulsions, $U \ll W$, le modèle des électrons indépendants prévoit la disparition rapide de l'antiferromagnétisme avec le dopage. En effet, comme l'illustre la figure C.1, le parfait emboîtement de la surface de Fermi est une spécificité de la bande demi-pleine. Lorsque le remplissage s'éloigne de 1, la susceptibilité

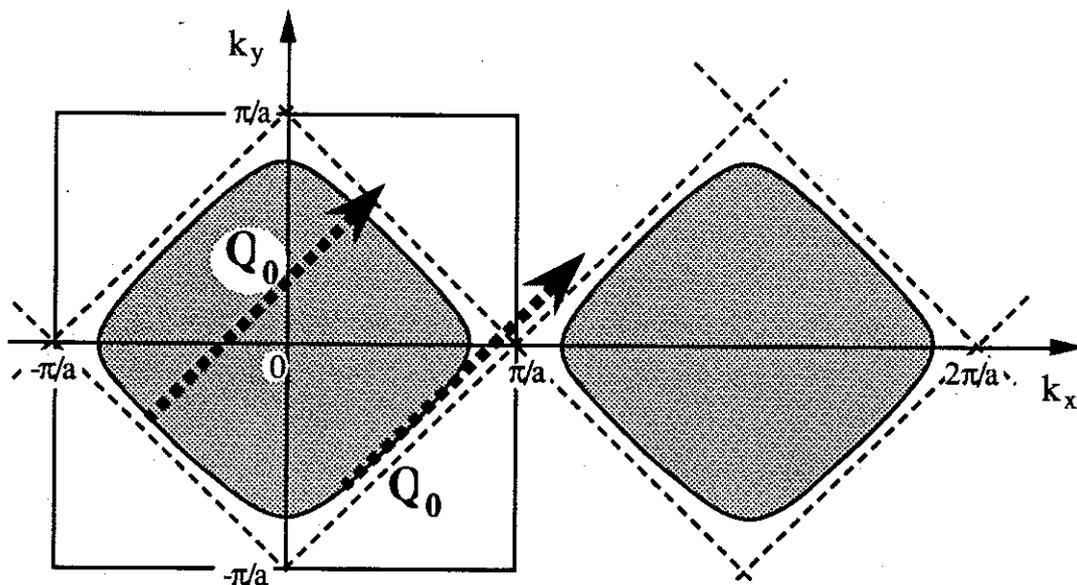


Figure C.1 : non "emboîtement" de la surface de Fermi pour un remplissage légèrement inférieur à 1. Les pointillés représentent les états occupés dans l'espace des k , les tirets correspondent à la surface de Fermi pour la bande demi-pleine ($n=1$). $Q_0 = (\pi/a, \pi/a)$ est le vecteur d'onde de l'onde statique sinusoïdale de densité de spin correspondant à l'antiferromagnétisme classique (voir figure B.2).

par rapport à l'antiferromagnétisme est finie et diminue. C'est là l'explication adoptée pour expliquer la destruction de l'ordre antiferromagnétique à faible dopage par les auteurs qui supposent que la répulsion coulombienne est faible devant $W / \text{Labbé } 89$; Friedel 88/.

Cependant, comme nous l'avons vu lors de l'étude du composé non dopé, la répulsion coulombienne n'est probablement pas négligeable devant W dans les oxydes supraconducteurs. D'où l'intérêt d'examiner la question en adoptant la méthode de Gutzwiller. Avant de présenter les résultats obtenus, nous résumons le principe du calcul.

1.b Principe du calcul

Le remplissage de la bande dans le composé dopé est compris entre 0 ($x=100\%$) et 1 ($x=0\%$). Si l'on raisonne en termes de trous, le remplissage est compris entre 1 et 2. En ce qui nous concerne, nous envisageons tous les remplissages possibles ($0 < n < 2$). En fait, dans le cadre du modèle de Hubbard, la bande est symétrique. Il suffit donc de faire les calculs pour n compris entre 0 et 1 et de compléter par symétrie. On vérifie aisément que l'énergie totale, E , vérifie la transformation :

$$E(n) = E(2-n) + U(n-1) \quad [C.1]$$

Pour commencer, il est nécessaire de définir un état variationnel de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$ auquel on ajoutera ensuite la possibilité de corrélations. Afin de permettre l'antiferromagnétisme, nous définissons $|\Psi_0\rangle$ comme l'état fondamental du gaz d'électrons indépendants en présence d'un potentiel alterné effectif. Plus précisément, l'"hamiltonien effectif" de particules indépendantes est obtenu en rajoutant au terme d'énergie cinétique, un potentiel alterné d'un sous-réseau à l'autre et changeant de signe avec le spin :

$$H_V = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \chi_{ij}^\sigma + \chi_{ji}^\sigma + D \sum_{i, \sigma} \lambda_\sigma (-1)^{Q_0 \cdot R_i} n_{i\sigma} \quad [C.2]$$

$$\text{avec } Q_0 = (\pi/a, \pi/a) ; \quad \lambda_\uparrow = +1 ; \lambda_\downarrow = -1$$

Nous avons adopté les notations habituelles (voir I.A.2). Il est commode d'adopter l'amplitude du "potentiel alterné", D , comme paramètre variationnel (à la place de m).

Conformément au principe de la méthode de Gutzwiller, il suffit de minimiser l'expression [B.14] par rapport à D (qui détermine l'état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$) et par rapport à d (qui spécifie plus complètement l'état de Gutzwiller, $|\Psi\rangle$). Le calcul comprend essentiellement deux parties. Premièrement : l'évaluation des grandeurs moyennes, n_V et $\langle H_c \rangle_0$, dans l'état $|\Psi_0\rangle(D)$. Deuxièmement : La minimisation par rapport à d et à D . Les grandes lignes du calcul sont portées en appendice.

1.c Résultats

Sur la figure C.3, Nous avons porté le domaine de stabilité de l'antiferromagnétisme par rapport à la phase paramagnétique dans le plan (n,U) . A titre comparatif, nous avons également porté la limite obtenu par la méthode de Hartree-Fock (tirets).

Il apparaît que ce domaine est nettement réduit par la prise en compte des corrélations lorsque U n'est plus négligeable devant W . Ainsi, pour $U=W$ le dopage critique détruisant l'antiferromagnétisme est égal à 20% au lieu de 45% dans le modèle des électrons indépendants. En outre, ce dopage critique présente une valeur maximum (22%) atteinte au voisinage de la transition de Mott de la bande demi-pleine paramagnétique ($U_c \cong 3/2W$).

On peut comprendre la réduction du domaine de stabilité de l'antiferromagnétisme lorsque l'on prend en compte les corrélations, de la façon suivante. Soit, $\Delta E_{(m)}^g$, l'énergie gagnée par la prise en compte des corrélations pour le moment alterné, m :

$$\Delta E_{(m)}^g = \langle H \rangle_{(m,n,n)} - \text{Min}_{\{d\}}(\langle H \rangle_{(m,d)}) \quad [C.3]$$

Lorsque l'antiferromagnétisme est total, cette quantité est nulle puisque les électrons de spins opposés ne se trouvent jamais sur le même site. En fait, il a été vérifié numériquement que cette quantité est une fonction décroissante de m quelque soit le remplissage / Nguyen Manh (90) /. L'abaissement d'énergie par le paramètre m (stabilisation de l'antiferromagnétisme) est donc plus faible si l'on prend en compte les corrélations. La plage antiferromagnétique étant définie comme la région où cette stabilisation est positive, cette plage est donc nécessairement réduite par le passage de la minimisation de Hartree-Fock (par rapport à m seul) à la minimisation de Gutzwiller (par rapport à m et à d).

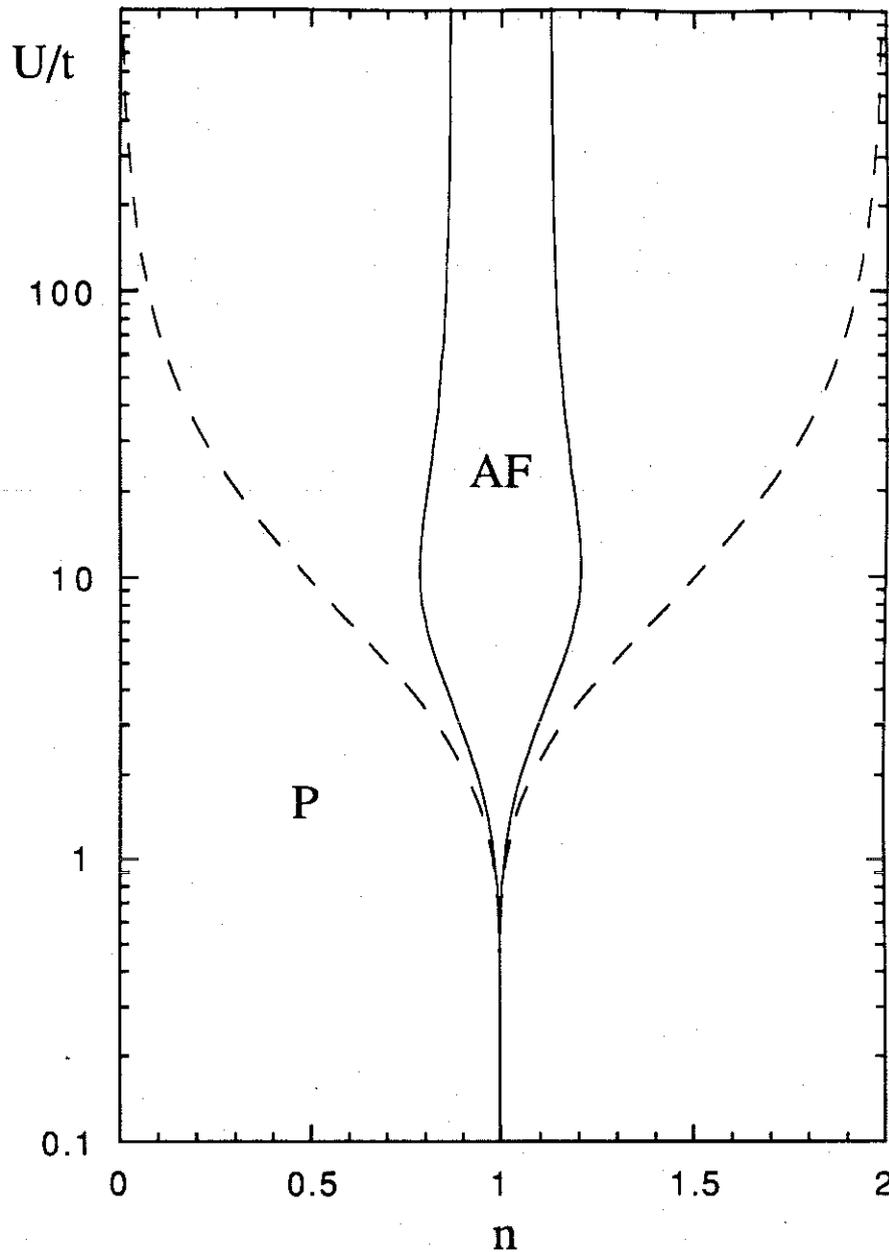


Figure C.3 : Limites de stabilité de la phase antiferromagnétique (en centre de bande) par rapport à la phase paramagnétique, dans l'approximation de Gutzwiller (trait continu) et dans l'approximation de Hartree-Fock (tirets). n est le nombre d'électrons par site, U et t sont respectivement la répulsion coulombienne intrasite et l'intégrale de saut.

Le diagramme de phase de la figure C.3 est qualitativement semblable à celui obtenu par Kotliar et Ruckenstein pour une bande plate ($\rho(\epsilon)=c^{ste}$ pour $\epsilon < W/2$) et par Metzner, pour une bande Gaussienne ($\rho(\epsilon)=Ke^{-\alpha\epsilon^2}$) / Kotliar & Ruckenstein 86 ; Metzner 89 /. Rappelons que ces auteurs retrouvent la méthode de Gutzwiller en partant respectivement d'un formalisme de Bosons esclaves et d'un réseau de dimension infinie. Le choix de la densité d'états ne change pas qualitativement le résultat.

Kotliar et Ruckenstein ont aussi déterminé la limite de stabilité du ferromagnétisme par rapport à l'état paramagnétique (pour une bande elliptique). Ils trouvent que le ferromagnétisme n'est stabilisé que pour des valeurs très élevées du paramètre de répulsion coulombienne $U > 6W$. La plage "ferromagnétique" est alors plus large que la plage antiferromagnétique. Lorsque U est infini, la méthode de Gutzwiller indique la stabilité du ferromagnétisme fort au voisinage de la bande demi-pleine / Nozières 86 /. Ce dernier point est en accord avec le théorème de Nagaoka / Nagaoka 66 /.

Dans la limite des fortes répulsions, l'expression de l'énergie totale par la méthode de Gutzwiller donne les "critères de Stoner" approximatifs :

$$\chi_0 U^* > 1 \quad [C.4]$$

où χ_0 est la susceptibilité réduite (pour le ferro- ou l'antiferromagnétisme) et où U^* est donné, pour le ferromagnétisme et l'antiferromagnétisme respectivement, par :

$$U_F^* = 4 \frac{E_{c0} + (1+|x|) \epsilon_f}{(1+|x|)^2} \quad [C.5]$$

$$U_{AF}^* = 2 \frac{E_{c0}}{(1+|x|)^2} \quad [C.6]$$

x est le dopage ($x=n-1$), E_{c0} et ϵ_f sont l'énergie cinétique par site et le niveau de Fermi pour le gaz d'électrons indépendants (paramagnétique). On trouve un domaine de stabilité plus grand pour le ferromagnétisme.

La figure C.4 montre une décroissance continue du moment alterné moyen avec le dopage (pour différentes valeurs de U). Sur la figure C.5, nous avons porté l'énergie totale en fonction du remplissage dans différentes approximations (pour $U=W$). On retrouve bien la plus faible stabilisation de l'antiferromagnétisme par la méthode de Gutzwiller que par la méthode de Hartree-Fock déjà expliquée plus haut. Cette stabilisation décroît régulièrement avec le dopage. On note surtout, un important abaissement d'énergie par les corrélations dans une large gamme de remplissage, le cas de la bande demi-pleine antiferromagnétique apparaissant comme une exception.

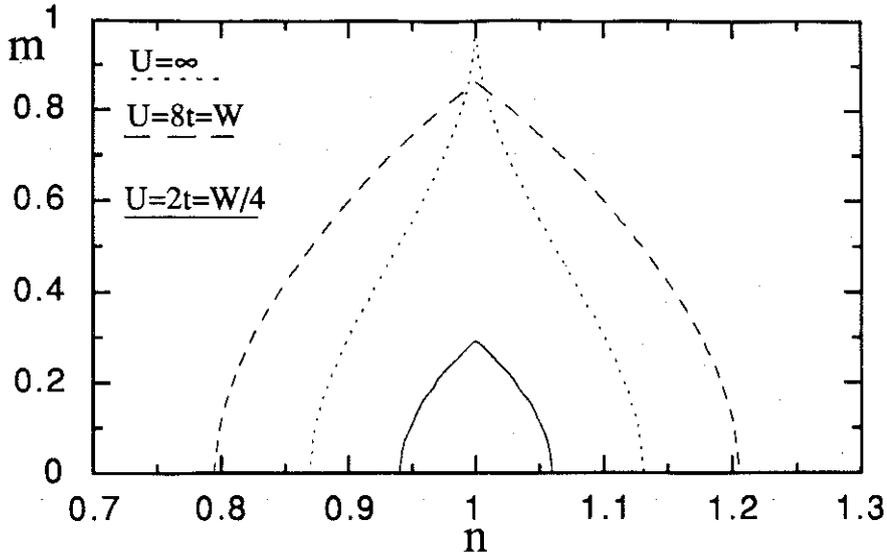


Figure C.4 : Moment alterné moyen, m , en fonction du remplissage, n , pour quelques valeurs du paramètre de répulsion coulombienne, U .

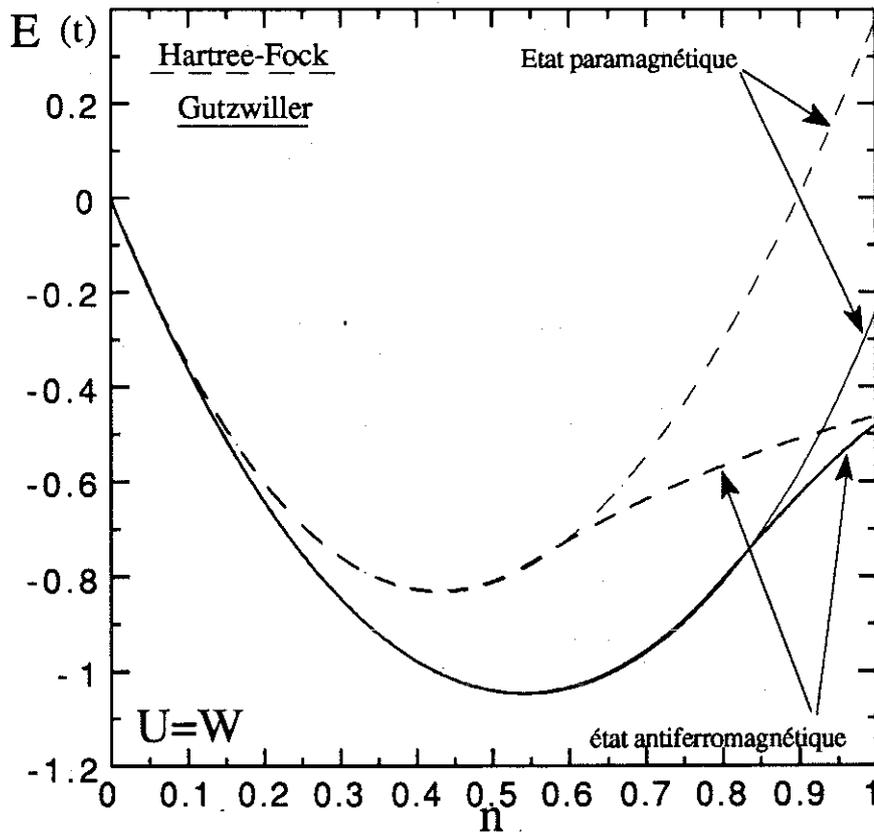


Figure C.5 : Energie totale, E , en fonction du remplissage, n , de la bande et pour une répulsion coulombienne égale à la largeur de bande, $W = 8t$, dans différentes approximations.

Le rapport, $d/n^{\uparrow}n^{\downarrow}$, représentant l'importance des corrélations est porté en fonction du remplissage sur la figure C.6 tandis que la figure C.7 représente le facteur de renormalisation de l'énergie cinétique. Ces deux figures illustrent l'importance des corrélations et leur forte réduction au voisinage de la bande demi-pleine lorsque l'état est antiferromagnétique.

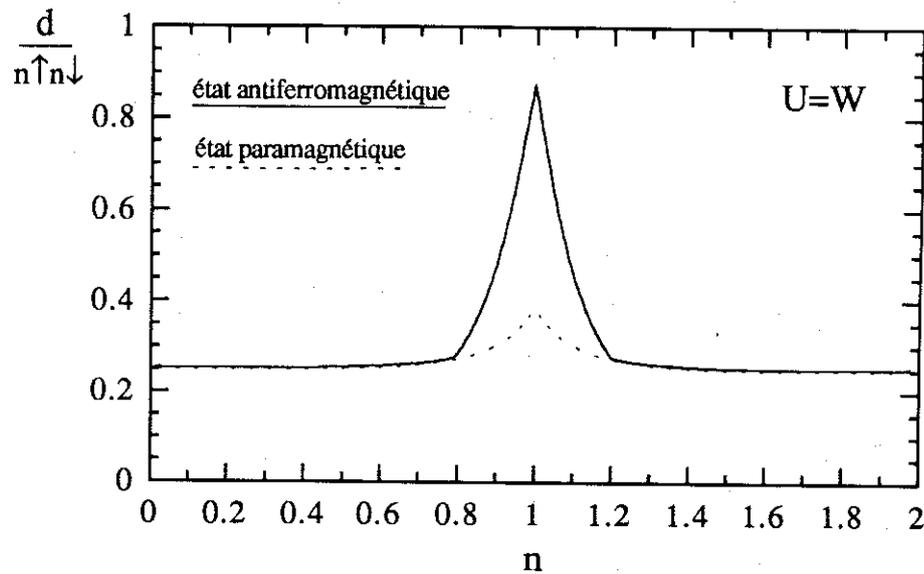


Figure C.6 : Facteur de corrélation intrasite, $d/n^{\uparrow}n^{\downarrow}$, en fonction du remplissage, n , pour la répulsion $U=W$.

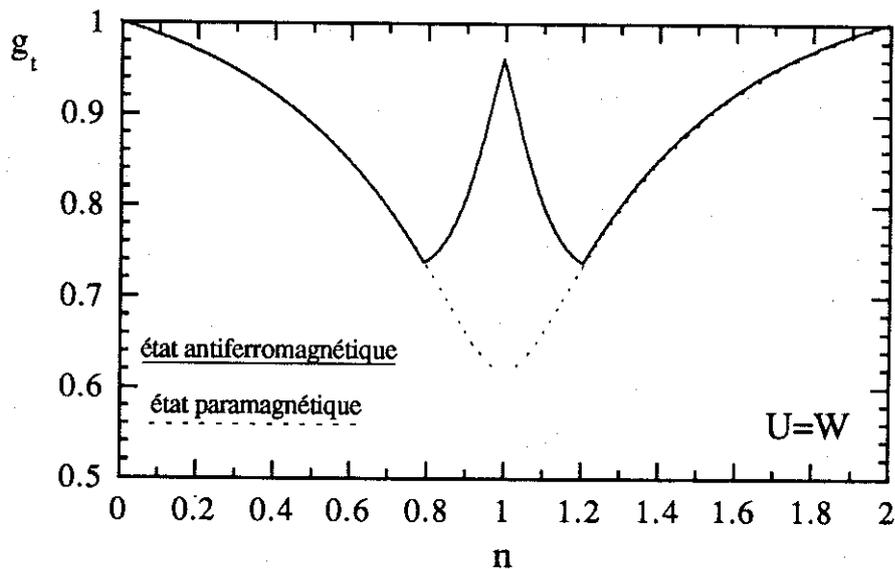


Figure C.7 : Facteur de renormalisation de l'énergie cinétique, g_t , en fonction du remplissage, n pour la répulsion $U=W$.

1.d Interprétation

Au vu du diagramme de la figure C.3, il semble que la réduction de la plage antiferromagnétique par la prise en compte des corrélations soit insuffisante pour expliquer la rapide disparition de l'ordre antiferromagnétique avec le dopage dans les oxydes supraconducteurs $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ si l'on admet que le paramètre de répulsion coulombienne, U , est de l'ordre de la largeur de bande, W . Cette conclusion est néanmoins quelque peu hâtive et afin d'interpréter correctement les résultats, il est nécessaire de rappeler un certain nombre de points.

L'ordre antiferromagnétique observé expérimentalement (voir figure B.1) est, bien entendu, présent à température non nulle. Or, d'après le théorème de Mermin et Wagner, à température non nulle, il ne peut y avoir d'ordre antiferromagnétique à longue distance dans un système de dimension inférieure ou égale à deux / Mermin & Wagner 66 /. L'explication de l'ordre antiferromagnétique observé doit donc nécessairement faire intervenir le couplage entre les différents plans CuO_2 ce qui n'est pas le cas de notre modèle.

De plus, dans notre calcul à température nulle, nous nous sommes bornés à faire varier, hormis le facteur de double occupation, d , un seul paramètre variationnel introduisant un ordre antiferromagnétique à longue distance. Or, même à température nulle, le composé dopé peut ne présenter qu'un ordre antiferromagnétique à courte distance. Notre calcul montre que, pour une large gamme de dopage, un état présentant un ordre antiferromagnétique à longue distance a une énergie plus basse que l'état paramagnétique simple. Cela suggère sinon l'existence d'un ordre antiferromagnétique (à distance finie) du moins la nécessité de chercher des formes plus générales de magnétisme que l'ordre ferro- ou antiferromagnétique à longue portée.

C.2 Autres formes plus complexes de magnétisme

2.a Le ferrimagnétisme de Penn

Reprenons la partition du réseau carré en deux sous-réseaux (voir figure B.3). Un cas plus général que le ferro- ou l'antiferromagnétisme est la superposition des deux c'est-à-dire le ferrimagnétisme auquel on peut ajouter la possibilité d'un nombre d'électrons différent d'un sous-réseau à l'autre. L'état variationnel de particules indépendantes correspondant peut être pris comme le fondamental du gaz d'électrons sans interaction en présence d'un potentiel caractérisé par une énergie de site qui varie avec le spin et le sous-réseau.

Des calculs dans l'approximation de Hartree-Fock sur un réseau cubique simple / Penn 66 / et dans une approximation voisine de celle de Gutzwiller pour une bande plate / Oles 82 / indiquent que, pour de faibles dopages, l'état de plus basse énergie est ferrimagnétique. Plus exactement, il s'ajoute à l'antiferromagnétisme une composante ferromagnétique et une onde statique de densité de charge qui augmentent progressivement avec le dopage de façon à maintenir le niveau de Fermi dans le "gap antiferromagnétique" pour l'un des deux spins seulement (voir figure C.8). Ce dernier point explique sans doute la stabilisation de cette phase. Cependant, la présence d'une onde statique de densité de charge nécessite la prise en compte d'une distorsion induite du réseau ce qui n'a pas été fait.

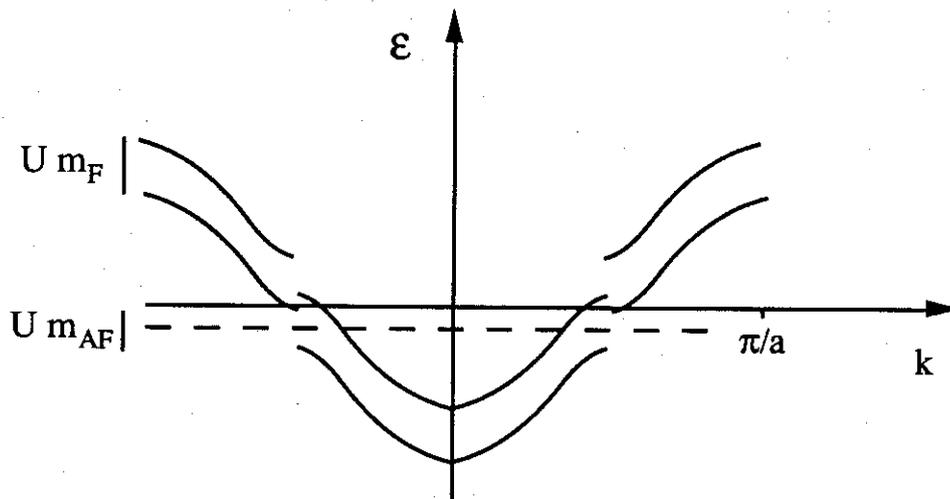


Figure C.8 : Allure de la relation de dispersion selon la direction (1,1), dans l'approximation de Hartree-Fock, en présence d'un moment d'ensemble, m_F , et d'un moment alterné, m_{AF} . La ligne en tirets représente le niveau de Fermi dans la phase ferrimagnétique de Penn.

La solution ferrimagnétique que nous venons d'envisager est encore une solution bien particulière. Il s'agit, en effet, d'une superposition d'ondes statiques de densité de spin ou de charge de longueur d'onde 0 ou $Q_0=(\pi/a,\pi/a)$.

2.b L'onde de spin incommensurable

Afin de se faire une idée de la forme du fondamental en présence de dopage, il est intéressant de faire une analogie avec le cas bien connu des systèmes unidimensionnels.

On sait qu'à basse température, ces systèmes présentent systématiquement une onde statique de densité de spin ou de charge dont la longueur d'onde est reliée au remplissage de la bande et est, en général, incommensurable avec le réseau (transition de Peierls). En fait, cette onde statique ouvre un gap exactement au niveau de Fermi. C'est ce qui explique la stabilisation de ces surstructures et le caractère isolant de ces systèmes.

A priori, on s'attend à ce que ce phénomène soit spécifique aux systèmes unidimensionnels car c'est seulement dans ces systèmes qu'une onde statique de faible amplitude et de longueur d'onde quelconque ouvre toujours un gap au niveau de Fermi. Toutefois, l'application du critère de Stoner ([B.8]), pour le réseau carré démontre la stabilité d'ondes statiques de densité de spin de longueur d'onde $(\pi/a, (\pi \pm x)/a)$ pour des dopages, x , suffisamment élevés et des répulsions, U , suffisamment faibles / Schulz 90 /.

Une telle onde statique se traduit par une lente modulation de l'antiferromagnétisme selon un des axes principaux de réseau dont la longueur d'onde est inversement proportionnelle au dopage. Ce phénomène se produit aussi à trois dimension / Penn 66 / où il donne lieu à la structure antiferromagnétique incommensurable du chrome. D'ailleurs, dans les oxydes supraconducteurs, un ordre incommensurable a été observé / Birgeneau & al. 90 /.

2.c Les solitons

Reprenons l'analogie avec le cas à une dimension. En fait, l'onde statique de densité de spin n'est stabilisée qu'au-dessus d'un certain dopage. Pour des dopages plus faibles, on stabilise une structure de type "soliton".

L'état ordonné antiferromagnétiquement présente une dégénérescence fondamentale : il y a deux états antiferromagnétiques de même énergie qui ne diffèrent que par le signe de l'aimantation de l'un des deux sous-réseaux. A une dimension, un soliton est une paroi séparant deux régions qui se trouvent chacune dans l'un de ces deux états (voir figure C.9a).

Lorsque la bande est demi-pleine, une telle structure est une excitation élémentaire de l'état fondamental antiferromagnétique / Su & al. 79 /. Mais il se trouve que lorsque l'on ajoute un électron supplémentaire (ou un trou), l'état fondamental du système consiste en un soliton au niveau duquel le porteur supplémentaire est localisé voir (figure C.9b). Dans la suite, nous limitons la discussion au cas d'un dopage en trous (comme dans $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$), la situation étant symétrique pour un dopage en électrons.

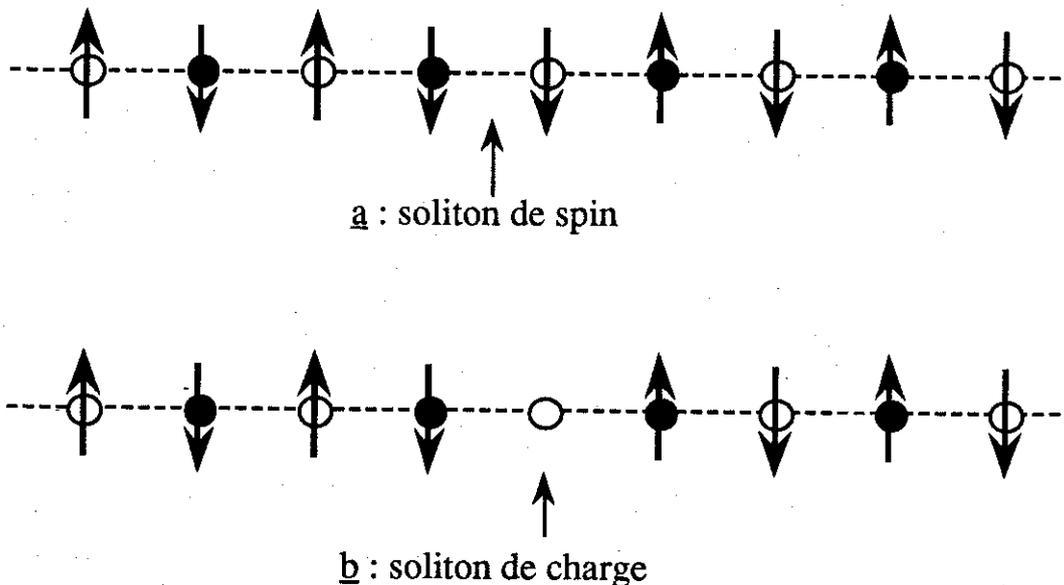


Figure C.9 : Soliton sur une chaîne linéaire de spins ordonnés antiferromagnétiquement. La couleur des sites (blanc ou noir) permet de repérer un sous-réseau. Un soliton simple est représenté en **a** (paroi entre deux régions ordonnées antiferromagnétiquement). Si l'on place un trou au niveau de cette frontière (en **b**), on obtient un "soliton de charge" où le spin s'annule avant de se "retourner" .

Dans l'approximation de Hartree-Fock, la présence d'un soliton se traduit par un état localisé dont l'énergie se trouve au centre du gap antiferromagnétique. On comprend dès lors la stabilité du soliton de charge puisque placer un porteur supplémentaire au centre du gap coûte moins d'énergie que de le placer au-dessus.

Nous avons vu qu'à cause du parfait emboîtement de la surface de Fermi pour le réseau carré avec un électron par site, l'antiferromagnétisme ouvre toujours un gap. Le système se comporte donc, exceptionnellement, de façon "unidimensionnelle". D'où l'idée de généraliser les solitons au cas du réseau carré. Cette idée a été appliquée avec succès par un certain nombre d'auteurs utilisant la méthode de Hartree-Fock / Schulz 89 ; Poilblanc & Rice 88 ; Zaanen & Gunnarsson 89 /.

Ces calculs montrent que, dans l'état de plus basse énergie, les trous ajoutés par le dopage sont regroupés spatialement dans des bandes larges de quelques sites le long de lignes de séparation (les "solitons") entre domaines antiferromagnétiques à raison de un trou par site le la ligne. Ces lignes ont tendance à s'aligner parallèlement et constituent donc un réseau dont la densité croît avec le dopage. On retrouve donc une onde incommensurable dont la longueur d'onde est inversement proportionnelle au dopage mais qui n'est pas, cette fois-ci, une simple onde de spin sinusoïdale. Cependant, les calculs faits ne prennent pas en compte la répulsion coulombienne à longue distance.

2.d Les spin bags

Comme le montre la figure C.4, la présence de porteurs supplémentaires a tendance à réduire le moment alterné moyen. Schrieffer, Wen et Zhang ont émis l'idée selon laquelle un porteur supplémentaire abaisserait l'amplitude du moment alterné dans son voisinage seulement. Il crée ainsi un domaine où son énergie est plus faible, où il s'est donc piégé lui même et qui se déplace avec lui. C'est l'idée de spin bag / Schrieffer & al.88 /.

De plus, Schrieffer et al. ont trouvé que les spin bags ont tendance à s'attirer (deux porteurs ayant intérêt à partager le même spin bag). Ils ont vu là une explication possible de la supraconductivité. Cependant, cette attraction peut aussi conduire à une séparation de phases du système, tous les spin bags se condensant en une phase riche en trous.

2.e Instabilité par rapport à la séparation de phases

La principale objection à une séparation de phases est son coût en énergie électrostatique important. En effet, a priori, les différents domaines sont chargés électrostatiquement (positivement pour les domaines riches en trous et négativement pour les domaines sans trou). Rappelons que le modèle de Hubbard néglige complètement l'interaction électrostatique à longue portée. Cette instabilité peut donc être considérée comme un artéfact du modèle.

Cependant, cette objection peut être levée si l'on admet que les impuretés, donatrices de trous, sont suffisamment mobiles pour pouvoir suivre les inhomogénéités de la densité de porteurs et prévenir ainsi toute densité volumique de charge macroscopiquement non nulle. La séparation de phases peut se produire si la température est suffisamment élevée pour que les impuretés soient mobiles et suffisamment faibles pour que le gain d'énergie dû à la séparation de phases ne soit pas masqué par les fluctuations thermiques. Ainsi des domaines pourraient se former à température assez élevée et persister à température plus faible. Une structure en domaines a d'ailleurs été observée dans le composé $\text{La}_2\text{CuO}_{4-y}$ / Jorgensen & al. 88 /.

Si l'on examine attentivement l'énergie en fonction du remplissage portée sur la figure C.5, on note que la courbe est concave ($\partial^2 E / \partial n^2 < 0$) dans la région antiferromagnétique. Considérons une densité électronique, n_0 , située dans cette région. L'énergie d'un échantillon de densité homogène, n_0 , est alors supérieure à la somme des énergies de deux échantillons totalisant le même nombre d'électrons mais avec des densités légèrement différentes de l'un à l'autre.

Dans le cadre de notre modèle, on en déduit l'instabilité du système par rapport à la séparation de phases. Dans la limite où les différents domaines sont de dimension macroscopique, les parois de séparation entre ces domaines représentent, en effet, une fraction négligeable de l'énergie.

Afin de déterminer quelles sont les densités de porteurs dans les différentes phases et le gain d'énergie, ΔE , correspondant à la séparation de phases, nous avons schématisé sur la figure C.10, l'allure de l'énergie en fonction du remplissage. Traçons les droites passant par le point " $n=1$ " et tangentes à la courbe $\langle H \rangle_{(n)}$ (voir figure C.10). On obtient ainsi deux droites, D^- et D^+ , tangentes à la courbe en une valeur inférieure à 1, n^- , et supérieure à 1, n^+ , respectivement.

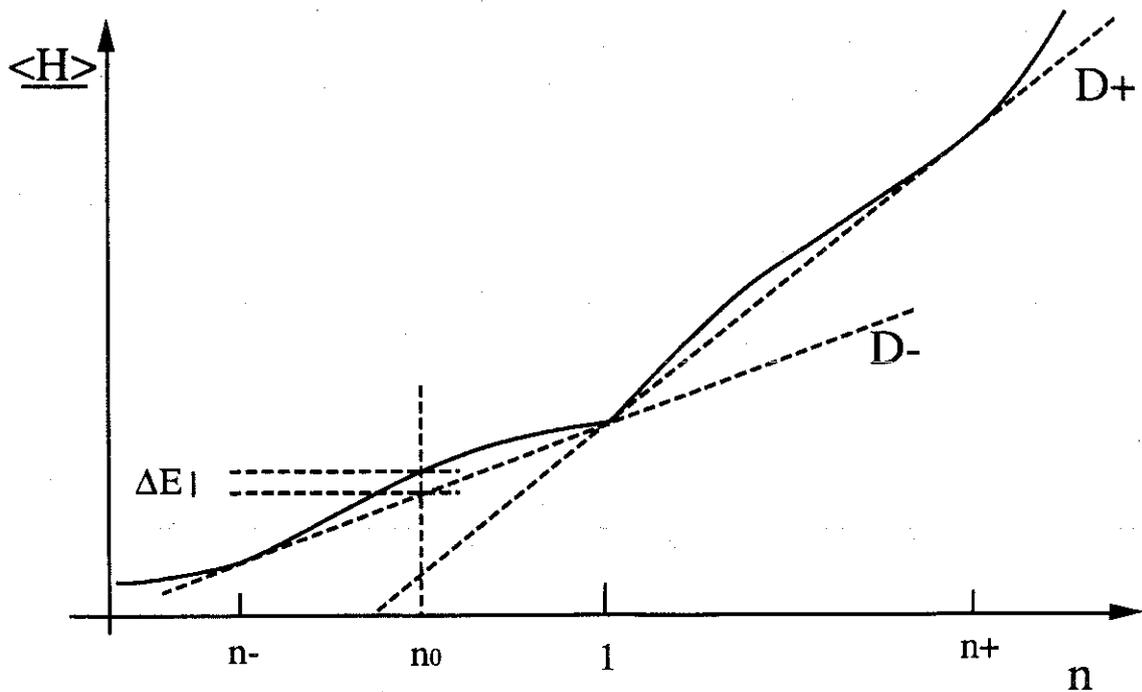


Figure C.10 : Obtention graphique de la séparation de phases due à la concavité de l'énergie totale, $\langle H \rangle$, en fonction du remplissage de la bande, n . ΔE est le gain en énergie pour le remplissage n_0 .

D'après la relation [C.1], il est clair que ces deux remplissages sont symétriques par rapport à 1 et que les pentes, p^- et p^+ , de ces deux droites vérifient l'équation :

$$p^- + p^+ = U \quad [C.7]$$

Pour être dans la situation schématisée sur la figure C.10 où p^+ est supérieur à p^- , il suffit donc d'avoir :

$$p^- < U/2 \quad [C.8]$$

Les calculs numériques permettent de s'assurer que c'est toujours le cas. Lorsque n est compris entre n^- et 1, le système se sépare donc en une phase dopée de densité de porteurs n^- et une phase non dopée ($n=1$).

La figure C.11 représente le diagramme de phase qui résulte de cette discussion. A l'exception de valeurs très élevées du paramètre d'interaction ($U > 6W$) où il

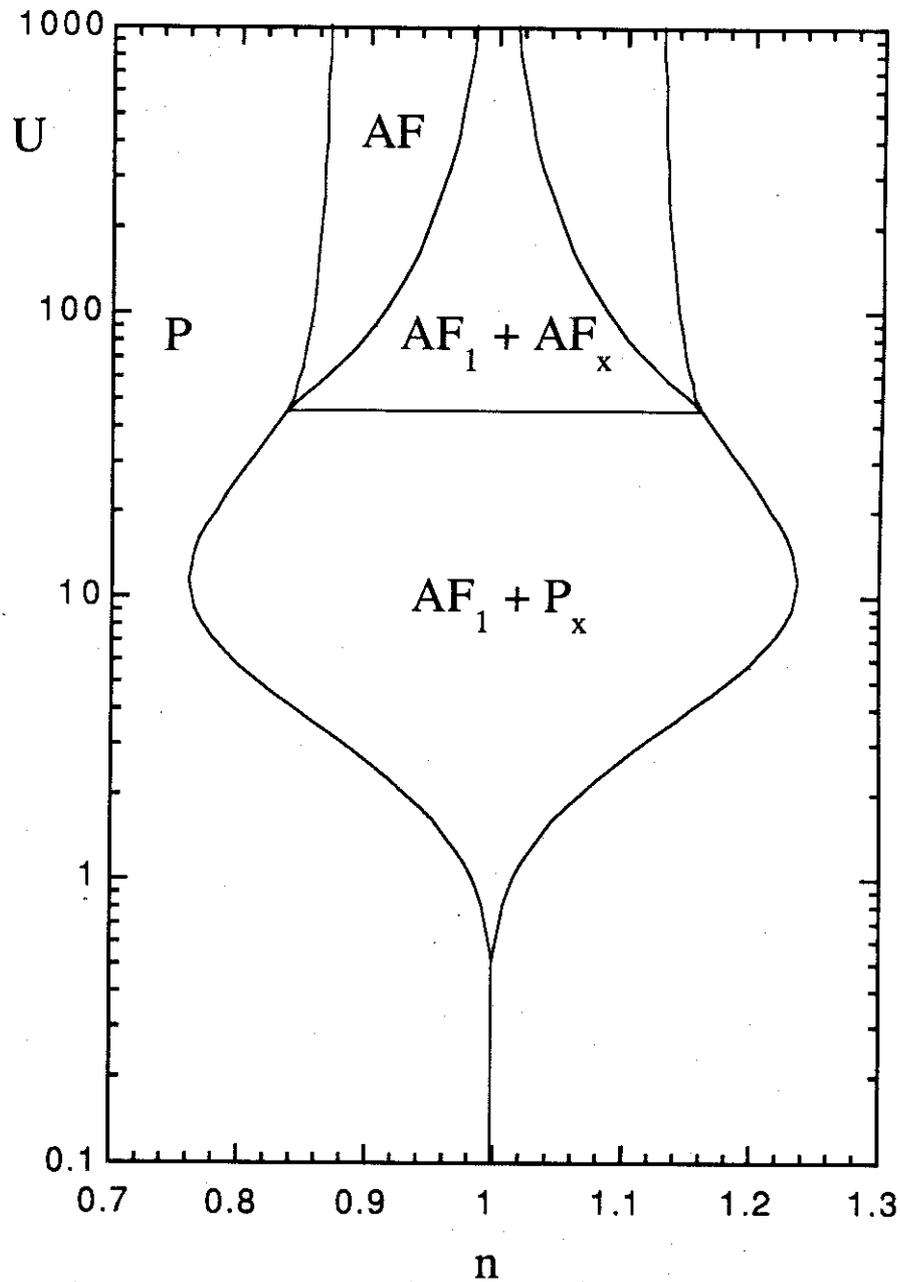


Figure C.11 : Diagramme de phase obtenu en autorisant la séparation de phases

P : Phase paramagnétique homogène

AF : Phase antiferromagnétique homogène.

AF₁+P_x: Le système est constitué de deux phases : une phase antiferromagnétique non dopée ($n=1$) et une phase paramagnétique dont le dopage est donné par la courbe continue qui délimite cette région ($n^{\pm}(U)$) et dont la proportion relative est $\ln-1$.

AF₁+AF_x: Idem que précédemment mais la phase dopée présente, cette fois-ci, un moment alterné non nul.

faudrait prendre en compte le ferromagnétisme, la phase dopée est toujours paramagnétique. Cette relation d'exclusion entre les porteurs ajoutés par le dopage et les moments magnétiques se retrouve dans les solitons (le moment moyen sur une ligne de séparation entre domaines est nul), et les spins bags (le moment alterné moyen est réduit dans le spin bag). Une séparation de phases analogue a aussi été obtenue dans le modèle t-J qui permet de décrire le cas des très fortes répulsions / Emery & al. 90 /.

Le dopage dans la phase dopée présente un maximum d'environ 24% pour une répulsion coulombienne de l'ordre de celle correspondant à la transition de Mott ($U \cong 3/2W \cong U_c$). Comme on peut le vérifier sur la figure C.5, le gain d'énergie correspondant à cette séparation de phases est réduit par la prise en compte des corrélations mais reste néanmoins de l'ordre de la centaine de kelvins. Enfin, la figure C.12 met en évidence de fortes corrélations dans la phase dopée bien que le dopage correspondant tende vers zéro ($n^- \rightarrow 1$) dans la limite où U tend vers l'infini.

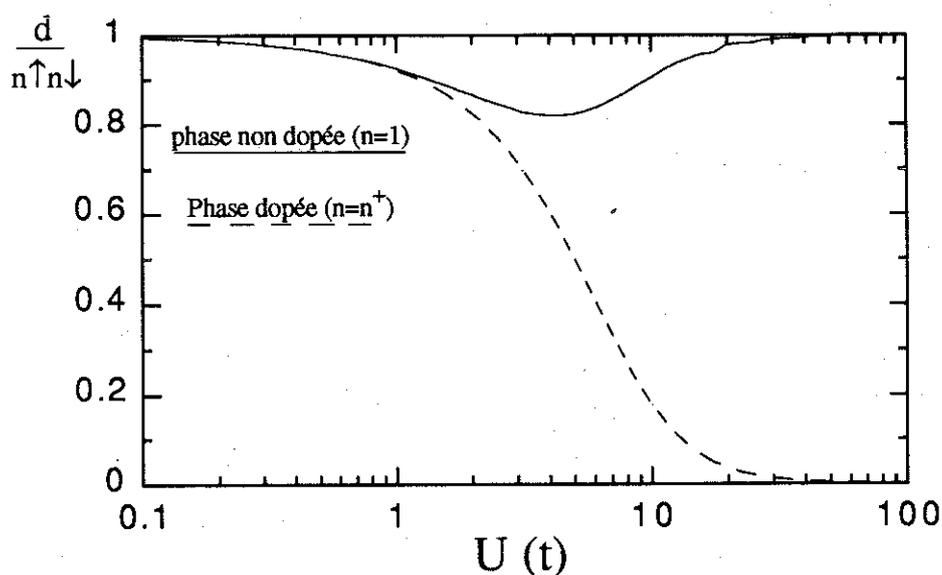


Figure C.12 : Facteur de corrélation, $d/n^\uparrow n^\downarrow$, en fonction du paramètre de répulsion coulombienne, U , dans les phases dopée (tirets) et non dopée (trait continu).

CONCLUSION

D'après la théorie classique du magnétisme itinérant (approximation de Hartree Fock), le composé non dopé (bande demi-pleine) est ordonné antiferromagnétiquement et cet ordre est détruit sous l'effet du dopage d'autant plus rapidement que la répulsion coulombienne de deux électrons sur un site est faible. De prime abord, cette approche semble bien décrire l'antiferromagnétisme dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Cependant, nous avons vu que, dans cette limite ($U \ll W$), la valeur moyenne du moment magnétique alterné et la stabilité de l'antiferromagnétisme deviennent vite très faibles ($m < 0.3\mu_B$ et $T_N < 100\text{K}$ pour $U < W/4$). Cela indique que, dans les oxydes supraconducteurs, la répulsion coulombienne est au moins de l'ordre de la largeur de bande ($U > W/4$). Afin d'examiner ce cas, nous avons utilisé la méthode de Gutzwiller.

Nous avons vu que, lorsque la bande est demi-pleine, cette méthode trouve un état antiferromagnétique quelque soit la répulsion coulombienne ($U > 0$). Dans le composé non dopé, La stabilisation de l'état antiferromagnétique par rapport à l'état paramagnétique est maximum pour une répulsion coulombienne de l'ordre de celle correspondant à la transition de Mott dans le composé paramagnétique ($U \cong U_c \cong 3/2 W$). Cette stabilisation décroît comme W^2/U lorsque U est grand devant W ce qui est accord avec les résultats exacts dans cette limite (magnétisme localisé).

En outre, le système non dopé et ordonné antiferromagnétiquement ne présente pratiquement pas de corrélations intrasites ($d \cong n^\uparrow n^\downarrow$) si bien que les résultats obtenus par la méthode de Gutzwiller ne diffèrent que très peu de ceux obtenus par la méthode de Hartree-Fock (le moment alterné moyen est légèrement abaissé par la prise en compte des corrélations pour $U \cong W$). Ces deux méthodes trouvent un antiferromagnétisme saturé dans la limite où U tend vers l'infini ($m = 1\mu_B$). Ce résultat n'est pas exact car, à deux dimensions, la valeur moyenne du moment alterné est fortement abaissée par les fluctuations quantiques des électrons localisés (sauts virtuels). Comme dans le cas paramagnétique, les sauts virtuels sont donc complètement négligés par la méthode de Gutzwiller qui n'est donc pas très appropriée à l'étude des fortes répulsions ($U > W$) pour un système de basse dimensionnalité.

La stabilité de l'état ordonné antiferromagnétiquement par rapport à la phase paramagnétique simple ainsi que le moment alterné moyen correspondant diminuent régulièrement avec le dopage tandis que les corrélations électroniques augmentent rapidement. Ainsi, pour une répulsion de l'ordre de la largeur de bande ($U \cong W$), la

probabilité de trouver deux électrons sur le même site est abaissée d'un facteur 4 par les corrélations coulombiennes ($d \approx n^{\uparrow} n^{\downarrow} / 4$). De plus, par rapport au résultat de la méthode de Hartree-Fock, la méthode de Gutzwiller réduit nettement le dopage critique au-delà duquel la phase antiferromagnétique n'est plus stabilisée par rapport à la phase paramagnétique. Ainsi, pour $U \approx W$, celui-ci passe de 45% à 20% environ et il ne dépasse jamais cette dernière valeur quelque soit l'interaction coulombienne (il est maximum pour $U \approx U_c \approx 3/2W$). Néanmoins, cette valeur reste élevée si l'on se rappelle le diagramme de phase de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ porté sur la figure 0.2. Ce résultat suggère la présence de corrélations antiferromagnétiques dans la phase supraconductrice de ces composés si U est de l'ordre de W .

En outre, nous avons vu que, dans le cadre du modèle de Hubbard qui néglige l'interaction coulombienne à longue portée, l'ordre antiferromagnétique dans le composé dopé est instable par rapport à la séparation de phases. Cela indique que, à température nulle, bien que le composé dopé présente probablement des corrélations antiferromagnétiques, il ne présente pas un ordre antiferromagnétique aussi simple que celui que nous avons envisagé. Si l'on autorise cette séparation de phases, on trouve la coexistence d'une phase non dopée antiferromagnétique et d'une phase dopée paramagnétique. Une telle séparation de phases est possible si la température est suffisante pour permettre aux impuretés donatrices de trous de se mouvoir. Le gain d'énergie correspondant à cette séparation de phases est de l'ordre de la centaine de kelvins. Cette éventualité n'est donc pas irréaliste et semble d'ailleurs en accord avec certaines observations expérimentales. Par ailleurs, cette tendance qu'ont les porteurs ajoutés par le dopage à abaisser le moment alterné moyen dans leur voisinage (la phase dopée est paramagnétique) se retrouve aussi dans un certain nombre de solutions proposées pour l'étude du fondamental de l'hamiltonien de Hubbard en dehors de la bande demi-pleine (spins bags, solitons...). Il serait intéressant de comparer l'énergie de ces différentes solutions.

Au cours du chapitre IV, nous envisagerons une solution purement paramagnétique au modèle de Hubbard, au sens d'un état ne présentant pas de moment moyen localement non nul, mais présentant cependant des corrélations antiferromagnétiques. Auparavant, nous allons examiner la stabilité de l'ordre antiferromagnétique à longue distance dans un modèle a priori plus réaliste que le modèle de Hubbard du point de vue de la modélisation des oxydes supraconducteurs. Il s'agit du modèle à deux bandes du plan CuO_2 .

APPENDICE

Ap.1 Calcul des valeurs moyennes dans l'état de particules indépendantes

Afin de déterminer le nombre moyen de particules sur un sous-réseau, n_v , et l'énergie cinétique, $\langle H_c \rangle_0$ dans l'état de particules indépendantes, il n'est pas nécessaire d'explicitier complètement la fonction d'onde $\Psi_{0(C)}$. Il suffit de déterminer les densités d'états totale, $\rho(\epsilon)$, et partielle, $\rho_v(\epsilon)$. $\rho_v(\epsilon)$ est la densité d'états locale pour le spin v sur le sous-réseau R_v . Le nombre total d'électrons par site, n , est un paramètre fixé. On peut alors déterminer le niveau de Fermi, $\epsilon_{f(n)}$, par :

$$\int_{-\infty}^{\epsilon_f} \rho_{(\epsilon)} d\epsilon = n \quad [\text{Ap.1}]$$

vient alors la valeur propre, E_0 , de $|\Psi_0\rangle$ dans l'hamiltonien variationnel :

$$E_0 \equiv \frac{\langle H_v \rangle_0}{L} = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \epsilon \rho_{(\epsilon)} d\epsilon \quad [\text{Ap.5}]$$

Les densités d'états partielles permettent d'obtenir les populations partielles :

$$n_v = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \rho_{v(\epsilon)} d\epsilon \quad [\text{Ap.6}]$$

L'énergie cinétique moyenne se déduit alors aisément :

$$\langle H_c \rangle_0 / L = \langle H_v - D (N_+ - N_-) \rangle_0 / L = E_0 - D (n_+ - n_-) \quad [\text{Ap.7}]$$

La minimisation de l'énergie par rapport au paramètre variationnel D nécessite donc le calcul des densités d'états pour chaque valeur de ce paramètre. Le temps de calcul risque de devenir prohibitif si l'on ne dispose pas d'une méthode de calcul rapide des densités d'états. En tirant parti de la structure alternée du réseau, on obtient aisément, une expression très simple des densités d'états, $\rho(\epsilon)$ et $\rho_v(\epsilon)$, pour une valeur quelconque de D , en fonction d'une densité d'états effective, $\tilde{\rho}(\tilde{\epsilon})$, qui ne dépend pas du paramètre variationnel. On évite ainsi un calcul de structure de bande pour chaque valeur de D . Pour

ce faire, il suffit d'écrire l'équation de Schrodinger en projection sur les sous-réseaux R^- et R^+ . L'expression ainsi obtenue est la suivante :

$$\rho_{(\epsilon)} = \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial \epsilon} \tilde{\rho}_{(\tilde{\epsilon})} \quad \text{avec} \quad \tilde{\epsilon} = \epsilon^2 - D^2 \quad [\text{Ap.8}]$$

$$\text{et} \quad \tilde{\rho}_{(\tilde{\epsilon})} = \frac{\rho_c(\sqrt{\tilde{\epsilon}})}{2\sqrt{\tilde{\epsilon}}} \quad [\text{Ap.9}]$$

$$\rho_{v(\epsilon)} = R_{v(\epsilon)} \rho_{(\epsilon)} \quad [\text{Ap.10}]$$

$$\text{avec} \quad R_v = \frac{|\epsilon - \lambda_v D|}{|2\epsilon|}$$

$\rho_c(\epsilon)$ est la densité d'états du réseau carré sans l'introduction d'une énergie de site alternée ($D=0$). Cette densité d'états est parfaitement connue, il suffit donc d'en disposer et d'utiliser les équations [Ap.8] à [Ap.10] pour déterminer les "densités variationnelles" ρ et ρ_v . La figure C.2 montre un exemple de densité d'états ainsi obtenue. L'introduction

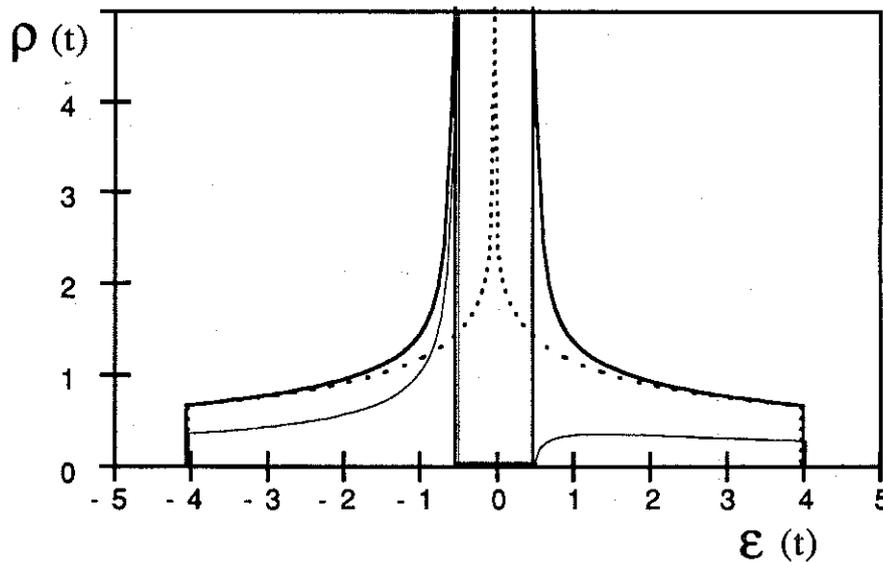


Figure Ap.1 : Densité d'états d'électrons indépendants, sans spin, sur un réseau carré et en présence d'un potentiel alterné d'amplitude, $D=2t$. Les unités sont l'intégrale de saut, t , pour l'énergie, ϵ , et sont inverse, t^{-1} , pour les densités d'états.

Pointillés : densité d'états du réseau carré, ρ_c , ($D=0$).

Trait épais : densité d'états totale, ρ , ($D=t/2$).

Trait fin : densité d'états partielle, ρ_v , sur le sous réseau R^- . ($D=t/2$).

du potentiel alterné, $\lambda_v D$, fait apparaître un gap au centre de la bande du réseau carré, $\rho_c(\epsilon)$. On retrouve là le "gap antiferromagnétique" dont nous avons parlé plus haut.

La procédure indiquée afin de déterminer les quantités intégrées, n_v et $\langle H_c \rangle_0$, implique la détermination du niveau de Fermi par l'équation [Ap.4]. En fait, ce travail peut être évité. D'après [C.8], on a :

$$\rho_{(\epsilon)} d\epsilon = \tilde{\rho}_{(\tilde{\epsilon})} d\tilde{\epsilon} = dn' \quad [\text{Ap.11}]$$

où dn' est la variation du nombre total de particules :

$$n' = \int_{-\infty}^{\epsilon} \rho_{(\epsilon')} d\epsilon' = \int_{-\infty}^{\tilde{\epsilon}} \tilde{\rho}_{(\tilde{\epsilon}')} d\tilde{\epsilon}' \quad [\text{Ap.12}]$$

Le plus simple est d'adopter n' comme variable d'intégration :

$$n_v = \int_0^n R_{v(\epsilon)} dn' \quad E_0 = \int_0^n \epsilon dn' \quad [\text{Ap.13}]$$

l'énergie, ϵ , peut être exprimée en fonction de l'énergie effective, $\tilde{\epsilon}$. Pour la bande moins qu'à moitié pleine, on a :

$$\epsilon = -\sqrt{D^2 + \tilde{\epsilon}} \quad [\text{Ap.14}]$$

Il suffit donc de déterminer une fois pour toute la fonction $\tilde{\epsilon}(n')$ qui peut être calculée numériquement en inversant la primitive de $\tilde{\rho}(\tilde{\epsilon})$. En adoptant n' comme variable d'intégration, on dispose d'un intervalle d'intégration indépendant des paramètres variationnels et on évite, de plus, les singularités de Van Hove des densités d'états qui compliqueraient l'intégration numérique.

Ap.2 Minimisation de l'énergie

Pour une valeur donnée de l'énergie de site alternée, D , l'expression de l'énergie, [B.14], est analytique par rapport au facteur de double occupation, d . De plus, la pente de $g_t(d)$ est infinie à l'origine et nulle en $d=n^{\uparrow}n^{\downarrow}=n_+n_-$ (pour $n \neq 1$). L'énergie a donc l'allure portée sur la figure I.B.3a et l'énergie minimum s'obtient en résolvant :

$$\frac{\partial \langle H \rangle_0}{\partial d} = 0 \quad [\text{Ap.15}]$$

qui devient :

$$\frac{\partial g_t}{\partial d} = \frac{U}{|\langle H_c \rangle_0|} \quad [\text{Ap.16}]$$

L'équation [Ap.16] admet toujours une solution unique dans l'intervalle $[0 ; n_+n_-]$. Cette dernière est déterminée rapidement par une méthode numérique.

Tous les calculs que nous venons de mentionner sont répétés pour un grand nombre de valeurs de l'énergie de site alternée, D , de façon à déterminer la valeur optimum de ce paramètre. On obtient ainsi les propriétés du fondamental de l'hamiltonien, par la méthode de Gutzwiller.

REFERENCES

- Aharony A., Phys. Rev. Lett. 60 P.1330 (88)
 Birgeneau R.J., Coniglio A., Kastner M.A. & Stanley H.E.
- Birgeneau R.J., Phys. Rev. B 38 P.6614 (88)
 Gabbe D.R., Jennsen H.P., Kastner M.A., Picone J., Thurston T.R.,
 Shirane G., Endoh Y., Sato M., Yamada K., Hidaka Y., Oda M., Enomoto
 Y., Suzuki M. & Marakami T.
- Birgeneau R.J., Phys. Rev. B 39 P.2868 (89)
 Endo Y., Kakurai K., Hidaka Y., Murakami T., Kastner M.A.,
 Thurston T.R., Shirane G. & Yamada K.
- Emery V.J., Phys. Rev. Lett. 64 P.475 (90)
 Kivelson S.A., Lin H.Q.
- Florencio T., Phys. Rev. B 14 P.3121 (76)
 Chao J. & Chao K.A.
- Friedel J. J. Phys. 49 P.1435 (88)
- Fuggle J.C., Phys. Rev. B 37 P.123 (88)
 Weijs P.J.W., Schoorl R., Sawatzky G.A., Fink J., Nücker N.,
 Durham P.J. & Temmerman W.M.
- Fujimori A., Phys. Rev. B 35 P.8814 (87)
 Takayama-Muromachi E., Uchida Y. & Okai B.
- Jorgensen J.D., Phys. Rev. B 38 P.11337 (88)
 Dabrowski B., Pei S., Hinks D.G., Soderholm L., Morosin B.,
 Schirber J.E., Venturini E.L. & Ginley E.S.
- Johnston D.C., Phys. Rev. B 36 P.4007 (87)
 Stokes J.P., Goshorn D.P. & Lewandowski J.T.

- Shirane G., Phys. Rev. Lett. 59 P.1613 (88)
Endoh Y., Birgeneau R.J., Kastner M.A., Hidaka Y., Oda M., Suzuki M. &
Murakami T.
- Su W.P., Phys. Rev. B 27 P.2099 (80)
Schrieffer J.R. & Heeger A.J.
- Takano F. & Uchinami M. Progr. in theor. phys. 53 P.1267 (75)
- Tranquada J.M., Phys. Rev. Lett. 60 P.156 (88)
Cox D.E., Kunnmann W., Moudden H., Shirane G., Zolliker P., Vaknin D.,
Sinha S.K., Alvarez M.S., Jacobson A.J. & Johnston D.C.
- Vaknin D., Phys. Rev. Lett. 58 P.2802 (87)
Sinha S.K., Moneton D.E., Johnston D.C., Newsam J.M., Safinya C.R. &
King H.E.
- Zaanen I. & Gunnarsson O. Phys. Rev. B 40 P.7391 (89)
- Zhang F.C. & Rice T.M. Phys. Rev. B 37 P.3759 (88)
- Zhang S.C. Superc. Sci. Technol. 1 P.36 (88)
Gros C. , Rice T.M. & Shiba H.

CHAPITRE III

LE MODELE A DEUX BANDES

DU PLAN CuO_2

PLAN DU CHAPITRE III

INTRODUCTION

III.A LE MODELE A DEUX BANDES

A.1 l'hamiltonien

A.2 Les paramètres du modèle

2.a La transformation électron-trou

2.b Estimations des paramètres

2.c L'hybridation cuivre-oxygène

III.B LE COMPOSE PARAMAGNETIQUE

B.1 Le composé non dopé

1.a Le transfert de charge

1.b L'énergie totale

1.c La limite covalente

1.d La transition métal-isolant

B.2 Le composé dopé

2.a Propriétés

2.b Généralisation des sous-bandes de Hubbard

2.c Effet de l'interaction en dehors des sites de cuivre

III.C LE COMPOSE ANTIFERROMAGNETIQUE

C.1 Le composé non dopé

1.a La méthode de Hartree-Fock

1.b La méthode de Gutzwiller

1.c La limite covalente

1.d Ionicité quelconque

C.2 Le composé dopé

2.a Effet de la covalence sur l'antiferromagnétisme

2.a α La susceptibilité

2.a β Les corrélations antiferromagnétiques

2.b Evolution des propriétés avec le dopage

2.c Effet de l'interaction en dehors des sites de cuivre

CONCLUSION

INTRODUCTION

Afin d'étudier les propriétés électroniques de la phase normale des oxydes supraconducteurs, nous adoptons, dans ce chapitre, un modèle plus réaliste qu'un simple réseau carré. Il s'agit de prendre en compte, dans l'approximation des liaisons fortes, les sites de cuivre et d'oxygène d'un plan CuO_2 . En fait, nous allons retrouver un certain nombre des résultats du chapitre précédent.

Dans la partie A, nous introduisons ce modèle en spécifiant quels sont les paramètres qui sont pris en compte, ce que l'on peut dire de leurs valeurs, et quelle est la structure de bande correspondante. Les principaux paramètres du modèle sont l'ionicité de la liaison cuivre-oxygène et la répulsion coulombienne sur les sites de cuivre.

Dans la partie B, nous examinons l'effet de la répulsion coulombienne sur le système paramagnétique. Nous étudions ainsi les propriétés du composé au-dessus de sa température de Néel. Nous en déduisons un comportement très différent selon que le composé est ionique ou covalent.

La partie C est consacrée à l'étude de l'antiferromagnétisme. Avant d'examiner l'ordre antiferromagnétique dans le composé non dopé et les corrélations antiferromagnétiques dans le composé dopé, nous résumons brièvement le principe du calcul. Le comportement du composé non dopé dans le régime covalent n'est pas celui prévu par le modèle à une bande. Pour ce qui est du composé dopé, nous examinons l'effet de la covalence sur les corrélations antiferromagnétiques en déterminant le domaine de stabilité de l'état présentant un ordre antiferromagnétique à longue distance par rapport à la phase paramagnétique simple. Puis, nous examinons quelles sont les propriétés de la phase antiferromagnétique en fonction du dopage.

III.A LE MODELE A DEUX BANDES

A.1 L'hamiltonien

Nous avons vu en II.A, que les électrons de valence des composés $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, sont essentiellement localisés dans un plan CuO_2 et, plus particulièrement, sur les orbitales $d_{x^2-y^2}$ des atomes de cuivre et p_σ des atomes d'oxygène (voir figure II.A.4). Le réseau constitué par ces orbitales est représenté sur la figure A.1.

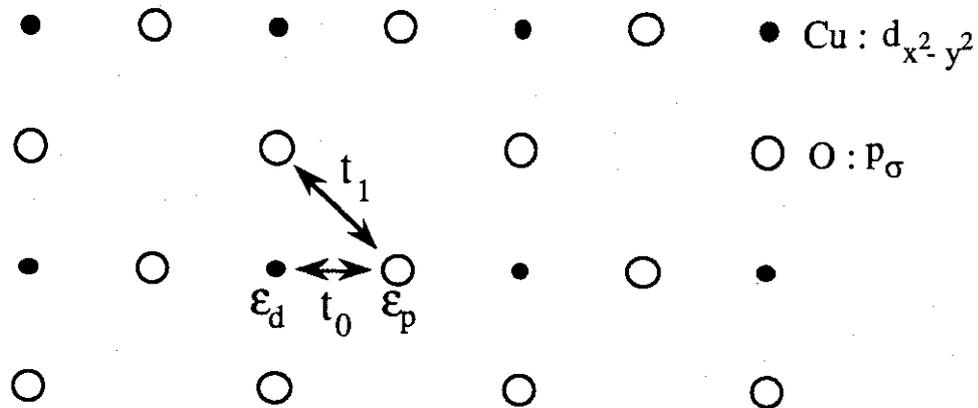


Figure A.1 : Disposition des sites de cuivre et d'oxygène dans un plan CuO_2 .

L'intégrale de saut, t_0 , entre un site de cuivre et un site d'oxygène premiers voisins est la plus importante. Il a été proposé que l'intégrale de saut, t_1 , entre deux sites d'oxygène, représentée sur la figure A.1, joue un rôle important. Nous la négligerons cependant. Par contre, il est clair que si l'on ne fait pas d'hypothèse particulière sur la position relative des énergies de site des sites d'oxygène, ϵ_p , et de cuivre, ϵ_d , les sites d'oxygène doivent être pris en compte au même titre que les sites de cuivre.

Soient U_d et U_p , les répulsions coulombiennes de deux électrons partageant une orbitale $d_{x^2-y^2}$ et p_σ respectivement. La répulsion coulombienne, U_{dp} , entre deux électrons situés sur deux sites premiers voisins peut être également prise en compte. Le système est alors décrit par un "hamiltonien de Hubbard étendu" prenant en compte, outre l'énergie cinétique et la répulsion coulombienne des électrons, le potentiel dû aux énergies de site différentes des sites de cuivre et d'oxygène. Cet hamiltonien s'écrit :

$$H = H_c + H_p + H_i \quad [A.1]$$

$$H_c = t_0 \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \chi_{ij}^{\sigma} + \chi_{ij}^{\sigma} \quad [A.2]$$

$$H_p = \epsilon_d \sum_{i \in R_d} n_i + \epsilon_p \sum_{i \in R_p} n_i \quad [A.3]$$

$$H_i = U_d \sum_{i \in R_d} d_i + U_p \sum_{i \in R_p} d_i + U_{dp} \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j \quad [A.4]$$

Nous avons adopté les notations habituelles (voir I.A.2). R_d et R_p désignent les sous-réseaux des sites de cuivre et d'oxygène respectivement. Notons qu'une paire de sites premiers voisins, $\langle ij \rangle$, comprend ici un site de cuivre et un site d'oxygène respectivement.

L'origine des énergies étant arbitraire et l'intégrale de saut, t_0 , étant prise comme échelle d'énergie, l'hamiltonien [A.1] dépend de quatre paramètres : $\Delta\epsilon = \epsilon_p - \epsilon_d$, U_d , U_p et U_{dp} . En fait, nous verrons que la répulsion sur les sites d'oxygène a peu d'influence (si $\Delta\epsilon > 0$) de même que la répulsion intersite (si $U_{dp} < t_0$). Seuls les deux premiers paramètres jouent un rôle essentiel.

A.2 Les paramètres du modèle

2.a La transformation électron-trou

Comme nous l'avons déjà signalé, dans le composé $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, une maille primitive du réseau de la figure A.1 comprend $5-x$ électrons et donc, $1+x$ trous. Il est donc plus commode de raisonner en termes de trous qu'en terme d'électrons.

Il faut alors prendre garde à ce que les énergies de sites ϵ_d et ϵ_p n'ont pas les mêmes valeurs selon que l'on raisonne en termes de trous ou en termes d'électrons. Notons ϵ_d^e et ϵ_p^e les énergies de site pour les électrons. Soit, par exemple, un site de cuivre occupé par deux électrons. Si on néglige la répulsion intersite, l'énergie gagnée en ôtant un électron de ce site est donnée par :

$$(2 \epsilon_d^e + U_d) - \epsilon_d^e = \epsilon_d^e + U_d \quad [A.5]$$

Le niveau effectif d'un trou est donc :

$$\varepsilon_d^t = - (\varepsilon_d^e + U_d) \quad [A.6]$$

On vérifie rigoureusement, en définissant l'opérateur création d'un trou comme étant l'opérateur annihilation d'un électron de spin opposé, que l'énergie de site pour un trou sur le site i est donnée par :

$$-\varepsilon_i^t = \varepsilon_i^e + U_i + 2 \sum_j U_{ij} \quad [A.7]$$

U_i est la répulsion coulombienne sur le site i et U_{ij} est la répulsion coulombienne entre un électron sur le site i et un électron sur le site j . La sommation porte sur tous les sites différents de i . Conformément au sens physique, on vérifie de même que les répulsions coulombiennes ne sont pas changées tandis que l'intégrale de saut change seulement de signe sous l'effet de la transformation électron-trou.

Reprenons l'approximation "ionique" faite au chapitre précédent qui consiste à supposer que, dans le composé non dopé, les trous sont localisés sur les seuls sites de cuivre. L'énergie que coûte le transfert d'un trou d'un site de cuivre vers un site d'oxygène est donc :

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon_p^t - \varepsilon_d^t = (\varepsilon_d^e - \varepsilon_p^e) + (U_d - U_p) + 4 U_{dp} \quad [A.8]$$

La position des différents niveaux d'énergie est schématisée sur la figure A.2 où nous nous sommes placés dans une situation réaliste (U_{dp} est supposé nul).

Désormais, nous ne parlerons plus qu'en termes de trous.

2.b Estimation des paramètres

Deux observations expérimentales permettent de situer la valeur du paramètre $\Delta\varepsilon$. Dans le composé non dopé, les trous se trouvent en majorité sur les sites de cuivre / Fujimori & al. 87 /. Par conséquent, on a :

$$\Delta\varepsilon > 0 \quad [A.9]$$

Par ailleurs, les trous ajoutés par le dopage se localisent sur les sites d'oxygène / Nücker & al. 88 ; Shen & al. 89 /. Il semble donc que l'on soit dans la situation :

$$\Delta\varepsilon < U_d \quad [A.10]$$

shématisée sur la figure A.2 (les trous ajoutés par le dopage, on intérêt à occuper le niveau ε_p^t).

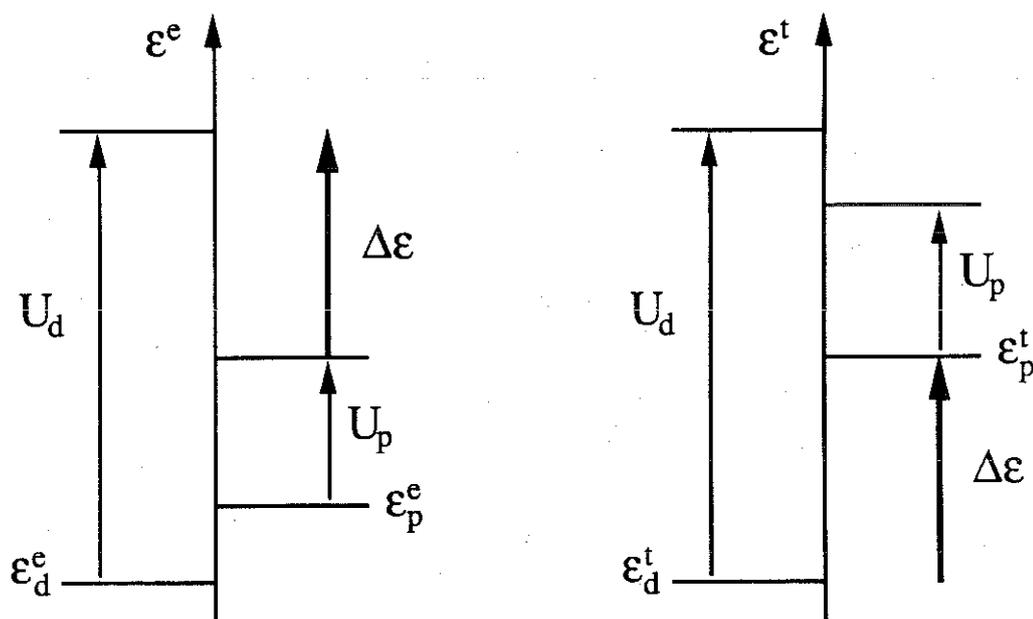


Figure A.2 : Niveaux d'énergie des orbitales $d_{x^2-y^2}$ et p_{σ} en termes d'électrons (à gauche) et de trous (à droite).

Par contre, comme nous l'avons déjà mentionné, en II.A, la situation est beaucoup moins claire en ce qui concerne le rapport des paramètres $\Delta\varepsilon$ et U_d à l'intégrale de saut, t_0 .

Un certain nombre de travaux ont été fait afin de préciser les valeurs des paramètres du modèle à deux bandes. Il s'agit, en particulier, de calculs ab initio utilisant la technique de la fonctionnelle de densité d'états / Schluter & al. 88 ; Stechel & Jennison 88 /. Ces calculs ne sont pas très fiables lorsque la répulsion coulombienne est élevée. En particulier, ils ne permettent pas de comprendre le caractère isolant du composé non dopé au-dessus de sa température de Néel.

Ainsi, l'intégrale de saut cuivre-oxygène, t_0 , est estimée à 1.5 eV. La répulsion coulombienne sur le cuivre, U_d , serait environ $8 t_0$ et l'énergie de transfert de charge cuivre-oxygène, $\Delta\epsilon$, est trouvée inférieure à $2t_0$. Ces résultats sont en accord avec un certain nombre d'expériences de photoémission / Shen & al. 89 /. Ces estimations suggèrent donc une liaison cuivre-oxygène plutôt covalente. Ce dernier résultat n'est pas compatible avec l'hypothèse d'ionicité ($\Delta\epsilon \gg t_0$) qui permet une justification rigoureuse du modèle à une bande.

2.c L'hybridation cuivre-oxygène

Afin de présenter qu'elle est la structure de bande, faisons abstraction du terme d'interaction, H_i . L'opérateur $H_c + H_p$ est un hamiltonien de particules indépendantes. On peut alors définir des états à une particule et une densité d'états du système. Les niveaux ϵ_d et ϵ_p étant a priori différents, on s'attend à ce que le système présente une bande liante et une bande antiliante. Un état à une particule dont l'énergie se trouve dans la bande liante (antiliante pour les électrons) est délocalisé dans tout le plan CuO_2 mais se trouve plus souvent sur les sites dont l'énergie de site est la plus basse (si $\Delta\epsilon$ est positif, se sont les sites de cuivre).

Le calcul de la densité d'états correspondant au réseau de la figure A.1, avec $t_1=0$, peut se faire de façon très simple en tirant parti de la structure alternée du réseau : un site de cuivre (sous-réseau R_d) n'a que des sites d'oxygène comme premiers voisins et inversement / Julien 87 /. Il apparaît, en particulier, que du fait du nombre plus important de sites d'oxygène que de cuivre, il y a, en plus des bandes liante et antiliante, un niveau non liant d'énergie ϵ_p correspondant à des états n'occupant que des sites d'oxygène (à ne pas confondre avec le niveau non liant des orbitales p_π).

La densité d'états est représentée sur la figure A.3 pour $\Delta\epsilon = 2t_0$. Nous avons, en outre, porté le niveau de Fermi dans le composé non dopé qui se trouve exactement au milieu de la bande liante. Les bandes liante et antiliante sont symétriques par rapport à $(\epsilon_p + \epsilon_d)/2$ et présentent les mêmes singularités de Van Hove que la densité d'états pour le réseau carré simple (voir figure I.B.4). Le gap qui les sépare est exactement égal à $\Delta\epsilon$ et leur largeur, W^* , est donnée sur la figure A.4 en fonction de $\Delta\epsilon$.

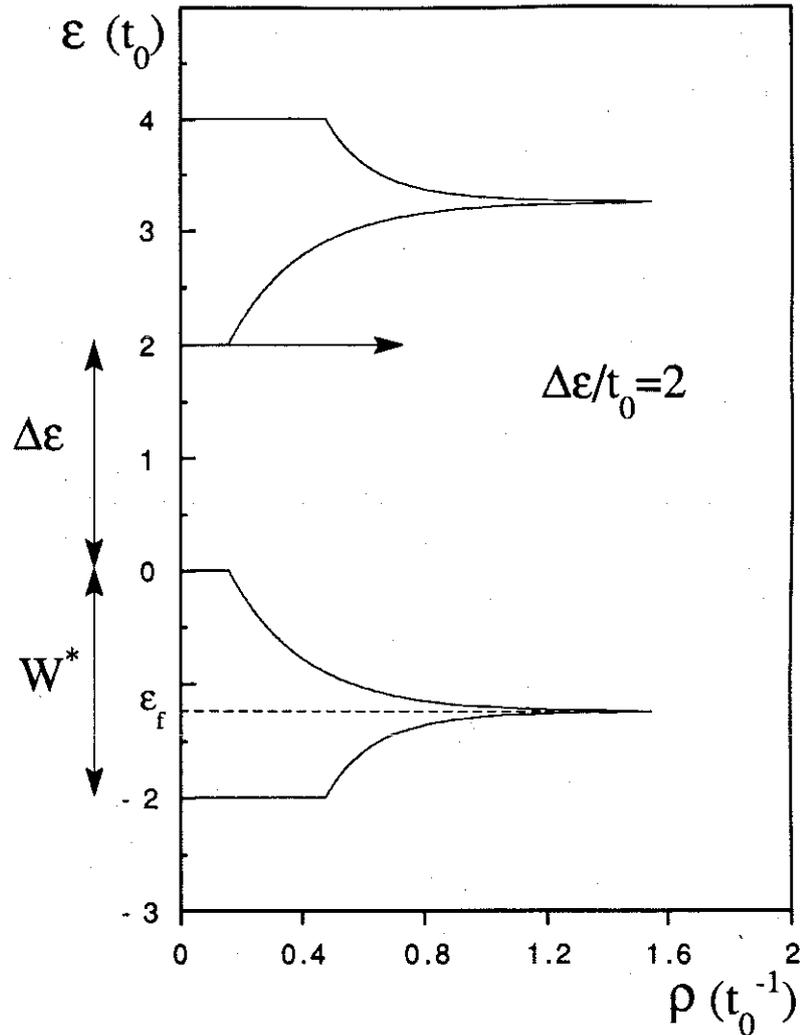


Figure A.3 Densité d'états totale pour le réseau de la figure A.1 avec $t_1=0$, $\varepsilon_d=0$ et $\varepsilon_p=2t_0$. t_0 est l'intégrale de saut entre un site de cuivre et un site d'oxygène premiers voisins.

Lorsque l'on dope le composé avec des trous, le niveau de Fermi augmente et la bande liante est complètement remplie pour un dopage égal à 100%. Si l'on considère des dopages en électrons (ce qui se produit dans certains composés), le niveau de Fermi s'abaisse jusqu'à ce que la bande soit vide pour un dopage en porteur négatifs égal à 100%. Lorsque nous étudierons le composé dopé, nous envisagerons tous les remplissages possibles de la bande liante ($0 < n < 2$) comme nous l'avons fait au chapitre précédent pour la bande unique du modèle de Hubbard.

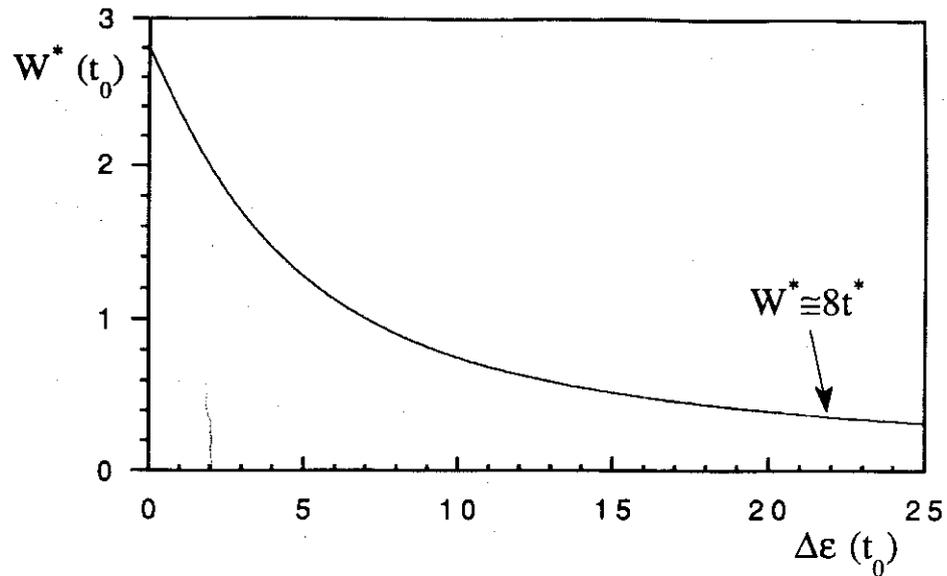


Figure A.4 : Largeur de la bande liante, W^* , en fonction de l'écart, $\Delta\varepsilon$, entre les énergies de site du cuivre et de l'oxygène. On vérifie que :

$$W^* = \sqrt{\Delta\varepsilon^2/4 + 8t_0^2} - \Delta\varepsilon/2.$$

t^* est l'intégrale de saut dans le modèle à une bande : $t^* = t_0^2/\Delta\varepsilon$.

Le paramètre $\Delta\varepsilon/t_0$ détermine l'hybridation entre les orbitales du cuivre et de l'oxygène. Lorsque $\Delta\varepsilon$ est nul, un trou a la même probabilité de se trouver le sous-réseau des sites de cuivre que sur le sous-réseau des sites d'oxygène. Dans ce cas, la liaison est parfaitement covalente. La figure A.5 représente le nombre moyen de trous sur un site de cuivre en fonction de l'ionicité, $\Delta\varepsilon/t_0$, pour le composé non dopé ($n=1$).

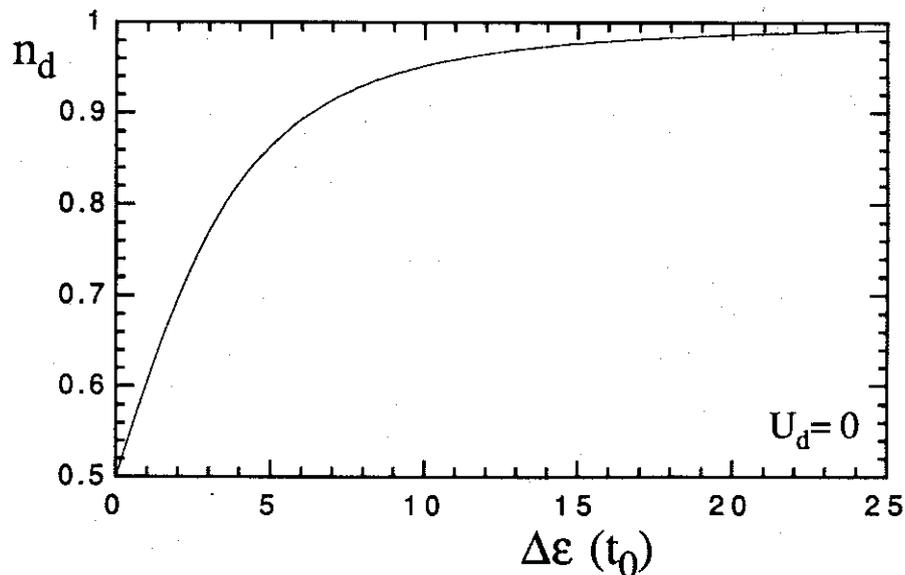


Figure A.5 : nombre moyen de trous, n_d , sur un site de cuivre pour le composé non dopé, en fonction de l'énergie de transfert de charge du cuivre vers l'oxygène, $\Delta\varepsilon$, en l'absence d'interaction coulombienne.

II.B LE CAS PARAMAGNETIQUE

Le modèle à deux bandes prend en compte un plus grand nombre de paramètres que le modèle de Hubbard. Pour simplifier, commençons par examiner les propriétés du système paramagnétique. Ce système a été étudié par Mayou, Nguyen Manh et Julien / Mayou & al. 88 /. Cyrot et Mayou se sont plus particulièrement intéressés au composé non dopé / Cyrot & Mayou 90 /. Outre l'avantage d'une plus grande simplicité, cette étude permet de comprendre le comportement du système au-dessus de sa température de Néel.

B.1 Le composé non dopé

En particulier, nous avons vu qu'expérimentalement, le composé non dopé est isolant au-dessus de sa température de Néel. La bande liante étant demi-pleine, on s'attend donc à ce que ce soit un isolant de Mott. Nous avons vu que la méthode de Gutzwiller permet de prévoir la transition de Mott dans le modèle de Hubbard (I.B.2.b). A priori, la situation est moins simple en ce qui concerne le modèle à deux bandes.

1.a Le transfert de charge

A cause de l'hybridation, les trous sont délocalisés dans tout le plan CuO_2 . Dans l'approximation de Hartree-Fock où les particules se déplacent indépendamment les unes des autres, deux trous ont donc toujours une probabilité non nulle de se trouver sur le même site (en l'absence d'ordre magnétique). La probabilité de double occupation d'un site est proportionnelle au carré du nombre moyen de trous sur ce site : $\langle d_i \rangle_0 = n_i \uparrow n_i \downarrow = n_i^2/4$. Il en résulte une valeur moyenne non nulle de l'énergie d'interaction.

Les orbitales 3d du cuivre sont plus localisées que les orbitales 2p de l'oxygène. La répulsion coulombienne y est donc probablement plus importante ($U_d > U_p$). Dans l'approximation de Hartree-Fock, le nombre moyen de trous sur un site de cuivre a donc tendance à diminuer par rapport à sa valeur résultant de la seule hybridation cuivre-oxygène (portée sur la figure A.5). C'est ce que l'on appelle le

"transfert de charge". En fait, même si U_d et U_p sont égaux, ce phénomène se produit toujours à cause du plus grand nombre de sites d'oxygène que de cuivre.

1.b L'énergie totale

Rappelons que la méthode de Gutzwiller consiste à considérer la valeur moyenne $\langle d_i \rangle$ comme un paramètre variationnel supplémentaire. L'expression de l'énergie totale découle de la formule générale [I.C.34]. L'application au plan CuO_2 paramagnétique donne :

$$\langle H \rangle = g_t \langle H_c \rangle_0 + \Delta \epsilon (n - n_d) + U_d d_d \quad [\text{B.1}]$$

avec

$$g_t = q(n_d/2, n_d/2, d_d) \quad [\text{B.2}]$$

Nous avons adopté les notations habituelle (voir [I.C.34] et I.A.1.b). La fonction $q(n_1, n_2, d)$ est donnée en [I.C.29]. Pour simplifier, nous avons supposé nulle la répulsion sur les sites d'oxygène et la répulsion intersite.

Désormais nous considérons, par défaut, le cas où la répulsion sur l'oxygène et la répulsion intersite sont nulles.

Afin d'estimer l'énergie du fondamental, il suffit de minimiser l'expression [B.1] par rapport à n_d et à d_d . La fonction d'onde de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$, est définie comme l'état fondamental du gaz d'électrons indépendants sur le réseau de la figure A.1, avec un écart effectif, $\Delta \epsilon^* = \epsilon_p^* - \epsilon_d^*$, entre les énergies de site des sites d'oxygène et de cuivre. $\Delta \epsilon^*$ et n_d sont reliés comme l'indique la figure [A.5].

1.c Le composé covalent

La figure B.1 représente le nombre moyen de trous sur le cuivre dans le composé non dopé parfaitement covalent ($\Delta \epsilon = 0$), en fonction de la répulsion coulombienne sur le cuivre. La prise en compte des corrélations réduit nettement le transfert de charge.

Les réductions de la probabilité de double occupation et de l'énergie cinétique sont portées figure B.2. On note que, malgré d'importantes corrélations, l'énergie

cinétique n'est que faiblement renormalisée et il n'y a pas de transition de Mott. Cela provient de la prise en compte des sites d'oxygène : dans le composé non dopé, le nombre de porteurs est strictement inférieur au nombre de sites ($1 < 3$) et l'interdiction de double occupation n'est donc pas synonyme d'interdiction de mouvement comme dans le modèle à une bande.

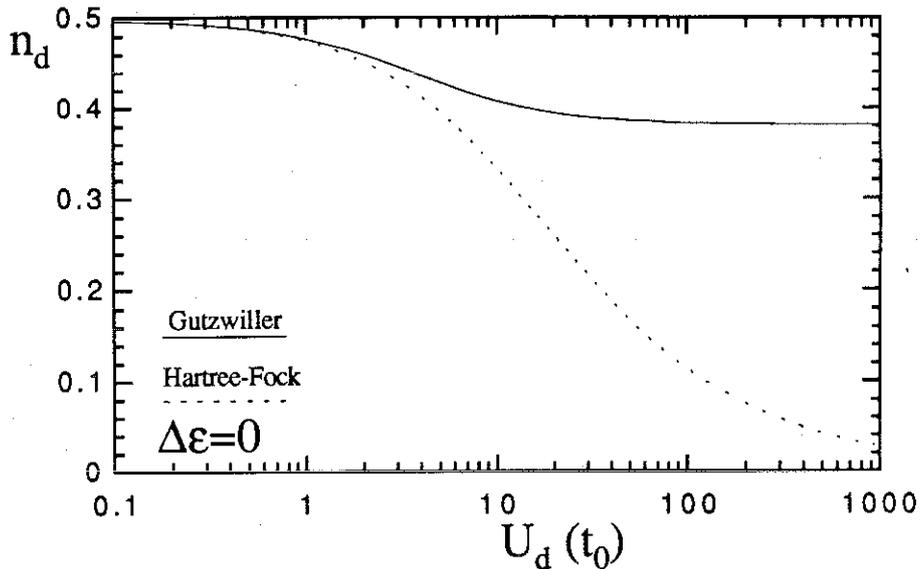


Figure B.1 : Nombre moyen de trous, n_d , sur un site de cuivre dans le composé non dopé en fonction de la répulsion coulombienne sur le cuivre dans la limite covalente (la répulsion sur les sites d'oxygène est supposée nulle).

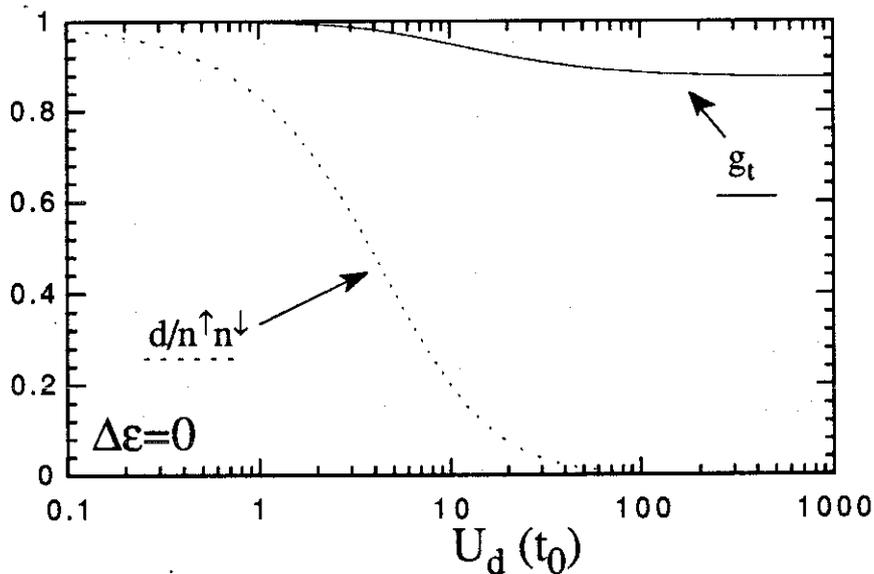


Figure B.2 : réduction de l'énergie cinétique, g_t , et réduction de la probabilité de double occupation sur le cuivre, $d/n^{\uparrow}n^{\downarrow}$, pour le composé non dopé, en fonction de la répulsion coulombienne sur le cuivre dans la limite covalente.

1.d La transition métal-isolant

Sur la figure B.3, nous avons porté le nombre moyen de trous sur le cuivre et la réduction de l'énergie cinétique lorsque la répulsion sur le cuivre est infinie en fonction de l'énergie de transfert de charge, $\Delta\varepsilon$ entre le cuivre et l'oxygène. Il apparaît une transition de Mott pour une valeur finie de $\Delta\varepsilon$. Cette transition s'explique comme nous l'avons fait pour le modèle de Hubbard (I.B.2.b) : un site de cuivre n'est entouré que de quatre sites d'oxygène, un trou qui se trouve sur un site de cuivre se trouve donc dans un puits de potentiel de profondeur $\Delta\varepsilon$ (d'où la possibilité d'état liés).

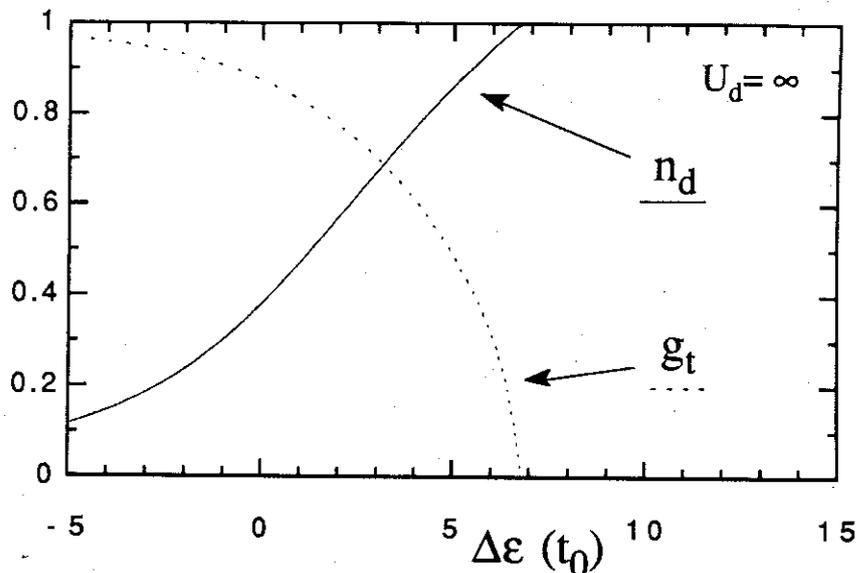


Figure B.3 : Nombre moyen de trous sur un site de cuivre et renormalisation de l'énergie cinétique dans le composé non dopé, en fonction de l'énergie de transfert de charge pour une répulsion infinie sur les sites de cuivre.

Comme dans le cas du modèle de Hubbard, tout mouvement est interdit lorsque le composé est isolant ($g_t=0$). Il s'agit là d'un artéfact de la méthode de Gutzwiller car, en réalité un trou localisé sur un site de cuivre a une probabilité de présence non nulle sur un oxygène premier voisin lorsque $\Delta\varepsilon$ est fini. Le fait que le nombre moyen de trous par site de cuivre soit exactement égal à 1 à la transition est une conséquence de cet artéfact.

Il est aisé de déterminer, à l'aide de l'équation [B.1], le diagramme de phase métal-isolant dans le plan $(\Delta\varepsilon, U_d)$ / Cyrot & Mayou 90 /. Ce diagramme est porté sur la figure B.4. On retrouve bien une valeur critique finie de l'ionicité nécessaire à l'obtention d'un état isolant.

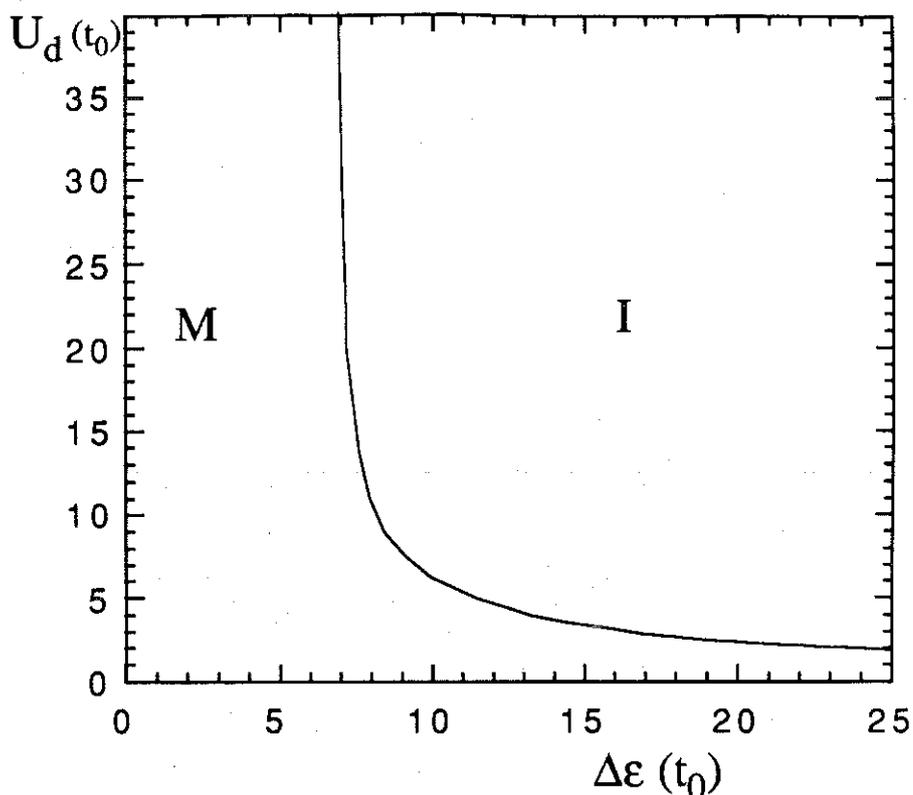


Figure B.4 : I : le composé est isolant ; M : le composé est métallique. La limite entre les régions isolante et métallique admet les axes $\Delta\epsilon_c = 2 \sqrt{8(1+4/\pi^2)} t_0$ et $U_d=0$ comme asymptotes verticale et horizontale.

Cette valeur critique, $\Delta\epsilon_c$, est assez élevée devant t_0 (contrairement aux valeurs obtenues par les calculs ab initio). Ce résultat suggère une ionicité importante si l'on veut rendre compte du caractère isolant du composé non dopé au-dessus de sa température de Néel. Cependant, la prise en compte d'une répulsion coulombienne intersite, U_{dp} , réduit cette valeur : $\Delta\epsilon_c' = \Delta\epsilon_c - 2U_{dp}$. De plus, il ne faut pas perdre de vue que la méthode de Gutzwiller est approximative lorsque U est $\Delta\epsilon$ sont élevés devant t_0 .

Dans la limite des fortes ionicités ($\Delta\epsilon \rightarrow \infty$), la valeur critique de la répulsion sur le cuivre, U_c , nécessaire à l'obtention d'un état isolant varie comme $t_0^2/\Delta\epsilon$. Cette dépendance est la bonne puisque, dans cette limite, le système est décrit par le modèle de Hubbard d'intégrale de saut $t^* = t_0^2/\Delta\epsilon$ (voir II.A.2) et que nous avons trouvé, dans le cadre de ce modèle, une transition métal-isolant pour une valeur finie et non nulle de la répulsion coulombienne (voir I.B.2.b). Par contre on ne tend pas vers la même valeur de U_c/t^* (on trouve $U_c \cong 45t^*$ au lieu de $\cong 13t^*$). Cela provient de la mauvaise prise en

compte, par la méthode de Gutzwiller, des sauts virtuels cuivre-oxygène lorsque $\Delta\varepsilon$ est très supérieur à t_0 .

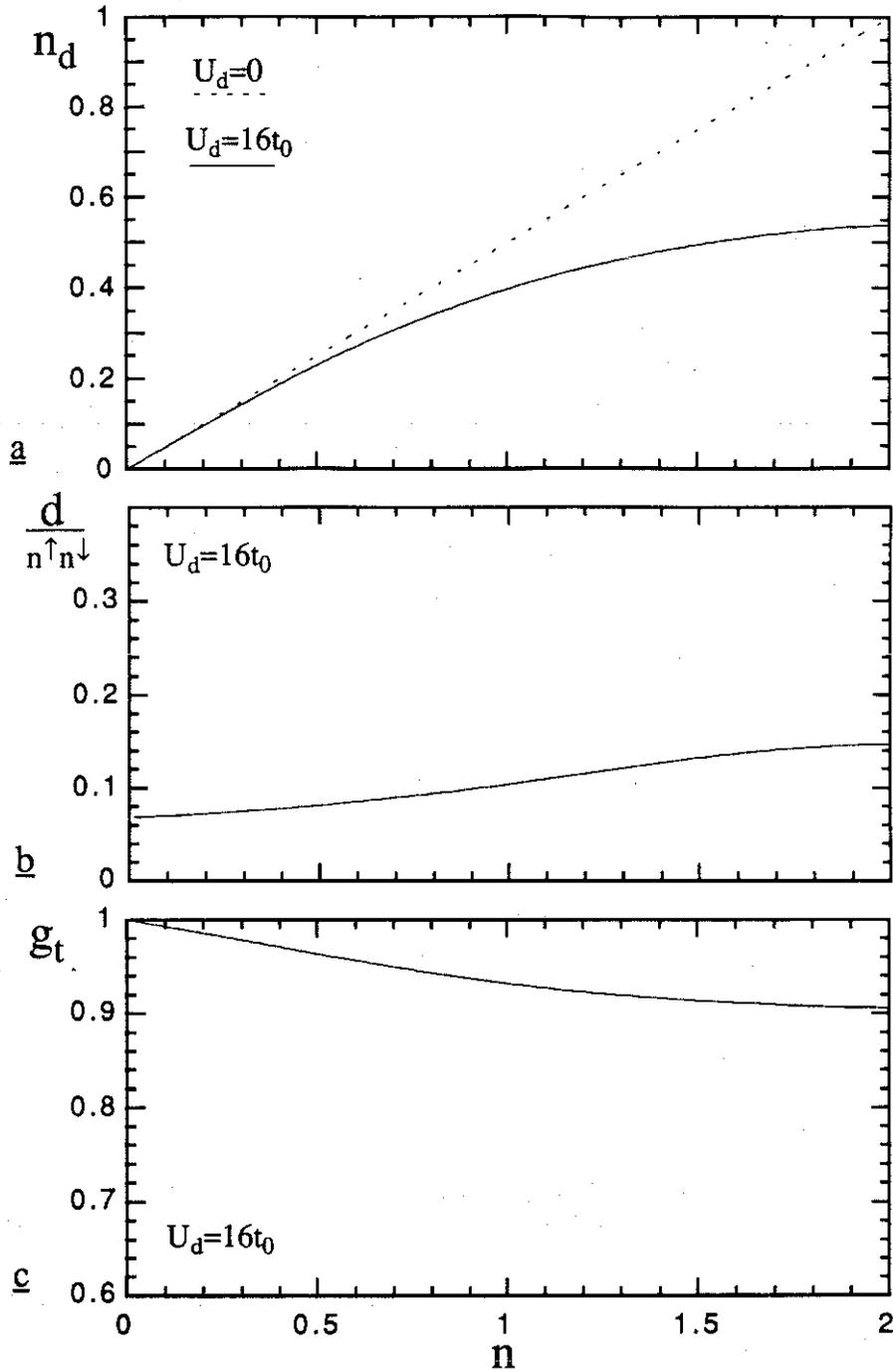
B.2 Le composé dopé

2.a Propriétés

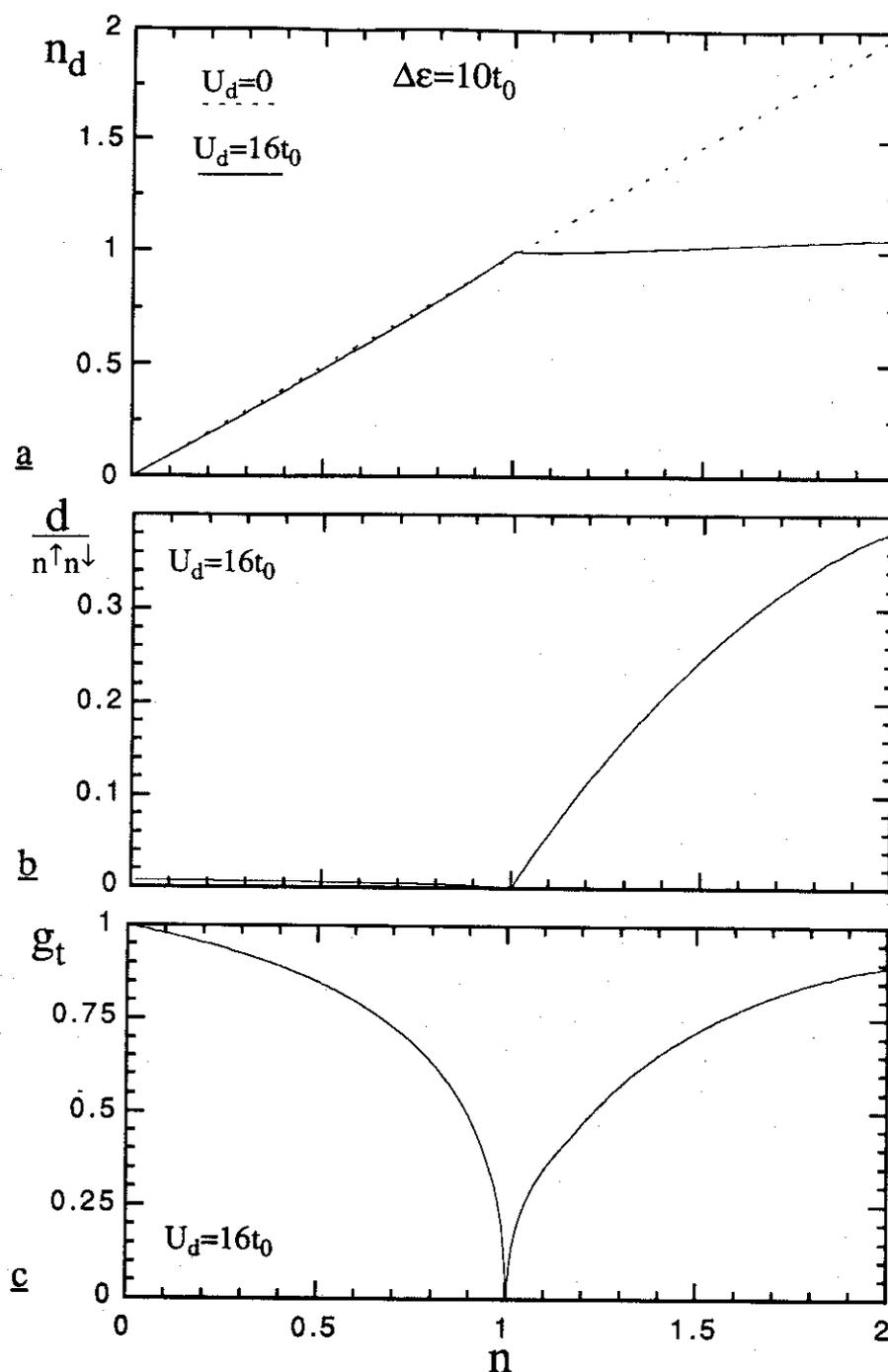
Les figure B.5a,b et c montrent l'évolution du transfert de charge, des corrélations et de la renormalisation de l'énergie cinétique avec le remplissage de la bande liante, n , pour le composé covalent ($\Delta\varepsilon=0$). Les grandeurs représentées évoluent faiblement et régulièrement avec le remplissage sans que le remplissage $n=1$, correspondant au composé non dopé, n'apparaisse comme un point remarquable. Cette évolution se comprend bien si l'on se rappelle que, pour un nombre de trous par maille primitive inférieur à 2, il y a toujours plus de sites que de trous dans le réseau. On est donc toujours dans une situation de "bande moins qu'à moitié pleine".

Dans le cas où $\Delta\varepsilon$ est très supérieur à t_0 , tout en restant inférieur à U_d , la situation est nettement différente, comme l'illustrent les figure B.6a,b et c. On vérifie que le composé non dopé est isolant (comme nous l'avons déjà signalé plus haut). Le dopage a pour effet une rapide évolution vers un état métallique (voir figure B.6c).

Le comportement du système est différent de part et d'autre du remplissage $n=1$. Pour $n<1$ (dopage en électrons), il n'y a pratiquement pas de transfert de charge, la minimisation de l'énergie se faisant uniquement par les corrélations. On retrouve exactement les résultats du modèle à une bande. Par contre, lorsque l'on dope le composé avec des trous ($n>1$), tous les trous ajoutés par le dopage se localisent sur les sites d'oxygène (voir figure B.6a) et les corrélations sur le cuivre diminuent beaucoup plus vite que pour un dopage en électrons.



Figures B.5 : Nombre moyen de trous sur un site de cuivre, n_d , (a), réduction de la probabilité de double occupation sur un site de cuivre (b), et réduction de l'énergie cinétique (c) en fonction du nombre total de trous, n , par maille primitive du plan CuO_2 dans la limite covalente : $\Delta\varepsilon=0$.



Figures B.6 : Nombre moyen de trou sur un site de cuivre (a), réduction de la probabilité de double occupation (b), et réduction de l'énergie cinétique (c) en fonction du nombre total de trous par maille primitive du plan CuO_2 pour une énergie de transfert de charge, $\Delta\varepsilon=10t_0$ et la répulsion coulombienne sur le cuivre U_d .

1.b Généralisation des sous-bandes de Hubbard

Cette situation dissymétrique par rapport à $n=1$ peut s'interpréter en généralisant au modèle à deux bandes le concept des sous-bandes de Hubbard que nous avons rappelé en I.B.2.b. Pour ce faire, il suffit d'ajouter aux deux sous-bandes de Hubbard des sites de cuivre d'énergies ϵ_d et ϵ_d+U_d , une sous-bande d'énergie ϵ_p correspondant aux sites d'oxygène. Dans la situation où $\Delta\epsilon$ est inférieur à U_d , ces sous-bandes sont schématisées sur la figure B.7.

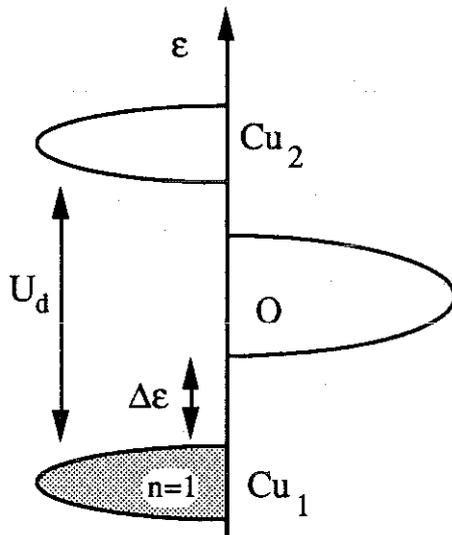


Figure B.7 : Sous-bandes de Hubbard pour le modèle à deux bandes.

Dans le composé non dopé, la première sous-bande de Hubbard est pleine et le composé est donc isolant. Lorsque l'on rajoute un trou, celui-ci a avantage à occuper un site d'oxygène à cause de la forte répulsion sur le cuivre. Le dopage en trous se traduit donc par le remplissage de la sous-bande des oxygènes. On explique ainsi le caractère isolant du composé non dopé et le fort transfert de charge du cuivre vers l'oxygène observé pour les dopages en trous (voir figure B.6a).

Dans le cas où la sous-bande de l'oxygène se trouve très au-dessus de la sous-bande supérieure du cuivre ($\Delta\epsilon \gg U_d$), on retrouve l'isolant de "Mott-Hubbard". Dans le cas opposé ($\Delta\epsilon \ll U_d$), on parle d'isolant de "transfert de charge" (cas de $La_{2-x}Sr_xCuO_4$). Le diagramme de la figure B.4 fait l'interpolation entre ces deux régimes.

Afin d'expliquer le caractère isolant du composé non dopé au-dessus de la température de Néel et le transfert de charge du cuivre vers l'oxygène avec le dopage en trous observé expérimentalement, dans le cadre du modèle à deux bandes paramagnétique, il est donc nécessaire d'avoir :

$$t_0 \ll \Delta\varepsilon \ll U_d \quad [\text{B.3}]$$

Comme pour le modèle de Hubbard (figure I.B.4), il est intéressant de représenter la compressibilité électronique en fonction du potentiel chimique (voir équations [I.B.25] et [I.B.26]). Sur la figure B.8, nous avons porté les courbes obtenues pour une répulsion infinie sur le cuivre et différentes valeurs de l'ionicté, $\Delta\varepsilon$. Pour une ionicté suffisante, on retrouve la première sous-bande de Hubbard des états du cuivre (à gauche et en pointillés) et le bas de la sous-bande due aux sites d'oxygène (à droite et en pointillés).

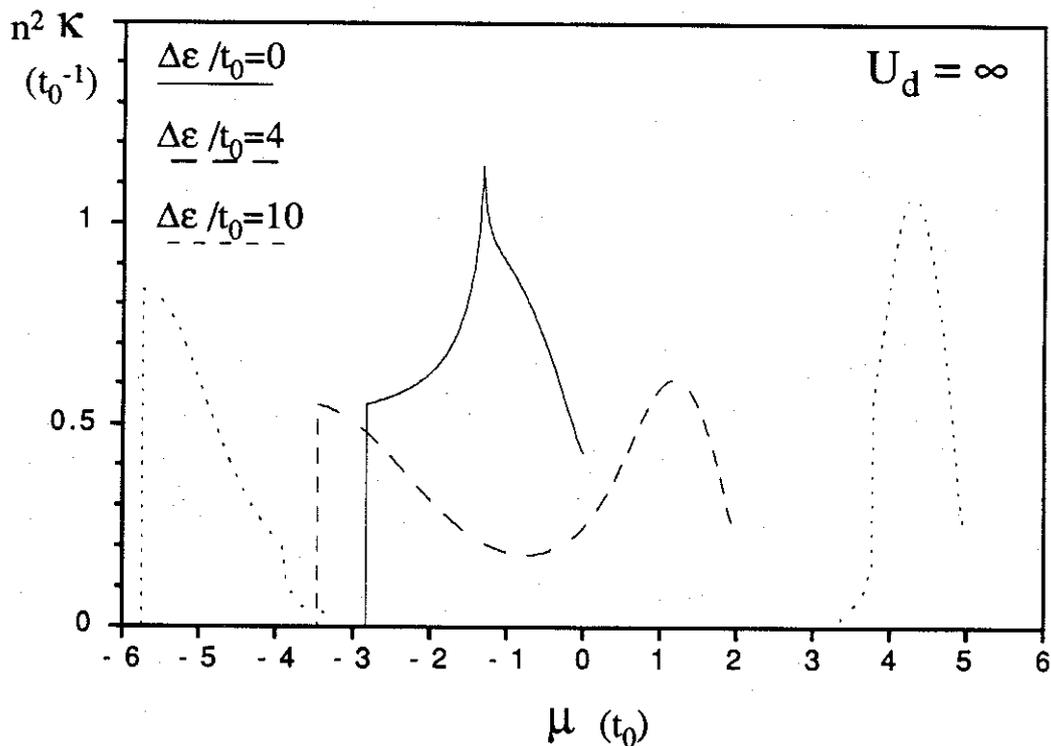


Figure B.8 : Compressibilité électronique en fonction du potentiel chimique. Pour une répulsion infinie sur les sites de cuivre et une ionicté, $\Delta\varepsilon/t_0$, variable.

2.d Effet de la répulsion en dehors des sites de cuivre

La prise en compte d'une répulsion coulombienne sur les sites d'oxygènes (inférieure à $2 U_d$) ne modifie pas qualitativement la discussion. En fait, cette dernière est pratiquement sans effet (pour $\Delta\varepsilon > 0$).

L'effet d'une répulsion coulombienne entre deux trous situés l'un et l'autre sur deux sites premiers voisins, peut être étudié en rajoutant à l'expression de l'énergie totale donnée en [B.1], le terme : $2U_{dp} n_d (1-n_d)$ où U_{dp} est la répulsion coulombienne intersite. Cela revient à traiter cette répulsion dans l'approximation de Hartree-Fock. L'effet principal de cette répulsion est d'abaisser l'ionicté correspondant à la transition métal-isolant / Cyrot & Mayou 90 /. De plus, si cette répulsion est suffisante ($U_{dp} > 2.5t_0$), le système présente une instabilité par rapport à la séparation de phase à dopage en trous suffisamment élevé / Mayou & al. 88 ; Coppersmith & Littlewood 90 /.

II.C LE COMPOSE ANTIFERROMAGNETIQUE

C.1 Le composé non dopé

1.a L'approche de Hartree-Fock

La relation de dispersion du gaz de particules indépendantes sur le réseau de la figure A.1, où l'intégrale de saut, t_1 , entre seconds voisins est nulle, est de la forme :

$$\epsilon_n(k_x, k_y) = \epsilon_n(\cos k_x a + \cos k_y a) \quad [C.1]$$

n est l'indice de bande (liante, antiliante ou non liante). Pour le composé non dopé, la surface de Fermi est exactement identique à celle obtenue pour un réseau carré, et représentée sur la figure II.B.2. A cause du parfait emboîtement de la surface de Fermi, la méthode de Hartree-Fock prévoit donc un composé antiferromagnétique à température nulle quel que soient les paramètres, U_d et $\Delta\epsilon$.

1.b L'approche de Gutzwiller

Oleś et Zaanen ont examiné l'antiferromagnétisme au moyen de la méthode de Gutzwiller / Oleś et Zaanen 88 ; Oleś et Zaanen 89 /. Cependant, leurs calculs numériques portent sur la chaîne linéaire "CuO" et non pas sur la structure réelle du plan CuO₂. Arrigoni, Strinati et Castellani ont examiné le cas du composé non dopé par une approche de bosons esclaves / Arrigoni & al. 90 /. Leurs calculs sont cependant limités au cas d'une répulsion infinie sur les sites de cuivre.

Afin d'appliquer la méthode de Gutzwiller, il est nécessaire de définir, en premier lieu, un état de particules indépendantes présentant un ordre antiferromagnétique sur les sites de cuivre en plus du transfert de charge dont nous avons déjà parlé dans la partie précédente. Pour ce faire, nous adoptons l'hamiltonien de particules indépendantes schématisé par la figure C.1. Nous avons pris l'énergie de site du cuivre comme origine des énergies. Les paramètres D/t_0 et $(t^+ - t^-)/t_0$ déterminent essentiellement l'aimantation alternée, m , sur les sites de cuivre. Le paramètre, $\Delta\epsilon^*/t_0$ détermine surtout le nombre moyen de trous, n_d , par site de cuivre.

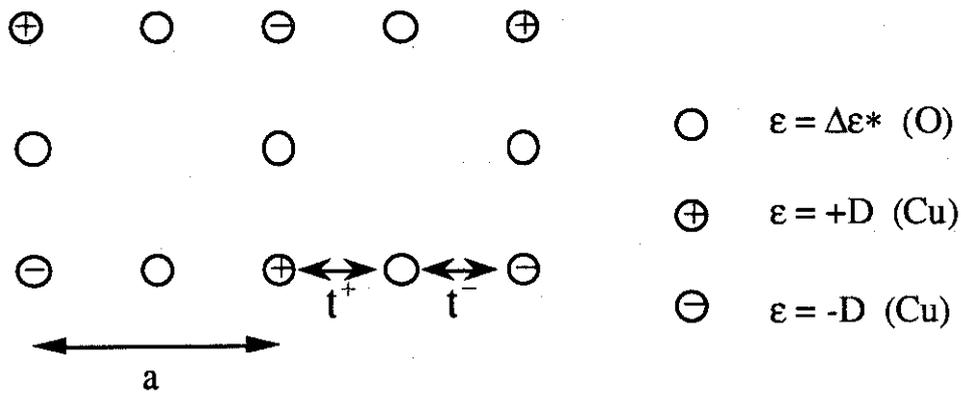


Figure C.1 : Réseau effectif vu par les électrons de spin vers le haut. Les électrons de spin vers le bas voient le même réseau traduit de $(0,a)$.

Du fait de la symétrie antiferromagnétique, on a l'égalité :

$$n_{d\nu}^{\sigma} = n_{d-\nu}^{-\sigma} \quad [\text{C.2}]$$

Où $n_{d\nu}^{\sigma}$ est le nombre moyen de trous de spin σ sur un site de cuivre, les indices ν et $-\nu$ désignant un des deux sous-réseaux alternés du réseau carré des sites de cuivre. Il est alors commode de poser :

$$n_{d+} = n_{d+}^{\uparrow} = n_{d-}^{\downarrow} \quad [\text{C.3}]$$

$$n_{d-} = n_{d-}^{\uparrow} = n_{d+}^{\downarrow} \quad [\text{C.4}]$$

$$m = n_{d+} - n_{d-} \quad [\text{C.4}]$$

et de définir les sous-réseaux virtuels R_{d+} et R_{d-} qui, indépendamment du spin, désignent l'ensemble des sites de cuivre de plus bas et de plus haut niveau effectif ($-D$ ou $+D$) respectivement. On se ramène ainsi à un problème sans spin.

Soient, $n_d = n_{d+} + n_{d-}$ et $n_p = (n - n_d)/2$, les nombres moyens de trous par site de cuivre et d'oxygène respectivement. La formule générale [I.C.34] donne l'expression suivante de l'énergie totale par maille primitive du plan CuO_2 :

$$\frac{\langle H \rangle}{L} = g_t^+ \frac{\langle H_c^+ \rangle_0}{L} + g_t^- \frac{\langle H_c^- \rangle_0}{L} + 2 \Delta \varepsilon n_p + U_d d_d + 2 U_p d_p \quad [\text{C.5}]$$

$$\text{avec } g_t^{\nu} = q(n_d^{\nu}/2, n_d^{-\nu}/2, d_d) q(n_p/2, n_p/2, d_p) \quad [\text{C.6}]$$

la fonction $q(n_1, n_2, d)$ est donnée en [I.C.29], d_d et d_p sont les probabilités de double occupation d'un site de cuivre et d'oxygène, respectivement. $\langle H_C^V \rangle_0$ est la contribution à l'énergie cinétique dans l'état de particules indépendantes des sauts impliquant un site de R_d^V . L'expression [C.6] du facteur de renormalisation redonne bien, dans le cas où la répulsion sur l'oxygène est nulle ($d_p = n_p^2/4$), l'expression utilisée par Oleś et Zaanen. Ces derniers ont obtenu l'expression des facteurs de renormalisation par un dénombrement direct de configurations (lorsque U_p est nul) / Oleś & Zaanen 89 /.

Il ne reste plus qu'à minimiser l'expression [C.5] par rapport aux paramètres variationnels. Il s'agit, premièrement, des paramètres qui déterminent la fonction d'onde de particules indépendantes : $\Delta\epsilon$, D et $t^+ - t^-$ ($t^- + t^+ = t_0$) et, en second lieu, des paramètres qui déterminent les corrélations intrasites d_d et d_p . Le réseau de la figure C.1, présente une structure doublement alternée : répartition alternée des sites de cuivre et d'oxygène et répartition alternée des sites de cuivre d'aimantation positive et négative. En tirant parti de cette structure, le calcul des valeurs moyennes n_d et $\langle H_C^V \rangle_0$ peut se faire de façon très rapide pour un grand nombre de valeurs des paramètres variationnels. Les grandes lignes du calcul sont résumées en appendice.

Nous avons vérifié numériquement que les résultats physiques (valeur de l'énergie, de l'aimantation alternée, corrélations etc...) ne sont pas sensiblement modifiés par la minimisation par rapport à $t^+ - t^-$. Les résultats qui sont présentés plus bas ont donc été obtenus en posant $t^+ = t^-$. Ainsi, notre approche diffère de celle adoptée par Oleś et Zaanen. Ceux-ci ont adopté comme hamiltonien virtuel (définissant l'état de particules indépendantes), l'hamiltonien dont les sauts ont déjà été renormalisés : $t^V = g_t^V t_0$ (voir figure C.1). Ce choix particulier de fonction d'onde implique un calcul autocohérent supplémentaire. Nous venons de voir que ce choix ne change pas sensiblement le résultat.

Comme pour le cas paramagnétique, l'influence d'une répulsion coulombienne sur les sites d'oxygène est très faible. Pour simplifier nous la fixerons à zéro dans ce qui suit. Le système est donc essentiellement décrit par trois paramètres variationnels qui déterminent respectivement le transfert de charge (n_d), l'aimantation alternée (m), et les corrélations (d_d).

1.c La limite covalente

Pour le composé non dopé, sur la figure C.2, nous avons porté le nombre moyen de trous, n_d , et le moment alterné, m , sur un site de cuivre en fonction de la répulsion coulombienne, U_d , dans le cas covalent ($\Delta\varepsilon=0$). Les pointillés permettent de comparer avec l'approche de Hartree-Fock.

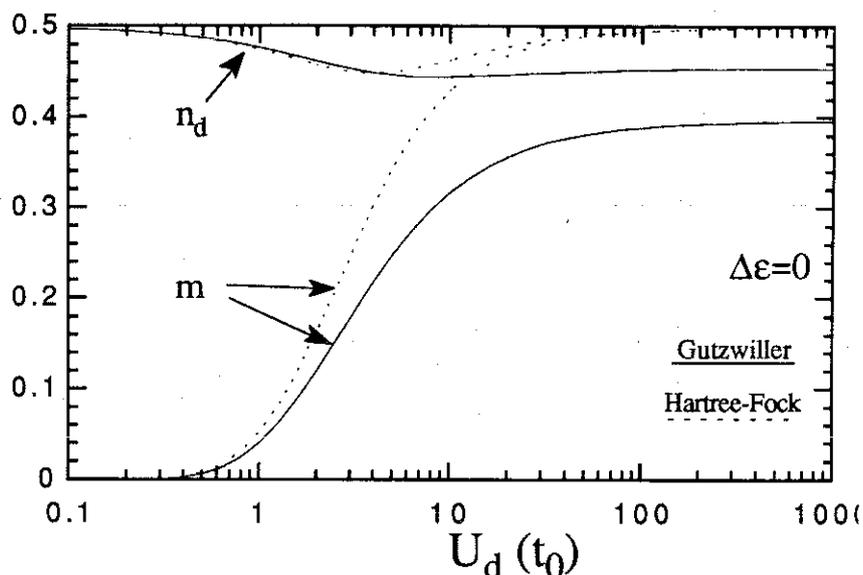


Figure C.2 : moment alterné et nombre de trous sur un site de cuivre en fonction de la répulsion coulombienne sur les sites de cuivre pour le composé non dopé dans la limite covalente.

Dans l'approximation de Hartree-Fock, lorsque la répulsion sur le cuivre est très forte, non seulement, l'antiferromagnétisme est total, mais le transfert de charge disparaît. Contrairement à ce qui se produit dans le modèle à une bande, la méthode de Gutzwiller diffère nettement de la méthode de Hartree-Fock. Le moment alterné ne tend pas vers 1 dans la limite des fortes répulsions et est sensiblement réduit par rapport au résultat en Hartree-Fock. La figure C.3 illustre l'importance des corrélations. Les facteurs de renormalisation ne tendent pas vers zéro dans la limite des fortes répulsions.

Sur la figure C.4, nous avons porté les énergies obtenues dans différentes approximations. Dans l'approche de Hartree-Fock, et dans la limite des fortes répulsions, chaque trou est localisé sur un site d'oxygène si l'on ne prend en compte que le transfert de charge et dans une cellule CuO_4 si l'on ne prend en compte que l'antiferromagnétisme (à cause de la divergence des niveaux effectifs de R_d et de R_{d+} respectivement). L'énergie du système tend donc respectivement vers 0 et vers -2 dans ces deux cas.

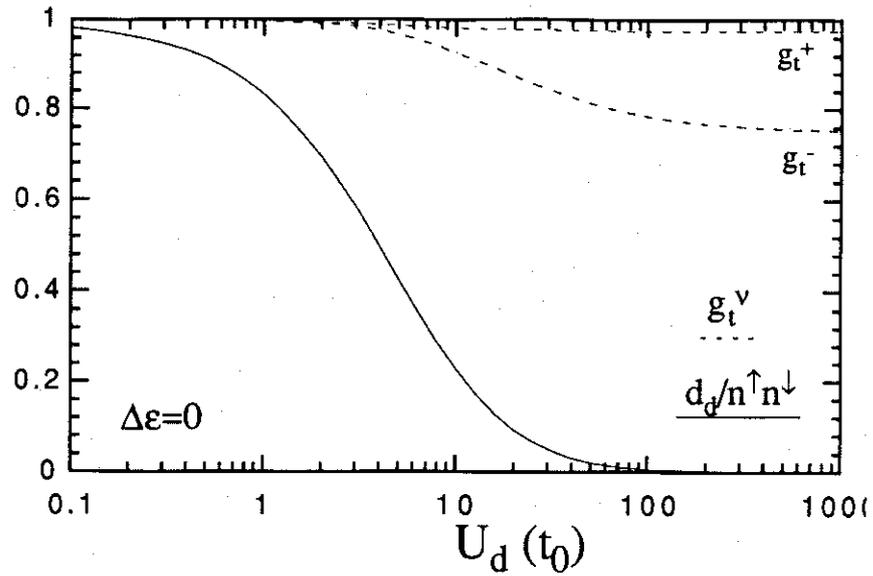


Figure C.3 : Réduction de la probabilité de double occupation sur le cuivre, $d_d/n^{\uparrow}n^{\downarrow}$, et des probabilités de saut à partir d'un site de cuivre du réseau R_{d+} , g_t^+ , et de R_{d-} , g_t^- . On considère le composé non-dopé avec $\Delta\varepsilon=0$.

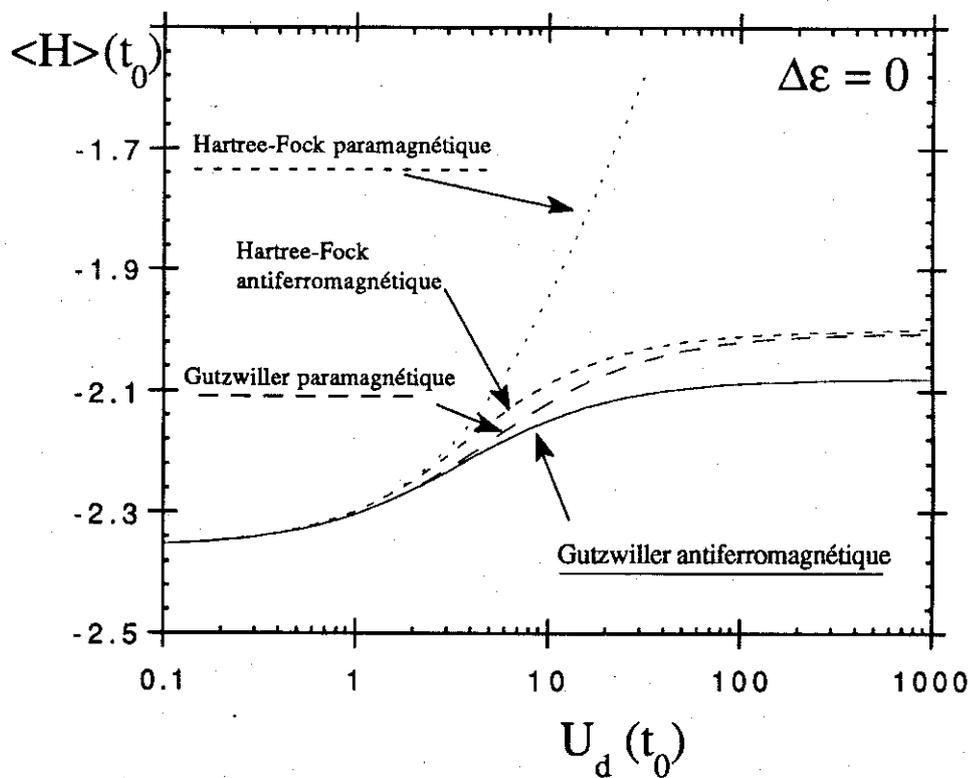


Figure C.4 : Energies totales du fondamental pour le composé non dopé dans la limite covalente, dans différentes approximations et en fonction de la répulsion coulombienne sur le cuivre, U_d .

Il apparaît que la prise en compte des seules corrélations abaisse plus l'énergie que la prise en compte du seul antiferromagnétisme. De plus, l'énergie de stabilisation de ce dernier, $\langle H \rangle^P - \langle H \rangle^{AF}$, est nettement réduite par la prise en compte des corrélations. Ce point a été noté par Oleś et Zaanen qui ont introduit une théorie de Stoner renormalisée dans la limite covalente / Oleś & Zaanen 89 /. La figure C.4, montre que cette stabilisation est maximum dans la limite des fortes corrélations.

1.c Ionicté quelconque

L'évolution du transfert de charge et de l'antiferromagnétisme pour $U_d = \infty$ en fonction de l'ionicté du composé, $\Delta\epsilon/t_0$, apparaît sur la figure C.5. Dans la limite ionique, l'antiferromagnétisme est saturé. Cela correspond bien au résultat obtenu dans le modèle à une bande. On retrouve donc, dans cette limite, le fait que la méthode de Gutzwiller néglige les fluctuations quantiques.

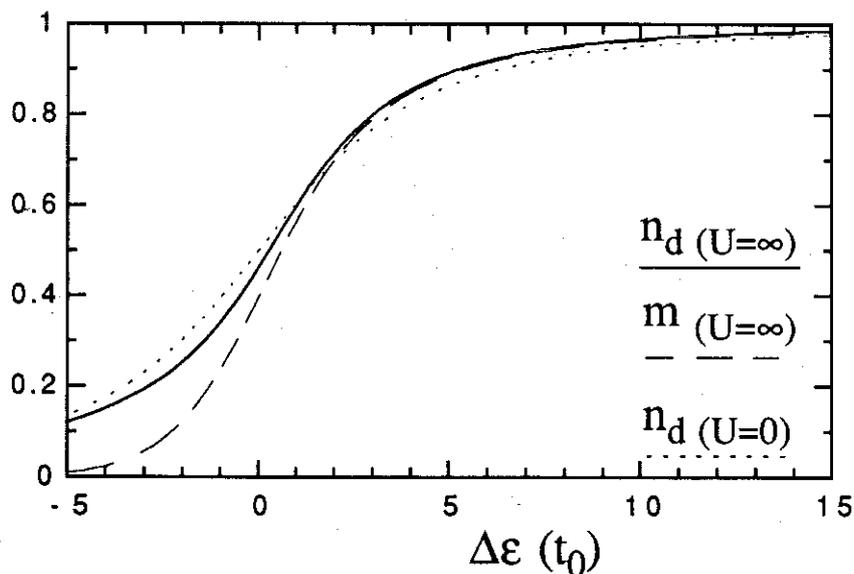


Figure C.5 : Nombre de trous et aimantation alternée sur les sites de cuivre pour le composé non dopé avec une répulsion sur infinie sur les sites de cuivre, en fonction de l'énergie de transfert de charge cuivre-oxygène, $\Delta\epsilon$. Le nombre de trous en l'absence d'interaction a aussi été rappelé (pointillés).

Sur la figure C.6, nous avons porté l'évolution des facteurs de renormalisation des intégrales de saut selon qu'elles impliquent un site de R_d (g_t^-) ou de R_{d+} (g_t^+). Comme l'ont remarqué, Arrigoni et al., dans la limite des fortes ionicités, il semble qu'un trou soit localisé dans une cellule CuO_4 / Arrigoni & al. 90 /.

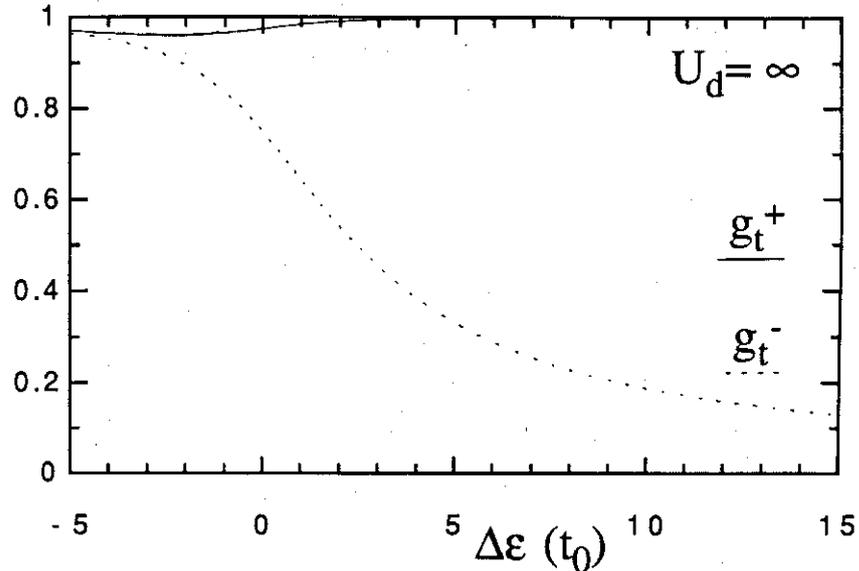


Figure C.6 : Facteurs de renormalisation des intégrales de saut à partir d'un site de cuivre de R_{d+} , (g_t^+), et de R_{d-} , (g_t^-).

La figure C.7 représente l'évolution de la stabilisation de l'antiferromagnétisme. On note la présence d'un maximum correspondant à la transition métal-insulant (voir figure B.3). A un facteur près, on peut associer cette énergie au couplage effectif entre spins. Dans la limite où $\Delta\epsilon$ est très supérieur à t_0 , la théorie des perturbations donne :

$$J^* \cong 4 t_0^4 / \Delta\epsilon^3 \quad [C.7]$$

On constate que la méthode de Gutzwiller surestime très fortement cette valeur (pour $\Delta\epsilon=10t_0$, on trouve $0.7 t_0$ au lieu de $0.004 t_0$). Cela provient de la mauvaise adéquation de la méthode de Gutzwiller à la limite des fortes répulsions ($U_d \rightarrow \infty$) et des fortes ionicités ($\Delta\epsilon \rightarrow \infty$). Arrigoni et al. ont estimé le couplage J^* en fonction de $\Delta\epsilon$ en interpolant entre l'expression donnée par la théorie des perturbations ([C.7]) et le résultat de la méthode de Gutzwiller dans la limite où $\Delta\epsilon$ est de l'ordre de t_0 . En comparant à la valeur expérimentale de 0.14 eV, ils en ont déduit deux valeurs possibles de $\Delta\epsilon/t_0$: 0.5 et 4.5 ($t_0 \cong 1.5$ eV) / Arrigoni & al. 90 /.

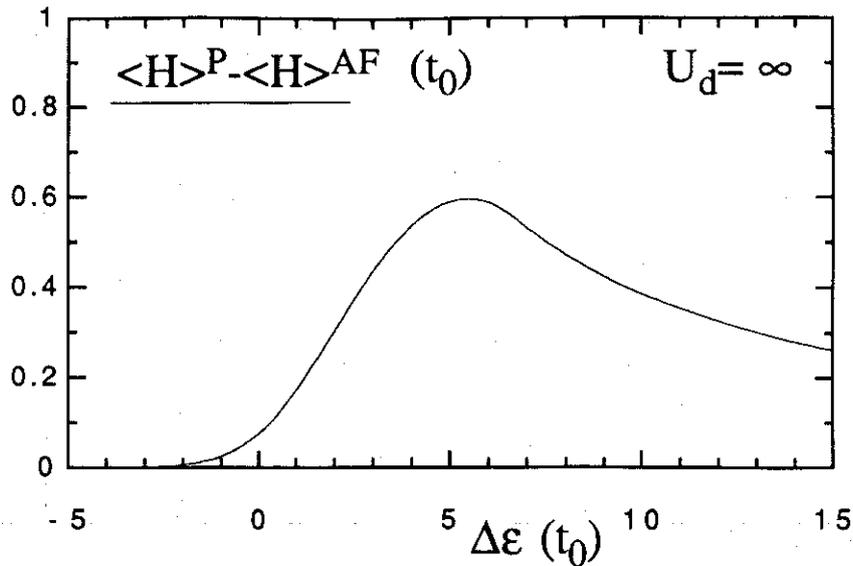


Figure C.7 : stabilisation de l'antiferromagnétisme en fonction de l'ionicité pour une répulsion sur le cuivre infinie.

La figure C.8 met en évidence la région où le moment alterné sur les sites de cuivre est supérieur à $0.5\mu_B$. La méthode de Gutzwiller surestime le moment alterné dans cette région. Le moment observé expérimentalement étant de $0.5 \mu_B$ / Vaknin & al. 87 /, cette région indique donc les valeurs des paramètres $\Delta\varepsilon$ et U_d compatibles avec cette observation.

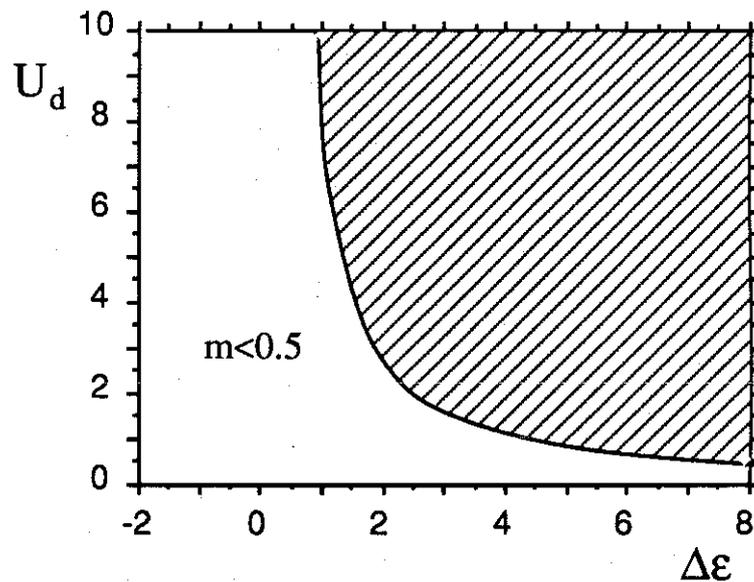


Figure C.8 : La zone hachurée indique la région de plan $(\Delta\varepsilon, U_d)$ où l'on trouve, par la méthode de Gutzwiller, un moment alterné supérieur à $0.5 \mu_B$ sur les sites de cuivre.

C.2 Le composé dopé

2.a Effet de la covalence sur l'antiferromagnétisme

2.a α La susceptibilité

Comme dans le modèle à une bande, lorsque le remplissage de la bande liante est différent de 1, le parfait emboîtement de la surface de Fermi disparaît et la susceptibilité par rapport à l'antiferromagnétisme est finie. Cependant, le calcul de cette dernière ne peut plus se faire par la formule [II.B.10]. Cette formule doit être généralisée au cas où la relation de dispersion comprend plusieurs branches. Un champ magnétique sinusoïdal appliqué au système couple des états des différentes branches. Ici, il y a trois branches à prendre en compte : celle des états liants, celle des états antiliants et celle des états non liants de l'oxygène.

Le calcul de cette susceptibilité montre que l'effet du "couplage interbranche" (termes de Van Vleck), n'est pas négligeable lorsque $\Delta\epsilon$ est de l'ordre de t_0 et qu'il se traduit par une réduction de la susceptibilité. En outre, la susceptibilité ainsi calculée augmente avec l'ionicté.

Cependant, ce calcul n'est pas suffisant pour déterminer la limite de stabilité de l'état paramagnétique car il ne tient pas compte du transfert de charge. Nous avons vu que, dans la limite des faibles répulsions (pour le cas paramagnétique), le transfert de charge a pour effet de diminuer le nombre moyen de trous sur les sites de cuivre en abaissant l'ionicté effective, $\Delta\epsilon^*$. Par conséquent, on s'attend à ce que la susceptibilité réelle du système soit encore abaissée sous l'effet du transfert de charge. La susceptibilité et donc, le domaine de stabilité de la phase antiferromagnétique sont donc réduits, dans l'approche de Hartree-Fock, par la prise en compte de la covalence ($\Delta\epsilon < \infty$).

2.a β Les corrélations antiferromagnétiques

Un test de la présence de corrélations antiferromagnétiques est la stabilisation de la phase présentant un ordre antiferromagnétique à longue distance par rapport à la phase paramagnétique simple. Afin de représenter l'effet de la prise en compte des sites d'oxygène par rapport au modèle à une bande, nous avons porté, sur la figure C.9, la région du plan ($n, \Delta\epsilon$) pour laquelle les sites de cuivre présentent un moment alterné non nul lorsque la répulsion coulombienne sur le cuivre est égale à la largeur de la bande

liante, W^* (W^* est donnée en fonction de t_0 et $\Delta\epsilon$ sur la figure A.4). Les tirets représentent le résultat obtenu par la méthode de Hartree-Fock et le trait plein correspond à la méthode de Gutzwiller. On vérifie que la covalence réduit le domaine de stabilité de l'antiferromagnétisme.

On note, en outre, une remarquable symétrie du domaine antiferromagnétique par rapport à l'axe $n=1$ (composé non dopé), bien que la symétrie électron-trou ne soit plus vérifiée dans le modèle à deux bandes. Par la méthode de Gutzwiller, lorsque l'ionicité tend vers l'infini, contrairement à ce qui se passe avec la méthode de Hartree-Fock, le dopage critique ne converge pas vers la valeur du dopage critique obtenue dans le modèle à une bande (on trouve 35% au lieu de 22%). Une fois de plus, il semble que la méthode de Gutzwiller soit mal adaptée à l'étude du composé fortement ionique dans le modèle à deux bandes.

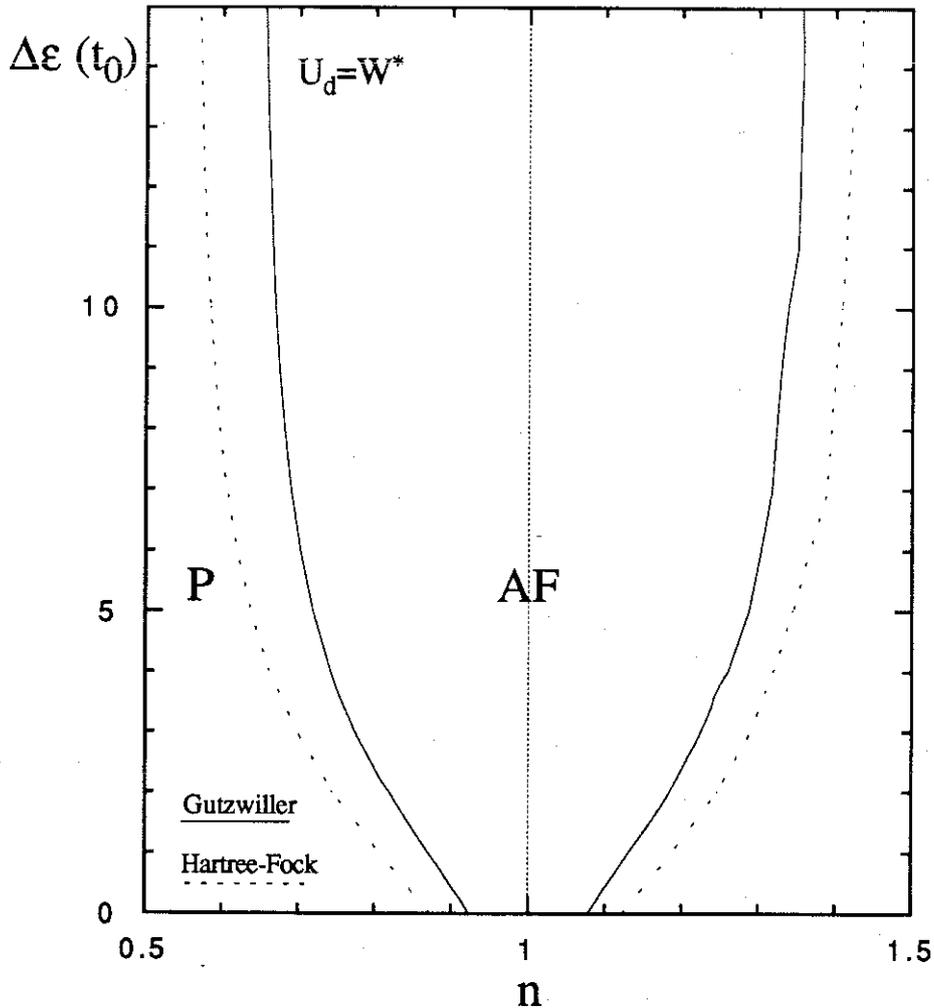


Figure C.9 : Zone de stabilité de l'antiferromagnétisme dans le plan $(n, \Delta\epsilon)$ pour une répulsion coulombienne sur le cuivre égale à la largeur de la bande liante. (n est le remplissage de la bande liante)

Bien que le dopage critique dans la limite covalente soit toujours plus faible que le dopage critique dans la limite ionique (modèle à une bande), on ne peut donc conclure à une décroissance constante de ce dopage avec la diminution de l'ionicté et il n'est pas impossible de trouver des dopages critiques supérieurs à la valeur maximum de 24% que nous avons obtenue dans le modèle à une bande. La figure C.10 montre une augmentation rapide du dopage critique avec l'ionicté du composé pour une répulsion coulombienne fixée par rapport à t_0 .

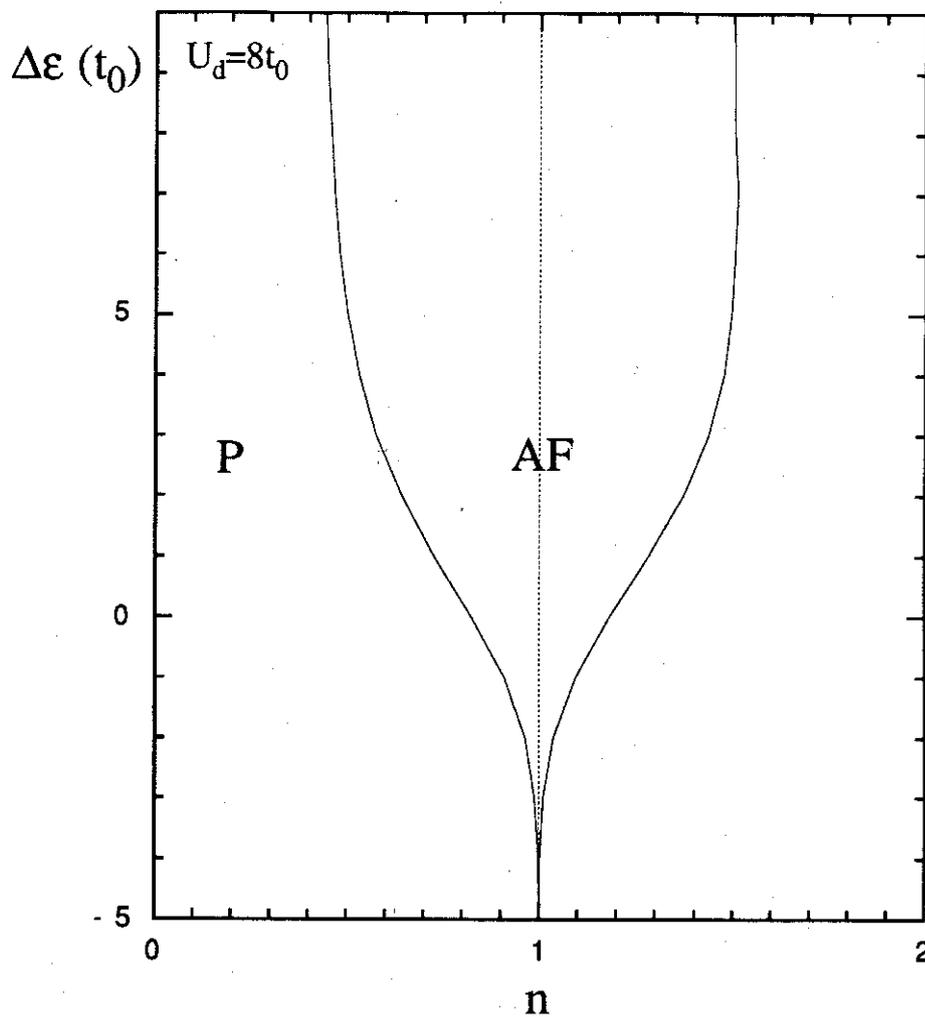


Figure C.10 : Zone de stabilité de l'antiferromagnétisme dans le plan $(n, \Delta\epsilon)$ pour une répulsion coulombienne sur le cuivre égale à $8 t_0$.

Si l'on détermine la valeur du dopage critique pour les valeurs des paramètres du modèle à deux bandes : $U_d=5t_0$ et $\Delta\varepsilon=t_0$, on trouve environ 25% tandis que le moment alterné sur le cuivre est de $0.5 \mu_B$. Ce résultat suggère des corrélations antiferromagnétiques dans la phase supraconductrice de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Le dopage critique obtenu pour les mêmes valeurs des paramètres du modèle à deux bandes par Oles et Zaanen est d'environ 15%. Il semble donc que la réduction du plan CuO_2 à une chaîne linéaire CuO conduise à une sous-estimation de ce dopage.

La figure C.11 montre l'évolution des dopages critiques avec la répulsion coulombienne sur le cuivre lorsque le composé est parfaitement covalent. (Contrairement au diagramme analogue dans le modèle à une bande, on note une augmentation incessante du dopage critique avec la répulsion).

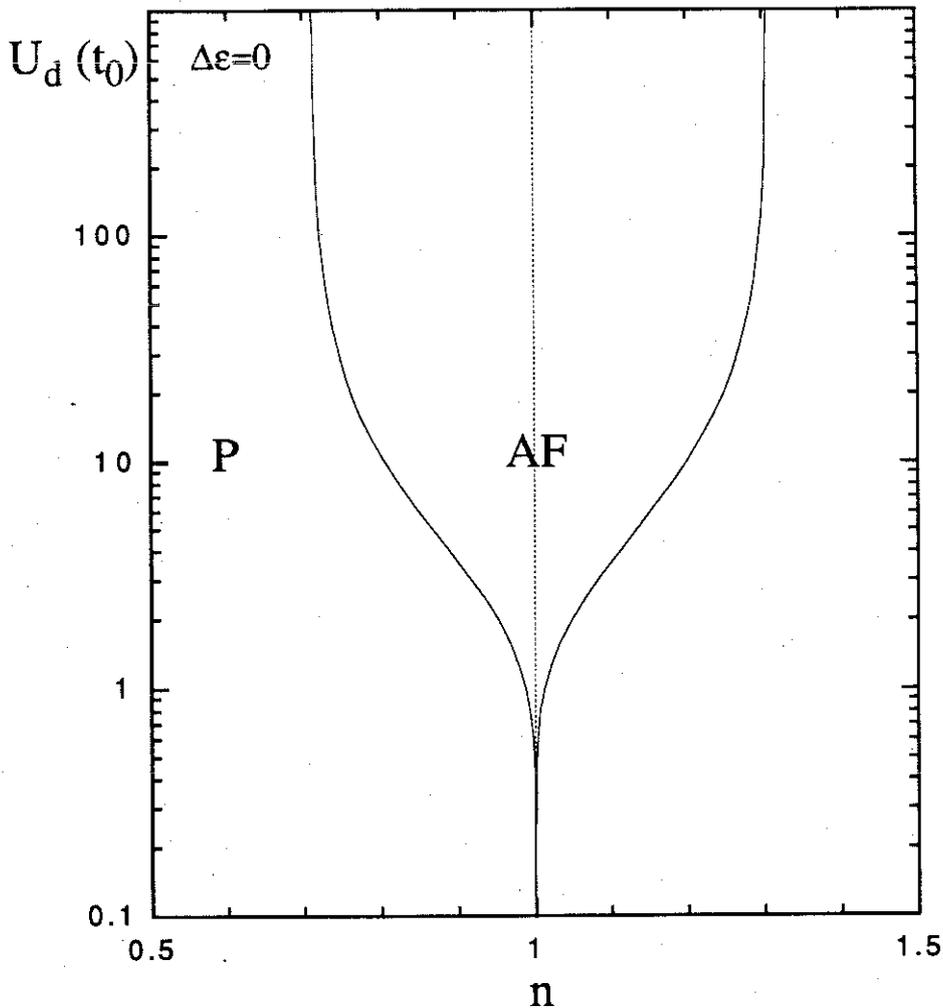


Figure C.11 : Zone de stabilité de l'antiferromagnétisme dans le plan (n, U_d) dans la limite covalente: $\Delta\varepsilon = 0$.

2.b Evolution des propriétés avec le dopage

Comme dans le modèle à une bande, le moment alterné moyen décroît toujours continûment avec le dopage pour s'annuler au dopage critique. En outre, la figure C.12 montre une augmentation du nombre moyen de trous sur le cuivre avec l'antiferromagnétisme. Surtout, il apparaît que, même pour le composé covalent, dès que la répulsion sur le cuivre est suffisante ($U_d > \approx 4t_0$), presque tous les trous ajoutés par le dopage vont sur les sites d'oxygène. Par conséquent, contrairement au cas paramagnétique, le transfert de charge du cuivre vers l'oxygène observé expérimentalement avec le dopage en trous ne nécessite pas une forte ionicité pour pouvoir être expliqué.

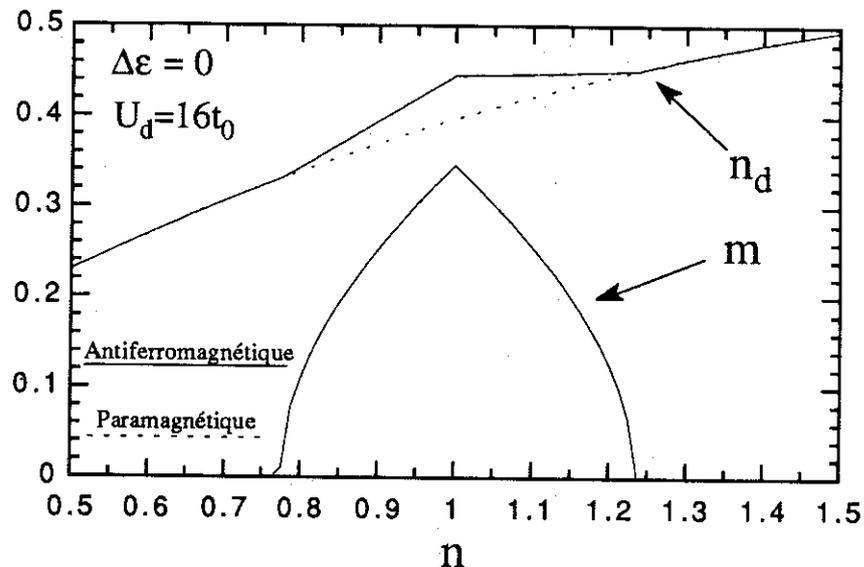


Figure C.12 : Moment alterné, m , et nombre moyen de trous sur le cuivre, n_d , en fonction de la bande liante, n .

Dans le composé covalent, les corrélations sont peu affectées par la présence de l'antiferromagnétisme au voisinage de la bande demi-pleine. Par contre, pour le composé ionique ($\Delta\varepsilon > \approx 4t_0$), on retrouve la réduction importante des corrélations que nous avons observée dans le modèle à une bande (voir figure II.C.6). En outre, comme nous l'avons déjà noté pour le composé non dopé, les deux facteurs de renormalisation des intégrales de saut diffèrent l'un de l'autre en présence d'antiferromagnétisme.

Comme le montre la figure C.13, le dopage provoque une rapide diminution de la stabilité de l'antiferromagnétisme.

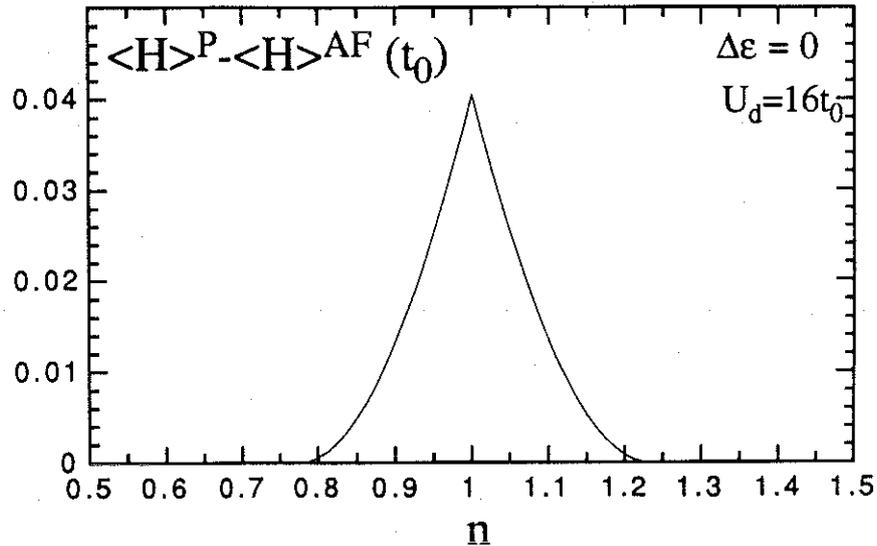


Figure C.13 : Stabilisation de l'ordre antiferromagnétique, $\langle H \rangle^P - \langle H \rangle^{AF}$, en fonction du remplissage de la bande liante.

Sur la figure C.14, nous avons porté le potentiel chimique en fonction du remplissage. L'antiferromagnétisme a pour effet d'introduire une discontinuité de potentiel chimique en $n=1$ (le composé non dopé antiferromagnétique est toujours isolant). En outre, le potentiel chimique est décroissant dans la région où le système est ordonné antiferromagnétiquement.

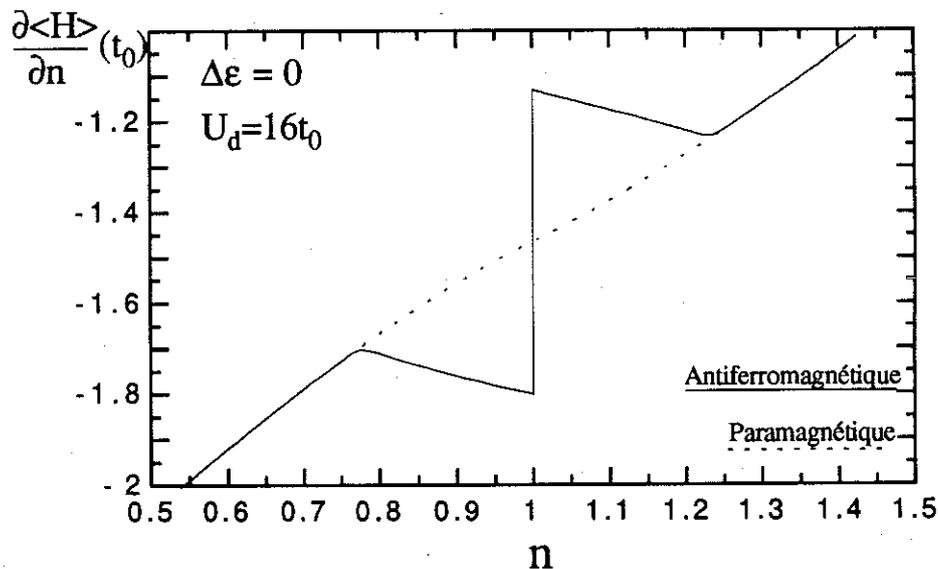


Figure C.14 : Potentiel chimique, $\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial n}$, en fonction du remplissage de la bande liante.

Cela implique une instabilité du système par rapport à la séparation de phases. L'instabilité par rapport à la séparation de phases que nous avons trouvée dans le modèle à une bande est donc toujours présente dans le composé covalent. On vérifie que si l'on minimise l'énergie du système en autorisant la séparation de phases (comme nous l'avons fait au chapitre précédent), le système se scinde en une phase non dopée antiferromagnétique et une phase dopée paramagnétique. (Contrairement au modèle à une bande, la phase dopée est toujours paramagnétique, même dans la limite des fortes répulsions).

2.d Effet de la répulsion en dehors des sites de cuivre

Comme nous l'avons déjà mentionné, la prise en compte d'une répulsion coulombienne sur les sites d'oxygène a peu d'influence sur les propriétés du fondamental. L'effet principal de cette répulsion est une légère augmentation du domaine de stabilité de l'antiferromagnétisme probablement liée à une diminution du transfert de charge.

L'effet d'une répulsion intersite peut être grossièrement pris en compte dans l'équation [C.5], par l'introduction d'un terme supplémentaire de type champ moyen comme nous l'avons déjà signalé pour le cas paramagnétique. Cette répulsion se traduit par une augmentation de l'antiferromagnétisme (moment alterné, dopage critique, stabilité). L'effet sur le transfert de charge dépend de l'ionicté : n_d est abaissé dans le cas covalent et augmenté dans le cas ionique. En outre, l'instabilité par rapport à la séparation de phases est nettement réduite.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la méthode de Gutzwiller au modèle à deux bandes qui permet d'étudier les propriétés électroniques des oxydes supraconducteurs en fonction de l'ionicté ($\Delta\varepsilon/t_0$) de la liaison cuivre-oxygène dans le plan CuO_2 .

Dans un premier temps, nous avons considéré un état paramagnétique.

Nous avons vu que le comportement du système était nettement différent selon que la liaison cuivre-oxygène était plutôt covalente ($\Delta\varepsilon < 4t_0$) ou plutôt ionique ($\Delta\varepsilon > 4t_0$). Dans le premier cas, tant que le nombre de trous par site de cuivre est inférieur à 2, le système reste métallique quelque soit la répulsion coulombienne sur le cuivre et ses propriétés physiques dépendent très peu du nombre de trous par site de cuivre. Dans le cas ionique il faut distinguer entre les régimes "Mott Hubbard" : $\Delta\varepsilon \gg U_d$, et "transfert de charge" : $\Delta\varepsilon \ll U_d$. Dans ce dernier cas, on retrouve le transfert de charge du cuivre vers l'oxygène observé expérimentalement avec le dopage en trous et le caractère isolant du composé non dopé (au dessus de la température de Néel). Dans le cas du composé non dopé, la méthode de Gutzwiller permet de déterminer la limite entre les phases isolante et métallique en fonction de l'ionicté et de la répulsion coulombienne sur le cuivre. Cette limite fait l'interpolation entre les cas de l'isolant de Mott-Hubbard et de l'isolant de transfert de charge. La valeur de l'ionicté ($\Delta\varepsilon/t_0$) requise pour que l'état soit isolant est cependant très élevée ($\Delta\varepsilon/t_0 \cong 7$). Même si cette valeur est probablement surestimée par la méthode de Gutzwiller et par l'omission de la répulsion coulombienne intersite, ce résultat suggère un régime plutôt ionique pour le composé La_2CuO_4 .

Dans un second temps, nous avons pris en compte les corrélations antiferromagnétiques en donnant à l'état de Gutzwiller, un moment magnétique moyen alterné sur les sites de cuivre.

Le composé non dopé est antiferromagnétique quelque soit la répulsion coulombienne et l'ionicté du composé. Cependant, des valeurs minima de l'ionicté et de la répulsion coulombienne sont nécessaires à l'obtention d'un moment alterné et d'une énergie de stabilisation de l'état antiferromagnétique qui ne soient pas négligeables devant $1\mu_B$ et t_0 respectivement. Dans le cas où la liaison cuivre-oxygène est covalente ($|\Delta\varepsilon/t_0| \ll 1$), la méthode de Gutzwiller prévoit un antiferromagnétisme non saturé ($m < n_d$)

même lorsque la répulsion sur le cuivre est infinie, dont la stabilisation est maximum dans la limite des fortes répulsions. De plus, contrairement à ce que nous avons vu dans le cas du modèle à une bande (pour le composé non dopé), le système présente d'importantes corrélations ($d \langle n^{\uparrow} n^{\downarrow} \rangle$) et la correction apportée par la méthode de Gutzwiller au résultat en Hartree-Fock est substantielle (pour $U > t_0$). En outre, pour une répulsion sur le cuivre infinie ($U_d \gg t_0$), la stabilisation de l'état antiferromagnétique par rapport à l'état paramagnétique est maximum pour une ionicité de l'ordre de celle correspondant à la transition métal-isolant observée dans le cas paramagnétique ($\Delta\varepsilon/t_0 \approx 7$).

Pour les valeurs des paramètres du modèle à deux bandes estimées par les calculs *ab initio* ($U_d \approx 8t_0$, $\Delta\varepsilon \approx t_0$), le dopage critique au delà duquel la phase antiferromagnétique n'est plus stabilisée par rapport à la phase paramagnétique simple est d'environ 25%. Le moment alterné moyen dans le composé non dopé est alors de $0.5 \mu_B$ (conformément à la valeur expérimentale). Ce résultat suggère d'importantes corrélations antiferromagnétiques dans la phase supraconductrice de La_2CuO_4 .

Pour une répulsion coulombienne sur le cuivre égale à la largeur de la bande antiliante ($U_d = W^*$), nous avons vu que la diminution de l'énergie de transfert de charge cuivre-oxygène, $\Delta\varepsilon$, réduit le dopage critique (celui-ci passe de 22% dans la limite ionique (modèle à une bande) à 8% pour le cas parfaitement covalent ($\Delta\varepsilon = 0$)). Le moment alterné moyen, la stabilité de l'antiferromagnétisme et le dopage critique augmentent toujours avec la répulsion coulombienne sur le cuivre et l'ionicité du composé (lorsque $\Delta\varepsilon$ reste de l'ordre de t_0). De plus, il apparaît une symétrie remarquable entre les dopages en trous et les dopages en électrons. Enfin, la comparaison avec les résultats d'Oleś et Zaanen dans le cas d'une chaîne linéaire CuO suggère une augmentation des corrélations antiferromagnétiques dans le plan CuO_2 par rapport à la chaîne CuO .

En présence d'antiferromagnétisme, tous les trous ajoutés par le dopage se localisent sur les sites d'oxygène même lorsque la liaison cuivre-oxygène est covalente. En outre, comme dans le modèle à une bande, le système antiferromagnétique présente une instabilité par rapport à la séparation de phases. Cette dernière est toutefois réduite par la prise en compte d'une répulsion intersite.

Si l'on adopte les valeurs des paramètres du modèle à deux bandes estimées par les calculs *ab initio*, qui correspondent à un régime plutôt covalent, on ne trouve pas, concernant l'antiferromagnétisme, de résultat incompatible avec l'expérience. Cependant, nous avons vu que la méthode de Gutzwiller traite mal le cas des fortes ionicités ($\Delta\varepsilon \gg t_0$) (au même titre que les fortes répulsions). Elle surestime, dans cette limite, la valeur du

moment alterné moyen, la stabilisation de l'antiferromagnétisme et le dopage critique. D'ailleurs, l'étude du modèle à une bande nous a montré que les propriétés magnétiques du composé sont assez bien expliquées dans cette limite et nous avons vu, avec l'étude de la phase paramagnétique, que l'explication du caractère isolant du composé au-dessus de sa température de Néel (par la méthode de Gutzwiller) nécessite une ionicité importante. Concernant les valeurs des paramètres du système, la seule conclusion qui est donc certaine c'est que l'énergie de transfert de charge cuivre-oxygène, $\Delta\varepsilon$, et la répulsion coulombienne sur le cuivre, U_d , sont au moins de l'ordre de l'intégrale de saut cuivre-oxygène, t_0 , et de la largeur de la bande antiliante, W^* , respectivement.

APPENDICE

Ap.1 Calcul des valeurs moyennes dans l'état de particules indépendantes.

Afin de calculer les quantités moyennes dans l'état de particules indépendantes que sont n_p , n_d et $\langle H_{cv} \rangle_0/L$, nous utilisons le même principe qu'au chapitre précédent. Les densités d'états partielles sont déterminées sur les différents sites afin d'en déduire, par intégration, les quantités qui nous sont utiles. Par exemple, si l'on note $\rho_p(\epsilon)$ et $\rho_d(\epsilon)$ les densités locales sur un site d'oxygène et de cuivre respectivement, on a :

$$n_p = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \rho_{p(\epsilon)} d\epsilon \quad ; \quad n_d = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \rho_{d(\epsilon)} d\epsilon \quad [\text{Ap.1}]$$

Cependant, il apparaît une difficulté supplémentaire liée à la dichotomie de l'énergie cinétique en deux parties. Si, comme nous l'avons vu en II.Ap, la valeur moyenne de l'énergie cinétique, $\langle H_c \rangle_0$, dans l'état non corrélé se déduit immédiatement de la valeur moyenne de l'hamiltonien variationnel, $\langle H_v \rangle_0$, et des nombres de particules par site, ce n'est plus le cas des termes $\langle H_{c+} \rangle_0$ et $\langle H_{c-} \rangle_0$. Cependant, en tirant parti de la structure doublement alternée du réseau, on obtient l'expression :

$$\langle H_{cv}^0 \rangle = 2 \frac{t}{v} \int_{-\infty}^{\epsilon_f} (\epsilon - \epsilon_{dv}) \rho_{dv(\epsilon)} d\epsilon \quad [\text{Ap.2}]$$

Par ailleurs, comme pour le modèle à une bande, la structure alternée du réseau permet d'exprimer simplement les différentes densités d'états (totale et partielles) en fonction d'une densité d'états effective qui ne dépend pas des paramètres variationnels. Cette dernière, $\hat{\rho}(\epsilon)$, est reliée, là encore, à la densité d'états du réseau carré, ρ_c :

$$\rho_{(\varepsilon)} = |(2\varepsilon + D)\tilde{\varepsilon}_+ + (2\varepsilon - D)\tilde{\varepsilon}_-| \hat{\rho}_{(\hat{\varepsilon})} + \delta_{(\varepsilon - \Delta)}$$

$$\rho_{dv(\varepsilon)} = |\varepsilon - \Delta| \tilde{\varepsilon}_v \hat{\rho}_{(\hat{\varepsilon})}$$

$$\text{avec } \hat{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon}_+ \tilde{\varepsilon}_- \quad \text{et} \quad \tilde{\varepsilon}_v = (\varepsilon - \varepsilon_p)(\varepsilon - \varepsilon_{dv}) - 4t_v \quad [\text{Ap.3}]$$

$$\text{et} \quad \hat{\rho}_{(\hat{\varepsilon})} = \frac{\rho_c(\sqrt{\hat{\varepsilon}})}{\sqrt{\hat{\varepsilon}}} \quad [\text{Ap.4}]$$

$\rho_c(\varepsilon)$ est la densité d'états du réseau carré avec, pour intégrale de saut entre premiers voisins : $t, t = t^2 - \delta t^2$. Le paramètre Δ détermine le gap central entre les bandes liantes et antiliantes effectives tandis que D ouvre un gap au centre de chacune de ces sous-bandes.

Comme dans le cas du modèle à une bande, il est plus commode de ne pas prendre, comme variable d'intégration, l'énergie ε mais le nombre de particules, n , d'énergie inférieure à ε (donné en [I.Ap.12]). La fonction $\hat{\varepsilon}_{(n)}$ est déterminée une fois pour toute en inversant la primitive de $\hat{\rho}_{(\hat{\varepsilon})}$. $\varepsilon_{(n)}$ est obtenue en inversant numériquement $\hat{\varepsilon}_{(n)}$ qui est un polynôme du quatrième degré. Les racines de ce polynôme donnent d'ailleurs la valeur du gap antiferromagnétique en fonction des paramètres variationnels :

$$W_{\text{Gap AF}} = D + \sqrt{(\Delta + D/2)^2 + 4(t + \delta t)^2} - \sqrt{(\Delta - D/2)^2 + 4(t - \delta t)^2} \quad [\text{Ap.5}]$$

Ap.2 Minimisation de l'énergie

La minimisation par rapport aux facteurs de double occupation, d_d et d_p se fait très rapidement. On peut montrer, en effet, que la fonction $E_{\Delta, D, \delta t}(d)$ admet un minimum unique, point d'intersection des courbes $d_d^0(d_p)$ et $d_p^0(d_d)$ définies respectivement par :

$$\frac{\partial E}{\partial d_d^0(d_d^0, d_p)} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial E}{\partial d_p^0(d_d, d_p^0)} = 0 \quad [\text{Ap.6}]$$

On obtient ainsi l'énergie optimisée par rapport aux corrélations qu'il reste à minimiser dans l'espace $(\Delta, D, \delta t)$.

La minimisation dans l'espace $(\Delta, D, \delta t)$ est un travail assez délicat car il faut trouver un compromis entre une approche lourde qui consisterait à passer en revue tout les points d'un quadrillage le plus étendu et le plus fin possible et une approche légère où l'on recherche le minimum par un algorithme "intelligent" de type dichotomique. Dans le premier cas, le temps de calcul risque de diverger, dans le second cas, on risque de converger vers un minimum local qui n'est pas celui de plus basse énergie et obtenir, par conséquent, un résultat erroné.

REFERENCES

- Arrigoni E., Physica C 162-164 P.785 (89)
Strinati G. & Castellani C.
- Coppersmith S.N. & Littlewood P.B. Phys. Rev. B. 41 P.2646 (90)
- Cyrot M. & Mayou D. Phys. Rev. B 41 P.4033 (90)
- Fujimori A., Phys. Rev. B 35 P.8814 (87)
Takayama-Muromachi E., Uchida Y. & Okai B.
- Julien J.P. Thèse Université Joseph Fourier (89)
- Mayou D., Solid State Comm. 68 P.665 (88)
Nguyen Manh D. & Julien J.P.
- Nücker N., Phys. Rev. B 37 P.5158 (88)
Fisk J., Fuggle J.C., Durham P.J. & Temmerman W.M.
- Oleś A.M. & Zaanen J. Int. J. Mod. Phys. B 1 P.751 (88)
- Oleś A.M. & Zaanen J. Phys. Rev. B 39 P.9175 (89)
- Shen Z., Phys. Rev. B 36 P.8414 (89)
Allen J.W., Yeh J.J., Kang J.-S., Ellis W., Spicer W., Lindau I., Maple M.B., Dalichaouch Y.D., Torikachvili M.S., Sun J.Z. & Geballe T.H.
- Schluter, Physica C 153-155 P.1217 (88)
Hybertsen J. & Christensen N.E.
- Stechel E.B. & Jennison D.R. Phys. Rev. B 38 P.4632 (88)
- Vaknin D., Phys. Rev. Lett. 58 P.2802 (87)
Sinha S.K., Moneton D.E., Johnston D.C., Newsam J.M., Safinya C.R. & King H.E.

CHAPITRE IV

LES FORTES

CORRELATIONS

PLAN DU CHAPITRE IV

INTRODUCTION

IV.A LE MODELE t-J ET LES PHASES A FLUX

A.1 Le modèle de Hubbard fortement corrélé

1.a cas d'une très forte répulsion

1.b Le modèle t-J

A.2 Le fondamental de l'hamiltonien t-J

2.a L'ordre antiferromagnétique

2.b Choix d'une fonction d'onde

2.c Les phases à flux

IV.B STRUCTURE ELECTRONIQUE SOUS CHAMP MAGNETIQUE

Introduction

B.1 Electrons libres à deux dimensions

B.2 Electrons de Bloch à deux dimensions

2.a Electrons presque libres

2.b Electrons fortement liés

2.c Origine des gaps dans la structure de bande

2.d Le réseau carré

d.α Le diagramme d'Hofstadter

d.β Densité d'états et états propres

B.3 Electrons à trois dimensions

IV.C DIAMAGNETISME DE LANDAU SUR RESEAU

Introduction

C.1 Electrons à 2 dimension

1.a Electrons libres

1.b Le réseau carré

b.α Conséquence des gaps

b.β La conjecture de Wiegmann

b.γ Calcul de l'énergie cinétique

b.δ Résultats

1.c Autres réseaux

C.2 électrons à 3 dimension

2.a Position du problème

2.b Faible couplage interplan

2.c Fort couplage interplan

2.d Cas général

d.α Calcul

d.β Résultat

IV.D APPLICATION AU MODELE T-J

Introduction

D.1 Energie moyenne d'une phase à flux

D.2 Une approche variationnelle

2.a Linéarisation de l'espace variationnel

2.b L'hamiltonien effectif

D.3 La stabilité des phases à flux

3.a Le composé non dopé

3.b Le composé dopé

CONCLUSION

INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au cas où l'énergie d'interaction des électrons est très supérieure à leur énergie cinétique. Nous avons vu au cours des chapitres précédents, que bon nombre d'arguments suggèrent une forte répulsion coulombienne entre les électrons de valence des oxydes supraconducteurs. Pour simplifier, nous nous limiterons au modèle à une bande (justifié lorsque la liaison cuivre-oxygène est ionique).

Par ailleurs, contrairement aux deux chapitres précédents, nous n'envisagerons pas un ordre magnétique à longue distance mais des corrélations magnétiques de courte portée. Nous avons vu que de telles corrélations étaient observées dans les composés supraconducteurs. D'ailleurs, dans le composé dopé, nous avons constaté une instabilité de l'état ordonné antiferromagnétiquement par rapport à la séparation de phases (chapitres II et III). Cela suggère l'absence d'ordre à longue distance dans le composé dopé.

En principe, la méthode de Gutzwiller que nous avons introduite au chapitre I peut être appliquée au modèle de Hubbard avec une forte répulsion coulombienne. L'opérateur de Gutzwiller est alors le projecteur interdisant les doubles occupations de sites. Cependant, nous avons vu que cette approche donnait de mauvais résultats car les fluctuations quantiques des électrons localisés sont négligées (chapitres I et II). Par ailleurs, nous avons vu que, pour étudier le composé fortement ionique, il était préférable d'appliquer la méthode de Gutzwiller au modèle à une bande qui explicite les sauts effectifs entre sites de cuivre plutôt qu'au modèle à deux bandes pourtant plus exact et plus général (chapitre III).

On peut donc penser que si l'on introduit explicitement, dans l'hamiltonien, l'énergie due au mouvement des électrons localisés par la forte répulsion, l'application de la méthode de Gutzwiller donne de meilleurs résultats. Un modèle exact pour les fortes répulsions et les faibles dopages et qui introduit explicitement cette énergie est le modèle t - J que nous introduisons brièvement dans la première partie de ce chapitre.

Dans cette même partie, nous introduisons également une fonction d'onde variationnelle (appelée phase à flux) rendant compte de corrélations antiferromagnétiques à courte portée. Cette fonction d'onde est la projetée de Gutzwiller de la fonction d'onde

orbitale décrivant le gaz d'électrons indépendants en présence d'un champ magnétique extérieur.

Les deux parties qui suivent sont exclusivement consacrées à l'étude du gaz d'électrons indépendants en présence d'un champ magnétique extérieur. Ces deux parties se distinguent donc du reste de ce mémoire puisqu'il n'y est pas question d'interaction coulombienne. Dans la partie B, nous nous attachons à l'effet du champ magnétique sur la structure électronique du système (spectre et densité d'états) tandis que la partie C est consacrée à l'effet du champ magnétique sur l'énergie cinétique du gaz d'électrons indépendants. Nous étudions, plus particulièrement, le cas d'un réseau carré (modèle à une bande) et d'un réseau tétragonal (couplage entre les différents plans CuO_2).

Cette énergie cinétique est utilisée dans la dernière partie de ce chapitre afin d'estimer la valeur moyenne de l'hamiltonien t-J dans une phase à flux. Nous présentons, en outre, un calcul variationnel permettant de déterminer pour quelles valeurs du dopage les phases à flux sont stabilisées et quelles sont les valeurs correspondantes du flux magnétique.

IV.A LE MODELE t-J ET LES PHASES A FLUX

A.1 Le modèle de Hubbard fortement corrélé

1.a Cas d'une très forte répulsion

Dans le cas où U est très grand, les configurations électroniques ont des énergies très différentes selon le nombre de sites doublement occupés qu'elles comportent. Plus exactement, elles peuvent être réparties en niveaux d'énergie $0, U, 2U...$ selon qu'elles comportent $0, 1, 2 \dots$ sites doublement occupés. L'énergie cinétique introduit un couplage entre différentes configurations appartenant au même "niveau" ou à des "niveaux" différents. Dans la limite où l'intégrale de saut est très inférieure à la répulsion coulombienne ($t \ll U$), ce couplage peut être traité par la théorie des perturbations.

Limitons nous au cas où la bande est moins qu'à moitié pleine. Il est toujours possible de se ramener à ce cas par la symétrie électron-trou (pour un réseau alterné). Au premier ordre de la théorie des perturbations, il suffit de diagonaliser l'hamiltonien en projection dans le sous-espace des configurations ne comportant pas de site doublement occupé (le "niveau 0"). Dans la suite, nous noterons cet espace : \mathcal{E}_0 .

Dans une configuration quelconque de \mathcal{E}_0 , un site est soit vide, soit avec un spin vers le haut, soit avec un spin vers le bas. Une configuration du système est donc décrite par une répartition des sites vides et une configuration de spin des autres sites. Dans la suite, un site vide sera appelé "lacune". L'appellation "trou" est souvent utilisée mais elle peut prêter à confusion car, dans le sens que nous avons utilisé jusqu'à présent, un trou était un défaut d'électron par rapport à la bande pleine. Lorsque la bande est demi-pleine, il y a donc, par site : un électron, un trou et zéro lacune.

Au premier ordre de la théorie des perturbations, l'hamiltonien effectif se résume à la seule énergie cinétique des lacunes. Lorsque la bande est demi-pleine, le système se résume aux seules configurations de spin du réseau et il n'y a pas d'énergie cinétique. Toutes les configurations de spin sont donc dégénérées et le système est paramagnétique.

Lorsque le système comporte des lacunes, le problème n'est pas trivial à cause de l'interaction entre le mouvement des lacunes et la configuration des spins. Dans le cas où le système ne comporte qu'une lacune, l'état fondamental est ferromagnétique saturé / Nagaoka 66 ; Brinkman & Rice 70 /. Cependant, des travaux plus récents montrent que, dans le cas où il y a deux lacunes, le fondamental n'est plus ferromagnétique saturé / Douçot & Wen 89 /. Dans le cas intéressant d'une concentration finie de lacunes, il n'y a pas de résultat exact.

1.b Le modèle t-J

Dans les systèmes réels, la répulsion coulombienne n'est pas infinie et il est nécessaire de pousser au deuxième ordre la théorie des perturbations. On obtient alors un hamiltonien effectif qu'il suffit de diagonaliser dans \mathbf{E}_0 . Cet hamiltonien comporte, en plus du terme d'énergie cinétique des lacunes, un terme de couplage entre les spins proches voisins identique à l'hamiltonien de Heisenberg quantique :

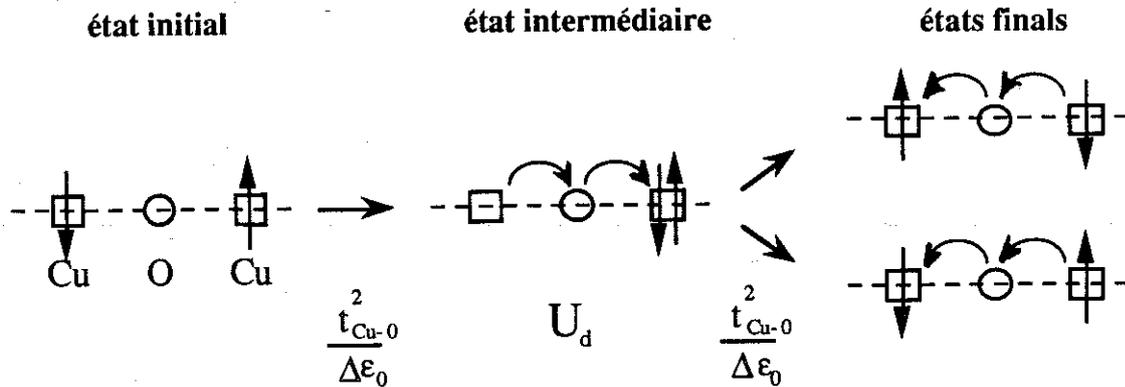
$$H_J = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j \quad [A.1]$$

Rappelons que l'opérateur $S_i \cdot S_j$ peut s'écrire comme la somme de deux termes : le terme d'Ising, $S_{iz} S_{jz}$, diagonal dans l'espace des configurations de spin et le terme de "spin flip" qui échange les spins des sites i et j . J est positif et le terme de Heisenberg favorise donc l'antiferromagnétisme.

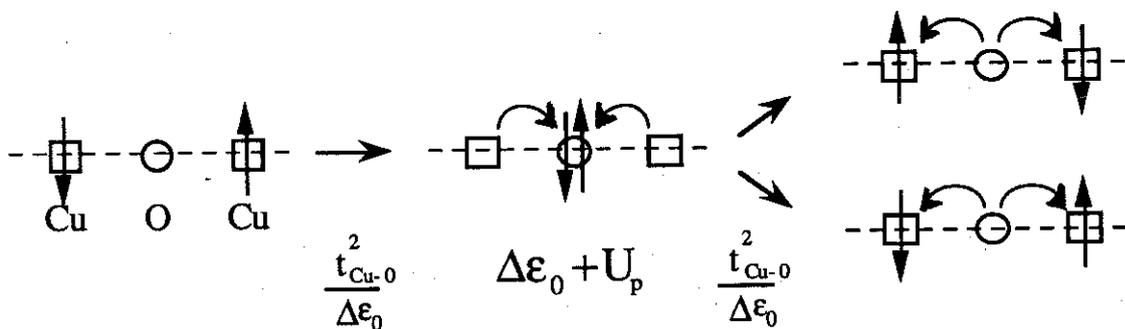
Physiquement, le couplage, J , entre les sites i et j , correspond à la possibilité qu'a l'électron qui se trouve sur le site i de sauter pour un court instant sur le site j lorsque ce dernier est déjà occupé par un électron de spin opposé. Ces écarts des électrons par rapport à leur position moyenne sont appelés "sauts virtuels". Les liaisons antiferromagnétiques ($\uparrow\downarrow$ ou $\downarrow\uparrow$), sont donc favorisées par la possibilité de mouvement supplémentaire qu'elles offrent aux électrons lorsque la répulsion coulombienne n'est pas rigoureusement infinie. Ce couplage antiferromagnétique correspond au "superéchange d'Anderson" / Anderson 59 /.

Il apparaît donc que, dans la limite où la répulsion coulombienne entre les électrons est très supérieure à leur énergie cinétique, cette dernière est à l'origine de magnétisme localisé de la même façon que, dans la limite où l'énergie cinétique est très supérieure à la répulsion coulombienne, cette dernière est à l'origine de magnétisme

itinérant. Le modèle de Hubbard permet donc de retrouver ces deux formes de magnétisme dans deux limites opposées des valeurs de ses paramètres.



a : Sauts virtuels "Mott-Hubbard"



b : Sauts virtuels "transfert de charge"

Figure A.1 : Sauts virtuels déterminant la valeur du couplage antiferromagnétique entre deux sites de cuivre dans le modèle à deux bandes. Les électrons sont représentés par des flèches vers le haut ou vers le bas selon leur spin. Le coût en énergie de l'état intermédiaire est indiqué sous les schémas ainsi que l'intégrale de saut effective pour chaque transition. L'état final est soit identique à l'état initial soit avec des spins opposés. Ces deux situations correspondent respectivement au terme d'Ising et au terme de spin flip du couplage de Heisenberg, $S_i \cdot S_j$.

Dans la limite des faibles dopages, le système peut être modélisé en ajoutant simplement au terme d'énergie cinétique des lacunes piloté par l'intégrale de saut, t , le terme de Heisenberg [A.1] piloté par le paramètre J . On obtient ainsi le "modèle t-J".

L'expression de J à l'aide des paramètres du modèle à deux bandes par la théorie des perturbations est / Zaanen & Oleś 88 / :

$$J = 4 \frac{t^{*2}}{U^*} \quad \text{avec} \quad t^* = \frac{t_0^2}{\Delta\epsilon} \quad \text{et} \quad U^* = \left(\frac{1}{U_d} + \frac{1}{\Delta\epsilon + U_p} \right)^{-1} \quad [\text{A.2}]$$

t_0 est l'intégrale de saut cuivre-oxygène, $\Delta\epsilon$ est la distance entre les niveaux du cuivre et de l'oxygène pour les trous. U_d et U_p désignent respectivement la répulsion sur le cuivre et sur l'oxygène. Le couplage entre spins, J , dépend du régime dans lequel on se trouve. Comme le montre l'équation [A.2] et l'illustre la figure A.1, la valeur du couplage est déterminée par la répulsion coulombienne sur un site de cuivre, U_d , dans le régime "Mott-Hubbard" ($U_d \ll \Delta\epsilon$), et par $\Delta\epsilon + U_p$, dans le régime "transfert de charge" ($U_d \gg \Delta\epsilon$). Notons que, dans la limite où le modèle t-J a été justifié, (forte répulsion et forte ionicité), le rapport J/t tend vers zéro.

A.2 Le fondamental de l'hamiltonien t-J

2.a L'ordre antiferromagnétique

Dans le cas où la bande est demi-pleine, le couplage J est le seul paramètre du problème et le modèle t-J équivaut exactement au modèle de Heisenberg (quantique). L'hamiltonien de Heisenberg favorise manifestement l'antiferromagnétisme. Cependant il n'est pas évident que l'état fondamental présente un ordre à longue distance à cause du terme de spin-flip à l'origine de fluctuations de point zéro. Les nombreux calculs qui ont été faits à ce sujet indiquent que le fondamental présente bien un ordre à longue distance / Trivedi & Ceperley 89 (et références) /. Toutefois, le moment alterné moyen est nettement réduit par rapport à sa valeur maximale ($m \cong 0.6 \mu_B$).

Lorsque l'on introduit des trous, il semble que l'ordre à longue distance disparaisse très rapidement / Yokoyama & Shiba 87 ; Bastide & Lacroix 89 ; Hirsch & Tang 89 /. Ce phénomène paraît assez naturel. A cause du terme cinétique, les lacunes ont tendance à se mouvoir. Or, comme l'indique la figure A.2, le déplacement d'une lacune se traduit par un décalage des spins le long de sa trajectoire. Si la lacune a été initialement introduite dans un état de Néel, il s'ensuit une frustration des liaisons antiferromagnétiques qui bordent sa trajectoire (voir figure A.2). Plus généralement, on s'attend donc à ce que la présence de lacunes favorise plutôt un état désordonné des spins. Expérimentalement, la longueur de corrélation de l'antiferromagnétisme est de l'ordre de la distance moyenne entre lacunes / Birgeneau & al. 88 /.

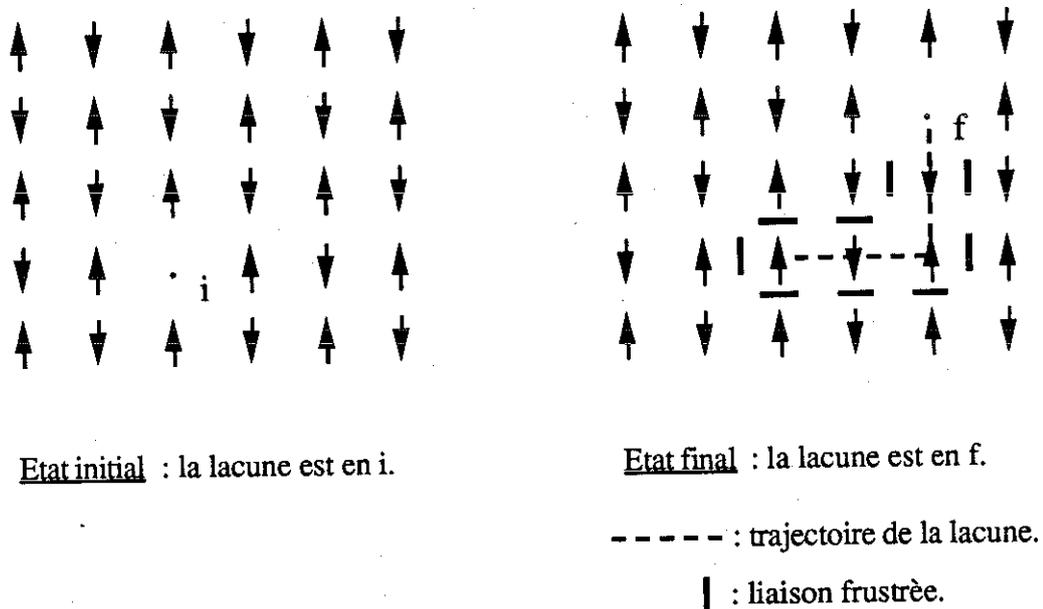


Figure A.2 : Déplacement d'une lacune dans un réseau antiferromagnétique de spins.

2.b Choix d'une fonction d'onde

La situation particulièrement intéressante en ce qui concerne l'étude des oxydes supraconducteurs, est le cas du composé dopé et donc, du modèle t-J en présence de lacunes. Afin de se faire une idée de l'état fondamental du système dans ce cas, on peut adopter une approche variationnelle. Or, comme nous l'avons vu, l'état fondamental du système en présence de lacunes ne présente pas d'ordre à longue distance mais semble présenter, en revanche, des corrélations antiferromagnétiques à courte distance. Il s'agit donc de trouver une fonction d'onde d'essai présentant ce caractère.

Une idée due à Anderson consiste à construire des états électroniques en regroupant les sites deux à deux pour former des singulets de spin. Les différentes configurations du réseau en paires de singulets sont ensuite superposées à la manière des états résonnant de la molécule de benzène. L'état magnétique ainsi obtenu est isolant et désordonné et est appelé "état R.V.B." (Resonating Valence Bond) / Anderson 87 /. En fait, certains états R.V.B. correspondent à la projection sur l'espace \mathcal{E}_0 de l'état B.C.S. introduit par Bardeen Cooper et Schrieffer (afin d'expliquer la supraconductivité classique). Ainsi l'état RVB peut être de type s ou d selon la symétrie dans l'espace des k de l'état BCS correspondant.

Une autre idée trouve son origine dans un travail d'Affleck et Marston / Affleck & Marston 88 /. En se plaçant dans la limite d'un "nombre quantique de spin" (généralisant le spin 1/2 des électrons) élevé, ces derniers ont justifié une approche de champ moyen permettant de remplacer le terme de Heisenberg par un terme de saut effectif. Ils ont alors trouvé une énergie moyenne minimum pour des valeurs complexes des intégrales de saut effectives. En fait, cet état n'est autre que la projection sur l'espace \mathcal{E}_0 de l'état fondamental du gaz d'électrons indépendants en présence d'un champ magnétique correspondant à un demi-quantum de flux par maille primitive du réseau carré (ou "plaquette"), le champ étant supposé ne pas agir sur les spins.

2.c Les phases à flux

Il a naturellement été proposé de généraliser la fonction d'onde d'Affleck et Marston au cas d'un champ magnétique quelconque / Anderson & al. 88 ; Wiegmann 88 /. L'effet orbital d'un champ magnétique sur un système d'électrons en liaisons fortes se traduit par un hamiltonien effectif pour lequel la somme des phases des intégrales de saut le long d'un contour fermé est égale au nombre de quanta de flux englobés par ce contour. D'une façon générale, la projection sur \mathcal{E}_0 de l'état fondamental pour un tel hamiltonien effectif est appelée une phase à flux.

Le champ magnétique est ici purement fictif et joue le rôle de paramètre variationnel. Dans le cas où le champ magnétique est uniforme, on parle de phase à flux "uniforme". Dans le cas où le champ magnétique change de sens d'une plaquette à l'autre, on parle de phase à flux "alternée". Lorsque l'on minimise l'énergie pour la bande demi-pleine, l'état obtenu (la phase d'Affleck et Marston) est à la fois une phase à flux uniforme, une phase à flux alternée et un état RVB de type d / Poilblanc 89 /. Cette redondance remarquable est levée lorsque l'on introduit des lacunes. Les phases à flux

présentent alors des caractéristiques remarquables. Par exemple, il y a généralement un courant orbital non nul le long des différentes liaisons du réseau et la symétrie par renversement du temps est brisée. Ce dernier aspect est d'ailleurs fondamental pour certaines théories / Halperin & al. 89 ; Khveshchenko & Kogan 90 ; et références /

Rappelons que la projection sur l'espace \mathcal{E}_0 correspond précisément à l'application de l'opérateur de Gutzwiller dans la limite des fortes répulsions coulombiennes. Une phase à flux, en tant que projetée sur \mathcal{E}_0 d'une fonction d'onde d'électrons indépendants, est une "fonction d'onde de Gutzwiller". Par le biais de l'approximation de Gutzwiller, on peut ramener l'étude de la valeur moyenne $\langle S_i \cdot S_j \rangle$ dans la phase à flux à celle de la valeur moyenne $\langle S_i \cdot S_j \rangle_0$ dans la fonction d'onde non projetée correspondante. Or, en appliquant le théorème de Wick, il vient :

$$\langle S_i \cdot S_j \rangle_0 = 3/2 |\langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0|^2 \quad [A.3]$$

χ_{ij}^σ est l'opérateur de saut entre les sites i et j pour le spin σ .

Il semble donc que, si l'on souhaite maximiser l'énergie magnétique (due au terme de Heisenberg) dans l'état projeté, on ait intérêt à ce que l'état de particules indépendantes correspondant présente une énergie cinétique moyenne importante. Nous vérifierons plus loin que le projeté sur \mathcal{E}_0 du simple état fondamental pour des électrons indépendants (le fondamental du terme d'énergie cinétique) présente, en effet, d'importantes corrélations antiferromagnétiques. Nous verrons, en outre, que le terme [A.3], qui correspond aux corrélations antiferromagnétiques entre sites proches voisins, est maximum (dans l'approximation de Gutzwiller) dans la phase à flux correspondant à un quantum de flux par électron d'un spin donné. Cette dernière fonction d'onde est souvent appelée "phase à flux commensurable" puisque le flux γ est commensurable avec la densité d'électrons.

Les phases à flux semblent donc être des fonctions d'onde intéressantes en ce qui concerne l'estimation du fondamental de l'hamiltonien t-J puisqu'elles comportent à la fois une faible énergie magnétique et une faible énergie cinétique (en valeur algébrique). Les phases à flux commensurables ont d'ailleurs été proposées comme expliquant un certain nombre de propriétés supraconductrices / Lederer & al. 89 /.

V.B Structure électronique sous champ magnétique

Introduction

Il est bien connu qu'un champ magnétique a un effet sur le spin des électrons (effet Zeeman). Cependant, un champ magnétique a aussi un effet sur la fonction d'onde orbitale du gaz électronique. Dans ce qui suit, nous ne nous intéressons qu'à ce dernier aspect et nous faisons donc abstraction du spin des électrons. De plus, les électrons sont supposés indépendants. Il suffit donc de résoudre le problème à une particule. Plus précisément, il est intéressant de déterminer le spectre et la densité d'états du système. Bon nombre de grandeurs physiques peuvent en effet s'en déduire. L'objet de cette partie concerne donc essentiellement l'effet du champ magnétique sur la structure de bande.

L'effet d'un champ magnétique sur des électrons libres est connu depuis fort longtemps / Landau & Lifshitz 58 /. Dans un premier temps, nous rappelons succinctement cet effet pour des électrons libres à deux dimensions. Puis, nous nous intéressons au cas d'électrons de Bloch à deux dimensions. La présence d'un potentiel coulombien dû aux ions et aux autres électrons rend le problème non soluble de façon exacte. Nous montrons que, pour un potentiel périodique dont la maille primitive est rectangulaire, les problèmes des électrons presque libres et des électrons fortement liés peuvent se ramener à une même équation aux valeurs propres unidimensionnelle. Dans un troisième temps, nous montrons comment cette équation conduit à la densité d'états du système et nous présentons, en particulier, le spectre d'énergie pour des électrons sur un réseau carré. Enfin, nous discutons le cas d'un gaz d'électrons à trois dimensions.

B.1 Electrons libres à deux dimensions

D'une façon générale, l'Hamiltonien en présence d'un champ magnétique s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} \left(P - \frac{e}{c} A_{(r)} \right)^2 + U_{(r)} \quad [B.1]$$

P est l'opérateur quantité de mouvement, A est le potentiel vecteur et U est un potentiel scalaire éventuel (le potentiel cristallin). Si l'on note B , le champ magnétique, le potentiel vecteur est défini par $B = \text{rot}A$. Il existe donc un grand nombre de façons de choisir ce potentiel (choix de jauge). Le choix de jauge influe sur la phase de la fonction d'onde des états stationnaires mais pas sur le résultat physique. Considérons un champ uniforme et vertical. Une jauge particulièrement simple que nous adopterons dans la suite est la jauge de Landau (voir figure B.1).

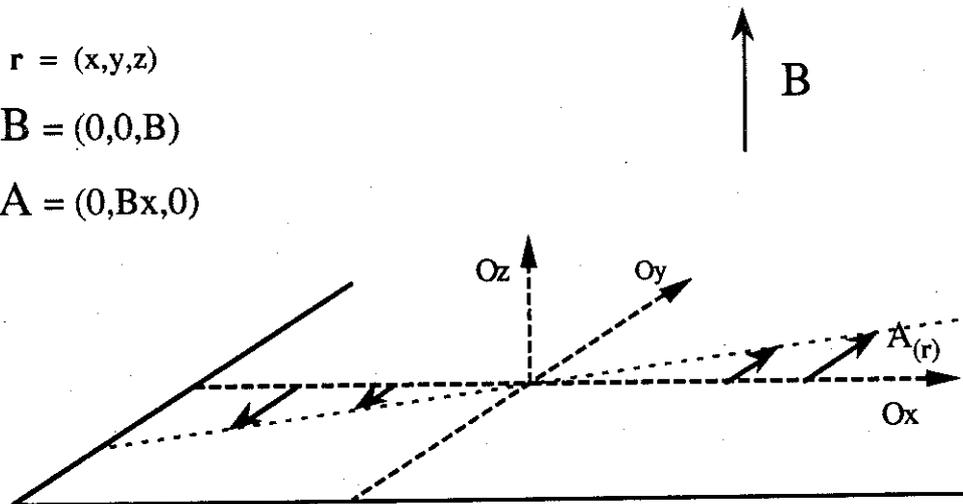


Figure B.1 : Jauge de Landau.

Considérons des particules astreintes à se déplacer dans un plan horizontal (comme le plan (Ox, Oy) de la figure B.1). L'hamiltonien est invariant par translation selon oy et l'on peut chercher les états propres sous la forme :

$$\Psi_0(x, y) = e^{iky} \varphi(x) \quad [B.2]$$

Le nombre quantique, k , étant fixé, l'équation de Schroedinger vérifiée par φ est exactement celle de l'oscillateur harmonique dont la fréquence de résonance est la fréquence cyclotron, $\omega_c = e/m B$, et dont le minimum du potentiel, x_0 , est fixé par le vecteur d'onde k :

$$x_0 = l_0^2 k. \quad [B.3]$$

l_0 est la longueur de Larmor (un cercle de rayon l_0 intercepte un demi-quantum de flux) :

$$l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \sqrt{\frac{\hbar}{e B}} \quad [B.4]$$

Le spectre d'énergie du système est celui de l'oscillateur harmonique de fréquence ω_c . L'effet du champ magnétique est donc de quantifier l'énergie comme illustré sur la figure B.2. Les énergies permises sont les "niveaux de Landau". Dans la limite des champs faibles, les niveaux de Landau, équidistants, se ressèrent et l'on retrouve bien vers la densité d'états constante propre aux électrons libres à deux dimensions.

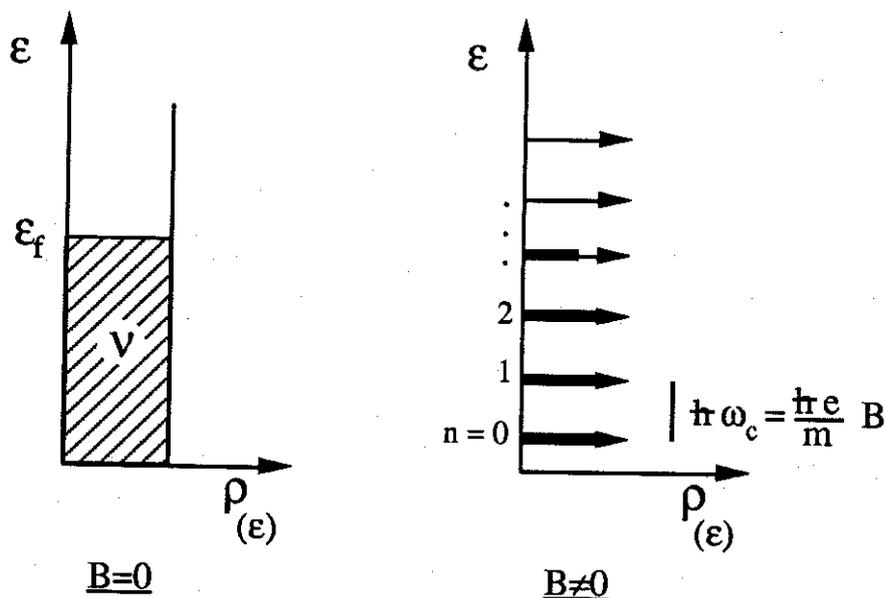


Figure B.2 : Densité d'états, $\rho(\epsilon)$, pour des électrons libres à deux dimensions sans champ magnétique appliqué ($B=0$) et avec un champ perpendiculaire au plan ($B \neq 0$). Les flèches représentent des pics de Dirac. La zone hachurée et les flèches épaissies correspondent aux états à une particule occupés dans l'état fondamental pour la densité d'électrons v .

Le nombre quantique k (ou, indifféremment, x_0) repère les différents états propres appartenant à un même niveau de Landau. La dépendance en x de ces états ($\varphi(x)$ dans l'expression [B.2]) est celle de la fonction propre de l'oscillateur harmonique. Ces états sont donc centrés sur des axes parallèles à Oy avec un écart quadratique moyen selon Ox égal à $\sqrt{n+1/2} l_0$, pour le $n^{\text{ième}}$ niveau de Landau. Par la suite, nous les appellerons "états de Landau".

Confinons les électrons dans un grand rectangle de dimensions L_x et L_y (voir figure B.3). La condition aux limites périodique selon Oy quantifie les valeurs de k et donc de x_0 . La dégénérescence, g , d'un niveau de Landau est donc :

$$g = L_x / \delta x_0 = L_x L_y B h/e = \Phi \quad [\text{B.5}]$$

Φ est le nombre de quanta de flux traversant la surface du rectangle. (Rappelons que le quantum de flux est donné par le rapport de la constante de Planck à la charge de l'électron : $\phi_0 = h/e$).

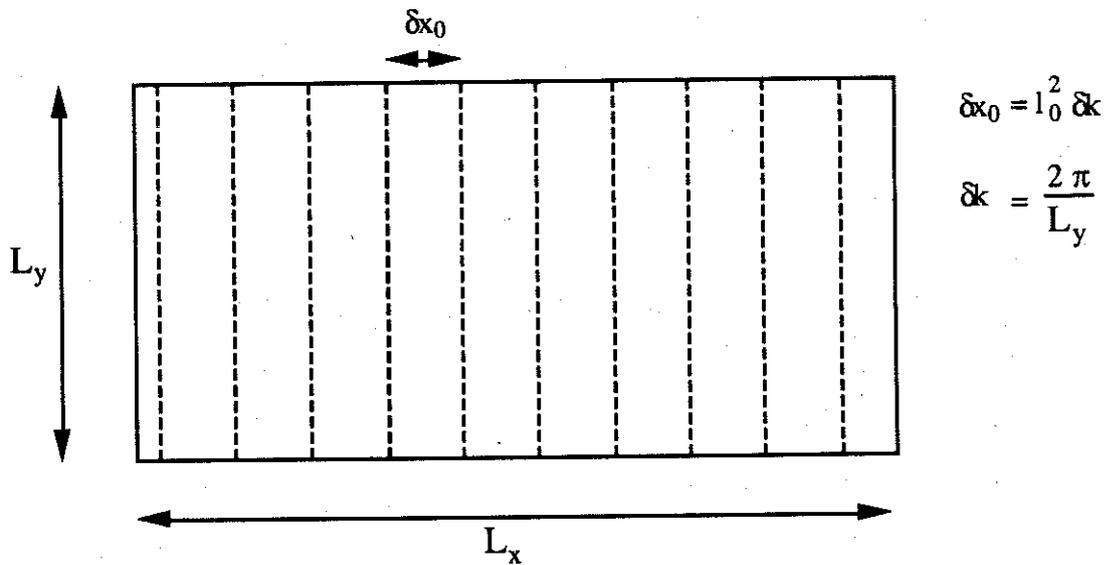


Figure B.3 : Quantification du vecteur d'onde k par les conditions aux limites périodiques. Les tirets verticaux représentent les valeurs possibles de x_0 et donc, la position moyenne des états de Landau.

B.2 Electrons de Bloch à deux dimensions

2.a électrons presque libres

Si, en plus d'un champ magnétique uniforme, les électrons voient le potentiel périodique du cristal, le problème n'est plus soluble de façon exacte. Dans le cas où l'amplitude du potentiel périodique est très inférieure à la distance entre les niveaux de Landau (champ suffisamment fort), il est possible d'adopter une approche perturbative. Plus exactement, Il suffit de diagonaliser la perturbation (le potentiel) en projection dans un niveau de Landau. Une base de ce sous-espace est donnée par les états de Landau [B.2] schématiquement représentés sur la figure B.3.

Pour commencer, considérons un potentiel sinusoïdal ne dépendant que de la coordonnée y et de période spatiale b :

$$V_y(x,y) = 2 V_{0y} \cos(2\pi y/b) = V_{0y} (e^{i 2\pi y/b} + e^{-i 2\pi y/b}) \quad [B.6]$$

De par la dépendance de type "onde plane" des états de Landau selon la direction y (voir [B.2]), l'état $|\Psi_{x_0}\rangle$ est seulement couplé avec les états $|\Psi_{x_0 \pm \Delta x_0}\rangle$ avec $\Delta x_0 = 2\pi l_0^2/b$. Fixons une valeur de x_0 dans l'intervalle $[-\Delta x_0/2 ; \Delta x_0/2]$. Il est alors possible de rechercher les états propres dans l'espace \mathfrak{b}_{x_0} engendré par les états de la forme $|\Psi_{x_0+n\Delta x_0}\rangle$ où n est un entier. Dans cet espace, le problème est équivalent à celui d'une chaîne linéaire avec V_{0y} comme intégrale de saut entre sites premiers voisins (quelque soit x_0). Le niveau de Landau laisse donc place à la bande de largeur $4V_{0y}$ caractéristique d'une chaîne linéaire. Un potentiel ne dépendant que d'une variable implique donc un simple élargissement des niveaux de Landau.

Rajoutons maintenant un potentiel sinusoïdal selon la direction x :

$$V(x,y) = V_y + V_x$$

$$V_x(x,y) = 2 V_{0x} \cos(2\pi x/a) = V_{0x} (e^{i 2\pi x/a} + e^{-i 2\pi x/a}) \quad [B.7]$$

La perturbation V_x est diagonale sur la base des états de Landau. Si le champ magnétique est suffisamment fort ($\sqrt{n+1/2} l_0 \ll a$), la localisation selon Ox des états de Landau est telle que l'état de Landau situé en x_0 voit le potentiel uniforme $V_x(x_0)$. Si l'on se restreint à l'ensemble \mathfrak{b}_{x_0} , comme précédemment, le problème est donc celui d'une chaîne linéaire

d'intégrale de saut V_{0y} modulée par un potentiel sinusoïdal d'amplitude $2V_{0x}$ dont la longueur d'onde, λ , (en nombre de maillons de la chaîne) est donnée par :

$$\lambda = a / \Delta x_0 = ab B e/h = \varphi \quad [\text{B.8}]$$

où φ est le nombre de quanta de flux à travers la maille primitive du potentiel $V_{(x,y)}$. La chaîne linéaire est représentée sur la figure B.4 et le "cristal", sur la figure B.5. Les différentes valeurs de x_0 dans l'intervalle $[-\Delta x_0/2 ; \Delta x_0/2]$ correspondent à des "phases à l'origine" différentes de la modulation (puisque changer x_0 revient à traduire les états de Landau correspondants). L'équation aux valeurs propres de cet hamiltonien modèle (paramétrée par x_0) est souvent appelée "équation de Harper". Sa résolution sera abordée plus loin.

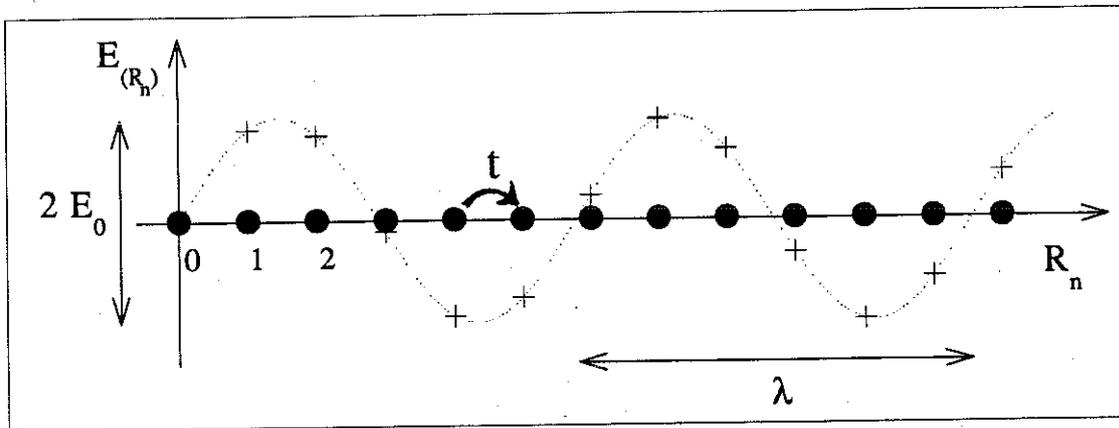


Figure B.4 : Chaîne linéaire d'intégrale de saut t modulée par le potentiel sinusoïdal : $E(R_n) = E_0 \sin(2\pi n/\lambda)$. $E(R_n)$ est l'énergie de site du site n représentée par une croix sur la figure.

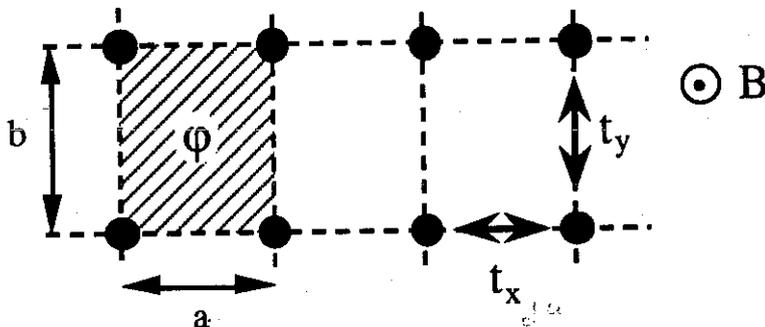


Figure B.5 : Réseau rectangulaire. L'effet cristal se traduit par un potentiel périodique dont la maille est un rectangle de cotés a et b . En liaisons fortes, on se ramène à un réseau d'orbitales atomiques reliées par les intégrales de saut t_x et t_y . φ est le flux du champ magnétique B à travers un rectangle élémentaire (en unité du quantum de flux).

2.b électrons fortement liés

Considérons une bande d'électrons en liaisons fortes. L'effet du champ magnétique est traduit, de façon approchée, par l'hamiltonien effectif :

$$H = \sum_{i,j} e^{i2\pi \phi_{ij}} t_{ij} C_j^+ C_i \quad \text{avec} \quad \phi_{ij} = \frac{1}{\phi_0} \int_{R_i}^{R_j} A \cdot dl \quad [B.9]$$

t_{ij} est l'intégrale de saut entre les sites i et j en l'absence de champ. L'effet du champ magnétique se traduit sur l'intégrale de saut entre les sites i et j par l'apparition d'un facteur de phase proportionnel à la circulation du potentiel vecteur, A , le long d'un circuit joignant i à j . (ϕ_0 est le quantum de flux). On vérifie que, comme nous l'avons annoncé en A.2.c, la somme des phases le long d'un contour fermé est égale au nombre de quanta de flux englobés par ce contour (d'après le théorème de Stokes). Par contre, la phase particulière, ϕ_{ij} , d'une intégrale de saut dépend du choix de jauge.

Cet hamiltonien s'obtient comme étant l'opérateur $\epsilon_{(p-eA/c)}$ où $\epsilon(k)$ est la relation de dispersion de la bande et où P est l'opérateur quantité de mouvement / Hofstadter 76 /. La justification de l'hamiltonien effectif $\epsilon_{(p-eA/c)}$ n'est pas triviale / Kohn 59 /. Cependant, le spectre pour cet hamiltonien est en bon accord avec les résultats de calculs ab initio / Schellnhuber & Obermair 80 /.

Considérons le réseau rectangulaire de la figure B.5. Un champ magnétique uniforme est appliqué perpendiculairement au plan du réseau. Adoptons la jauge de Landau. L'hamiltonien effectif obtenu (d'après [B.9]) est représenté sur la figure B.6. Seules les intégrales de saut verticales sont affectées d'un facteur de phase et celui-ci varie horizontalement. Si l'on repère un site par ses coordonnées, (m,n) , dans l'espace direct (voir figure B.6) l'hamiltonien effectif s'écrit :

$$H = \sum_{n,m} \sum_{v=-1,1} t_x C_{m+v,n}^+ C_{m,n} + e^{vi2\pi m\phi} t_y C_{m,n+v}^+ C_{m,n} \quad [B.10]$$

ϕ est le nombre de quanta de flux par plaquette (d'aire a^2).

Si ϕ est remplacé par $\phi+p$ où p est un entier, l'hamiltonien effectif est inchangé. L'effet du champ magnétique est donc périodique et il suffit de se borner à l'étude d'un flux inférieur à un quantum de flux par plaquette : $0 < \phi < 1$. On remarque que

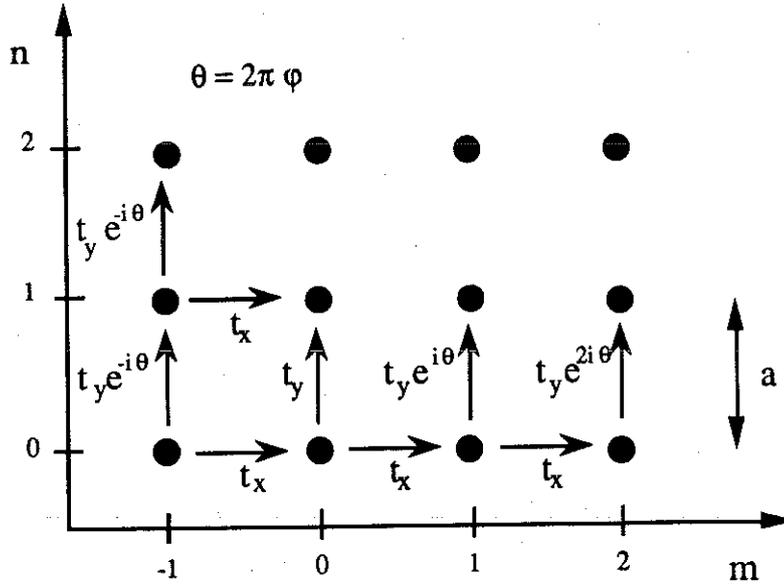


Figure B.6 : Hamiltonien effectif pour un réseau carré (avec sauts entre premiers voisins seulement) en présence d'un flux par plaquette $\phi = B a^2 / \phi_0$. Le signe de la phase, θ , change avec le sens du saut.

la transformation : $\phi \rightarrow 1 - \phi$ est équivalente à changer le sens du temps et est sans effet sur le spectre. Le flux $\phi = 1/2$ est donc un axe de symétrie. Il en est de même pour le remplissage $\nu = 1/2$ de la bande. La structure étant alternée (réseau rectangulaire avec sauts entre premiers voisins seulement) la bande est, en effet, toujours symétrique. En outre, on vérifie que la permutation des valeurs de t_y et de t_x est sans effet sur le spectre car elle est équivalente à un changement de Jauge. Il suffit donc de limiter l'étude à $t_y \leq t_x$.

L'hamiltonien [B.10] est invariant par une translation selon Oy . Il est donc intéressant de définir les états à une particule :

$$|m k\rangle = \sum_n e^{ikn} |m n\rangle \quad [B.11]$$

où $|m n\rangle$ désigne l'orbitale de coordonnées (m, n) . Il vient alors :

$$H|m k\rangle = t_x |m-1 k\rangle + 2t_y \cos(2\pi\phi m + k) |m k\rangle + t_x |m+1 k\rangle \quad [B.12]$$

On reconnaît là l'hamiltonien d'une chaîne linéaire d'intégrale de saut t_x modulée par un potentiel sinusoïdal d'amplitude $2t_y$, de longueur d'onde $1/\phi$ et de phase à l'origine k . On note donc une analogie remarquable avec le cas des électrons presque libres / Langbein 69 /. Le tableau B.1 résume la situation.

	électrons presque libres	électrons fortement liés
E_0	$2f(\varphi)V_y$	$2t_y$
t	$f(\varphi)V_x$	t_x
λ	φ	$1/\varphi$

Tableau B.1 : Les problèmes des électrons presque libres et fortement liés peuvent se ramener à celui d'une chaîne linéaire d'intégrale de saut t modulée par un potentiel sinusoïdal d'amplitude E_0 et de longueur d'onde λ (voir figure B.4) à condition d'envisager tous les déphasages possibles de la modulation. V_x et V_y sont les composantes sinusoïdales selon les directions Ox et Oy du potentiel coulombien (voir équations [B.6] et [B.7]) dans le problème des électrons presque libres. t_x et t_y sont les intégrales de saut selon Ox et Oy respectivement (voir [B.10]) dans le problème des électrons fortement liés. φ est le nombre de quanta de flux à travers une maille primitive du cristal (voir figure B.5). La fonction $f(\varphi)$ tend vers 1 dans la limite des champs forts et est donnée par : $f(\varphi) = e^{-\pi/2\varphi} L_n(\pi/\varphi)$ où L_n est le polynôme de Laguerre d'ordre n (pour le $n^{\text{ième}}$ niveau de Landau).

2.c Origine des gaps dans la structure de bande

Désormais, nous discutons, par défaut, le cas d'une bande d'électrons fortement liés sur un réseau rectangulaire en liaisons fortes (cas que nous venons de présenter). Le cas des électrons presque libres se déduit par la correspondance indiquée au tableau B.1.

Un cas limite où la résolution de l'équation de Harper est aisée est le cas du réseau rectangulaire très anisotrope : $t_y \ll t_x$. Dans ce cas, la modulation d'amplitude de la chaîne linéaire peut être traitée par la théorie des perturbations. Soit $\varepsilon(\kappa) (=2t_x \cos \kappa)$, la relation de dispersion du système non perturbé. Dans l'espace des κ , la perturbation, V , couple l'état κ aux états $\kappa \pm 2\pi/\lambda$. Au premier ordre des perturbations en t_y/t_x , la "modulation d'amplitude" ouvre donc un gap en $\kappa = \pm \pi\varphi$ et isole ainsi deux sous-bandes contenant chacune φ états aux extrémités du spectre comme illustré sur la figure B.7.

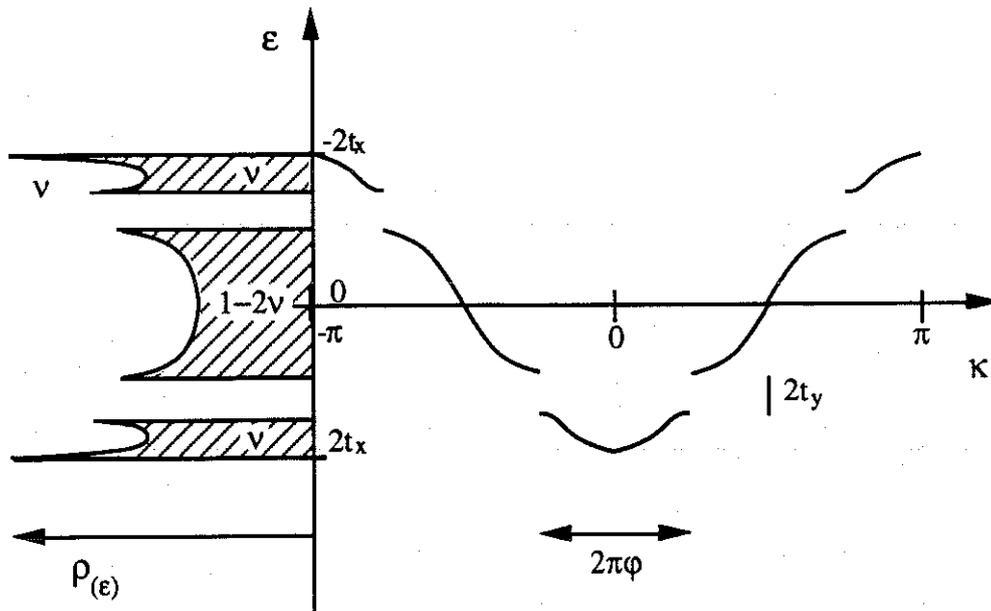


Figure B.7 : Relation de dispersion, $\epsilon(\kappa)$ (à droite), et densité d'états correspondante, $\rho(\epsilon)$ (à gauche), pour le réseau rectangulaire avec $t_y \ll t_x$. L'effet du nombre quantique κ est négligé. v est le nombre d'états "sous le gap".

Plus généralement, à l'ordre $2N-1$ des perturbations, la condition nécessaire pour avoir un gap est que l'opérateur V^n (V est la perturbation) couple 2 états à une particule de même énergie pour l'hamiltonien non perturbé. Il suffit donc qu'il existe un couple (κ, κ') qui vérifie simultanément :

$$\kappa' = -\kappa + 2M\pi \quad (\epsilon(\kappa) = \epsilon(\kappa')) \quad [\text{B.13}]$$

et

$$\kappa' = \kappa - 2N\pi\phi \quad (\langle \kappa | V^n | \kappa' \rangle \neq 0) \quad [\text{B.14}]$$

où M et N sont des entiers. La densité d'états dans l'espace des κ est $1/\pi$. Si v est le nombre d'états sous le gap, correspondant au vecteur d'onde κ (ou κ'), il vient donc :

$$v = M + N\phi \quad [\text{B.15}]$$

Cette équation, appelée relation de Wannier, a été obtenue différemment pour les flux rationnels / Wannier 78 /. Pour une valeur donnée de N , le choix de M permet de maintenir l'encadrement : $0 < v < 1$. Lorsque ϕ est rationnel ($\phi = p/q$), l'équation [B.15] donne une valeur entière de v pour $N=q$. Dans ce cas, le nombre de sous-bandes est donc au plus égal à q . Par contre, si ϕ est irrationnel, le nombre de valeurs possibles de " v " et donc, le nombre de gaps, n'est pas limité.

MacDonald a donné une interprétation physique aux entiers M et N de la relation [B.15] / MacDonald 83 /. Il résulte de l'équation [B.15], que des valeurs fixées de M et N déterminent un "gap" tel que le nombre d'états, ν , sous ce gap varie continûment avec le flux, ϕ . Il y a deux façons de faire varier le flux, ϕ , à travers une maille (et donc, le nombre d'états sous le gap, ν). La première est de faire varier le champ magnétique pour un même cristal et la seconde est de faire varier le paramètre de maille du cristal en champ fixe. M est le nombre d'états rajoutés sous le gap lorsqu'on diminue d'une unité le nombre de mailles de l'échantillon en augmentant le paramètre de maille. N est le nombre d'états rajoutés sous le gap lorsqu'on rajoute un quantum de flux à travers l'échantillon en augmentant le champ.

Dans un système où se produit l'effet Hall quantique, lorsque le niveau de Fermi se trouve dans un gap, la valeur de la conductivité de Hall est quantifiée par la formule :

$$\sigma = N e^2/h \quad [B.16]$$

où N est donné par la relation de Wannier ([B.15]) / MacDonald 83 ; Streda 82 /.

Lorsque ϕ est irrationnel, la modulation d'énergie de site dans la chaîne linéaire est incommensurable. Il est alors aisé de se convaincre que le nombre quantique k (la phase à l'origine de la modulation) ne modifie pas le spectre d'énergie du système. Cela n'est plus exact pour des flux commensurables avec le réseau. La superposition des sous-bandes correspondant à des valeurs de k différentes conduit à une diminution de la largeur des gaps. Pour le flux $\phi=p/q$, cet effet est rapidement négligeable lorsque q devient grand.

La figure B.8, où nous avons représenté les densités d'états pour le flux $\phi=1/16$ et pour différentes valeurs de l'anisotropie du réseau, t_y/t_x , illustre l'apparition de gaps correspondant aux premiers ordres de la théorie des perturbations lorsque le rapport t_y/t_x varie de 0 à 1. Ceux-ci s'élargissent progressivement jusqu'à atteindre leur largeur maximum pour le réseau carré ($t_x=t_y$).

En bords de bande, on remarque une structure en niveaux de Landau. Cela se comprend aisément puisqu'à faible remplissage, la relation de dispersion est celle de particules "libres" de masse effective $m^*=\hbar^2/(2ta^2)$. On note qu'à remplissage plus élevé, les "niveaux" de Landau s'élargissent et se ressèrent.

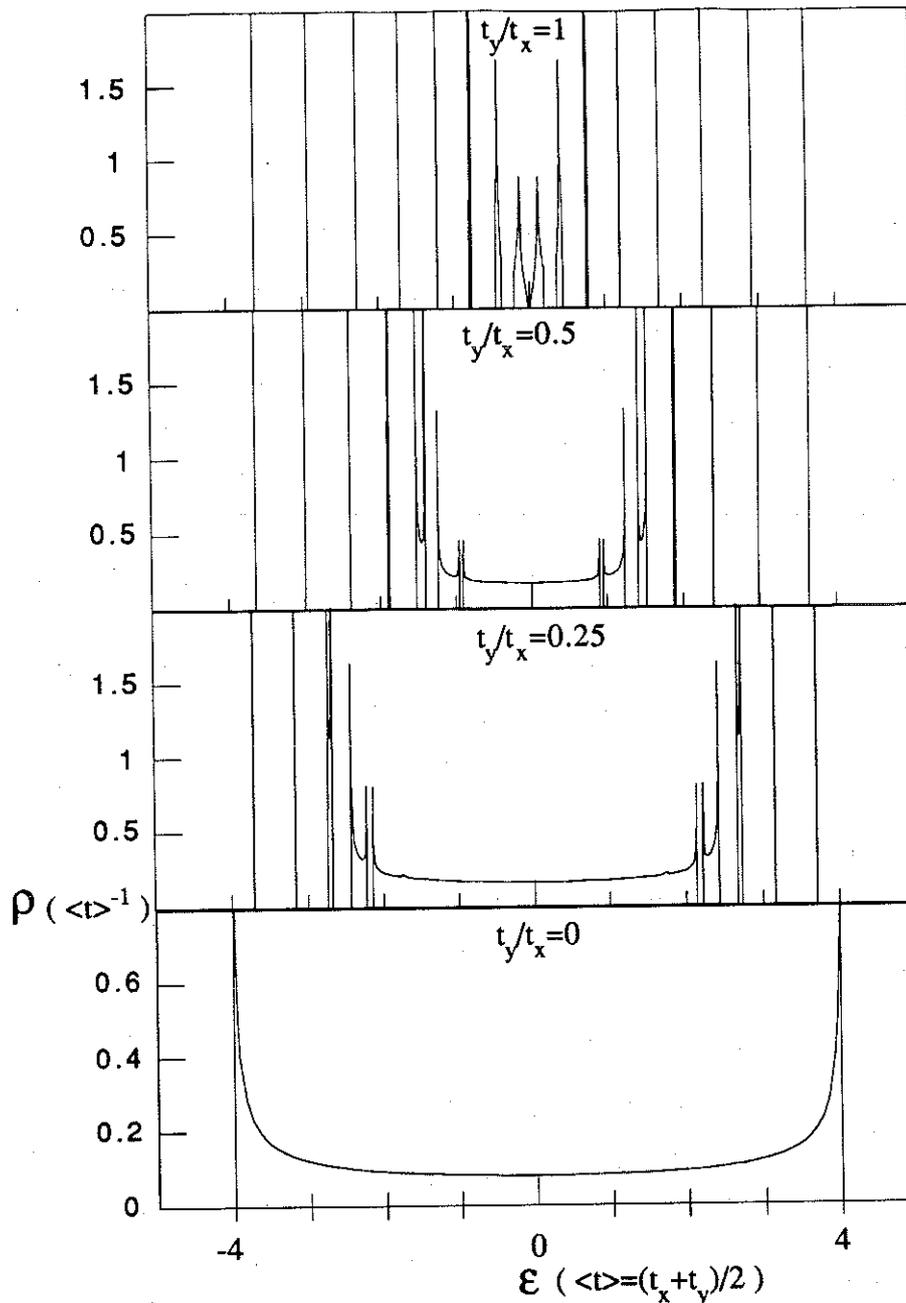


Figure B.8 : Densités d'états d'électrons sur un réseau rectangulaire pour un flux, ϕ , égal à un seizième de quantum de flux par plaquette et pour différentes valeurs du rapport t_y/t_x entre les intégrales de saut selon les direction y et x.

Un champ magnétique a donc pour effet de créer une structure en "niveaux de Landau" dans la bande pour le réseau rectangulaire tandis qu'un faible potentiel transforme en bandes les niveaux de Landau pour la particule libre. Remarquons que, lorsque le potentiel dépend des deux variables d'espace (x et y), ces bandes présentent à leur tour une structure en niveaux de Landau. Dans ce qui suit, nous examinons de plus près le spectre pour le réseau carré. Nous allons voir que cette dualité "bande"- "niveaux de Landau" conduit à une structure fractale.

3.b Le réseau carré

3.b α Le diagramme d'Hofstadter

Nous nous limitons désormais au cas du réseau carré ($t_x=t_y$). En fait, le spectre obtenu pour des électrons sur un réseau carré se comprend bien dans le cadre de la théorie des perturbations à un ordre arbitrairement élevé que nous venons d'exposer. Les calculs numériques montrent que tous les "gaps" déterminés par la relation de Wannier sont effectivement ouverts (excepté en centre de bande). Pour $\varphi=p/q$, il y a donc exactement q sous-bandes contenant chacune $1/q$ états (par site).

Par contre, tous les gaps ne sont pas équivalents et leur largeur décroît avec N (N est donné en [B.15]). Ainsi, les sous-bandes (pour le flux $\varphi=p/q$) sont nettement regroupées par paquets de p sous-bandes. Ces paquets contiennent donc φ états (par site). De plus, leurs positions relatives rappellent celles des niveaux de Landau. Dans la suite nous les appellerons donc souvent "niveaux de Landau". La situation est résumée par le diagramme d'Hofstadter qui représente les énergies permises dans le plan (ϵ, φ) . Nous l'avons porté sur la figure B.9.

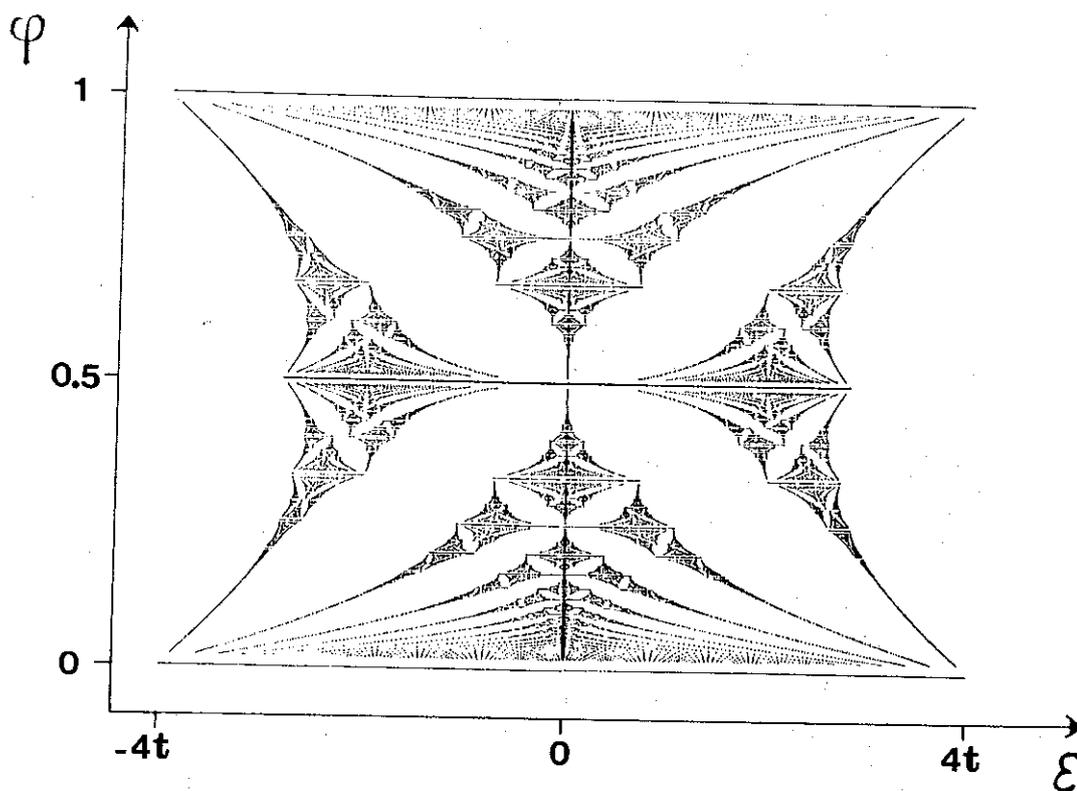


Figure B.9 : Diagramme d'Hofstadter d'après / Hofstadter 76 /. Les segments noircis correspondent aux énergies, ϵ , dans le plan (v, φ) . v est le remplissage de la bande et φ , le nombre de quanta de flux par plaquette.

Le diagramme d'Hofstadter présente des axes de symétrie correspondant au demi-remplissage et au demi-quantum de flux. Nous les avons expliqué plus haut. Excepté au voisinage de ces axes de symétrie, les "niveaux de Landau" apparaissent nettement. Ces derniers s'élargissent au fur et à mesure que l'on se rapproche du centre de bande ou du demi-quantum de flux.

De plus, ces derniers présentent généralement une sous-structure en niveaux de Landau qui présentent à leur tour une sous-structure en niveaux de Landau et ainsi de suite. Ainsi le diagramme de la figure B.9 présente une structure fractale. Hofstadter a obtenu une règle permettant de déterminer la "sous-structure" d'un "paquet de sous-bandes" quelque soit sa position dans le diagramme d'Hofstadter et son degré d'imbrication dans d'autres sous-structures / Hofstadter 76 /. Il en a déduit que le spectre évolue bien de façon continue avec ϕ . Nous entendons ici par "continue" que tout les points du spectre pour le flux $\phi + \delta\phi$ tendent de façon biunivoque vers tout les points du spectre pour le flux ϕ lorsque $\delta\phi$ tend vers zéro (théorème de continuité d'Hofstadter).

3.b.β Densité d'états et états propres

La densité d'états peut s'exprimer à l'aide de fonctions elliptiques complètes et de polynômes / Wannier & al. 79 /. Ainsi, la densité d'états de chaque sous-bande ressemble à la densité d'états du réseau carré sans flux avec sa singularité de Van Hove logarithmique en centre de bande (voir figure B.8 avec $t_y/t_x=1$).

Lorsque q est grand, la largeur des sous-bandes est si faible que la largeur totale du spectre, gaps non compris, tend vers zéro quand q tend vers l'infini. Le spectre correspondant à un flux irrationnel est un ensemble de Cantor. En pratique, lorsque q devient grand, les sous-bandes peuvent être remplacées par des pics de dirac.

La dépendance selon O_y des états stationnaires dans la jauge de Landau est celle d'une onde plane (voir [B.11]). Leur variation selon O_x a été examinée par Hofstadter / Hofstadter 76 /. Notons que, à cause de l'invariance du système par une translation du réseau, l'état fondamental du gaz d'électrons en présence d'un champ magnétique uniforme est un état homogène au sens défini en I.B.1.c.

B.3 Effet de la troisième dimension.

Considérons des électrons libres de se déplacer dans un plan horizontal en présence d'un champ magnétique vertical et introduisons la troisième dimension. Cette opération revient à rajouter à l'hamiltonien un terme supplémentaire, H_z , qui ne dépend que de la variable décrivant la position verticale.

Cette variable est indépendante des autres si bien que H_z commute avec l'hamiltonien H qui décrit le problème à deux dimensions. Les états propres pour l'hamiltonien à trois dimensions ($H+H_z$) s'obtiennent donc simplement comme produits tensoriels des états propres pour H et H_z , la valeur propre correspondante étant la somme des valeurs propres. Par conséquent, la densité d'états, ρ , pour des électrons à trois dimensions est la convolution de la densité d'états pour les électrons dans le plan, ρ , avec la densité d'états de H_z , ρ_z :

$$\rho_{3D}(\epsilon) = \rho * \rho_z(\epsilon) = \int \rho(\epsilon') \rho_z(\epsilon'') \delta_{(\epsilon'+\epsilon''-\epsilon)} d\epsilon' d\epsilon'' \quad [B.17]$$

La sommation dans [B.17] porte sur toutes les énergies propres pour H et H_z .

Pour des particules libres à trois dimensions, la densité d'états s'obtient donc en convoluant les niveaux de Landau avec la densité d'états de la particule libre à une dimension, ρ_{z0} :

$$\rho_{z0}(\epsilon) = \sqrt{\frac{2m}{h^2}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \quad [B.18]$$

Il suffit donc d'ajouter les fonctions $g \rho_{z0}(\epsilon - \epsilon_n)$ avec $\epsilon_n = \hbar\omega_c(n+1/2)$ (voir figure B.2), (g est la dégénérescence d'un niveau de Landau donnée en [B.5]). A trois dimension, les niveaux de Landau "se manifestent" donc par des singularités divergentes ($(\epsilon - \epsilon_n)^{-1/2}$) qui sont à l'origine de l'effet De Haas-Van Halphen. On retrouve bien une densité d'états parabolique dans la limite des champs faibles.

Dans le cas d'électrons fortement liés sur un réseau tétragonal simple, ρ est la densité d'états pour le réseau carré en présence de flux étudiée plus haut tandis que ρ_z est la densité d'états, ρ_{z1} , pour une chaîne linéaire simple. Si t_z est l'intégrale de saut couplant les plans horizontaux, l'expression de $\rho_{z1}(\epsilon)$ est :

$$\rho_{z1}(\epsilon) = \frac{1/\pi}{\sqrt{4t_z^2 - \epsilon^2}} \quad \text{si } -2t_z < \epsilon < 2t_z \quad \text{et} \quad \rho_{z1}(\epsilon) = 0 \quad \text{si } |\epsilon| > 2t_z$$

[B.19]

La convolution [B.17] se traduit par un élargissement des sous-bandes d'Hofstadter.

Lorsque le dénominateur de ϕ , q , est suffisamment grand, nous avons vu que les sous-bandes d'Hofstadter pouvaient être remplacées par des pics de dirac. La densité d'états du réseau tétragonal est donc obtenue en superposant des sous-bandes dont la forme est donnée par [B.19] et dont la position est donnée par les pics de dirac qui constituent la densité d'états pour le réseau carré. La figure B.10 représente de telles densités pour un flux fixe et un rapport, t_z/t entre les intégrales de saut interplan et intraplan, variable. On voit que lorsque, le couplage interplan est suffisamment fort, les sous-bandes se superposent pour donner lieu à une seule bande en forme de "pagode". Pour le réseau cubique, on retrouve bien, en bords de bande, la densité d'états de particules libres à trois dimensions avec ses singularités en $(\epsilon - \epsilon_n)^{-1/2}$.

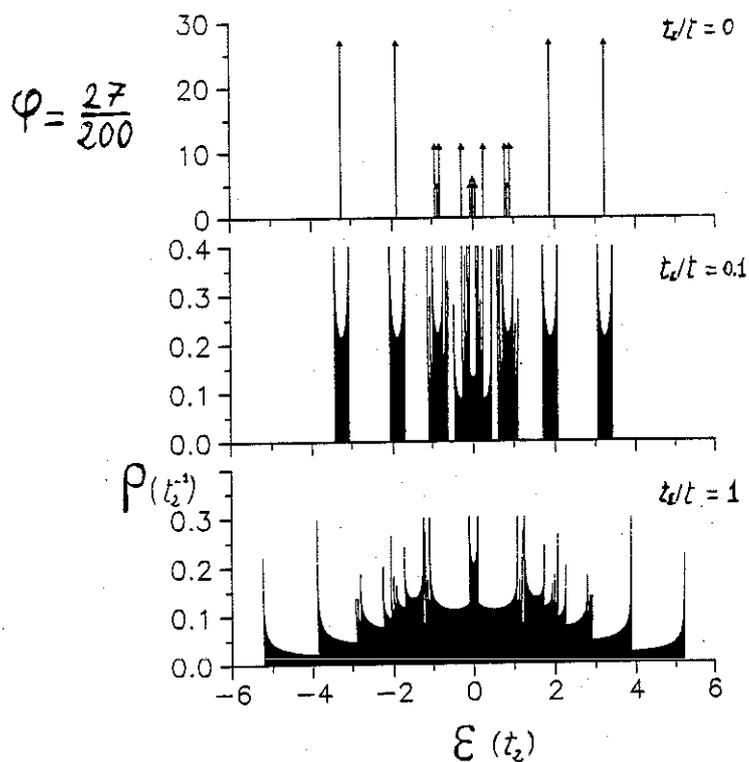


Figure B.10 : Densité d'états pour un réseau tétragonal en présence d'un champ magnétique selon (001) pour différentes valeurs du rapport t_z/t entre les intégrales de saut selon (001) et selon (100). Le flux par plaquette, $\phi = Ba^2/\phi_0$, vaut $27/200$. Pour le cas du réseau carré ($t_z/t=0$), les flèches indiquent le nombre de sous-bandes d'Hofstadter incluses dans l'épaisseur du trait. Une sous-bande d'Hofstadter comprend $1/200$ états par site (et par spin).

IV.C Diamagnétisme de Landau sur réseau.

Introduction

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'effet du champ magnétique sur l'énergie cinétique du gaz d'électrons indépendants. On connaît l'effet lié à l'action sur le spin. Pour déterminer l'effet sur l'énergie cinétique du système à température nulle, il suffit de sommer les énergies des états orbitaux à une particule occupés dans le fondamental. Il suffit donc d'intégrer, jusqu'au niveau de Fermi, les densités d'états présentées dans la partie précédente. Si $\rho(\epsilon)$ est la densité d'états du gaz d'électrons indépendants et v , sa densité, son énergie cinétique, E , est donnée par :

$$E = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \epsilon \rho_{(\epsilon)} d\epsilon \quad ; \quad v = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \rho_{(\epsilon)} d\epsilon \quad [C.1]$$

Dans un premier temps, nous rappelons ce qu'il advient de l'énergie cinétique de particules libres à deux dimensions en présence d'un champ magnétique. Puis nous nous attachons au cas d'électrons sur un réseau carré. Dans un premier temps, nous mettons en évidence un comportement de l'énergie cinétique qui semble assez général pour des électrons à deux dimensions. Dans un second temps, nous calculons l'énergie cinétique d'électrons sur un réseau carré et nous montrons en quoi leur comportement diffère fondamentalement de celui d'électrons libres. Enfin, nous examinons l'effet de la troisième dimension. Nous verrons, à cette occasion, que la remise en cause de la théorie du diamagnétisme de Landau par la présence du potentiel cristallin n'est pas une spécificité des systèmes bidimensionnels.

C.1 Electrons à deux dimensions

1.a électrons libres

A deux dimensions, l'énergie cinétique s'obtient, d'après la formule [C.1], en remplissant les premiers niveaux de Landau comme indiqué sur la figure B.2. Nous avons vu en B.1 que la dégénérescence d'un niveau de Landau est égale au nombre de quanta de flux par unité de surface. Par conséquent, lorsque le champ magnétique correspond à $1/N^{\text{ième}}$ de quantum de flux par particule, un nombre entier de niveaux de Landau sont remplis. De plus, dans ce cas, à cause de la disposition régulière des niveaux de Landau, le niveau de Fermi en l'absence de flux est exactement à mi-chemin entre le dernier niveau rempli et le premier niveau vide. On en déduit aisément que, dans ce cas, l'énergie cinétique du gaz d'électrons libres n'est pas modifiée par le champ magnétique.

L'énergie et la dégénérescence du premier niveau de Landau sont proportionnelles au champ magnétique appliqué. Pour un nombre d'électrons donné, lorsque le champ est très fort (supérieur à un quantum de flux par particule), seul le premier niveau de Landau est occupé et l'énergie du système croît donc linéairement avec le champ magnétique.

En fait, l'énergie cinétique en présence d'un champ magnétique est toujours strictement supérieure à sa valeur en l'absence de champ excepté lorsque le champ correspond à une fraction entière d'un quantum de flux par particule où elle lui est égale. Cette dégénérescence remarquable est illustré sur la figure C.1 qui représente la variation de l'énergie cinétique d'électrons libres à 2 dimensions, sous l'effet du champ magnétique. On note, plus précisément, que les flux $\phi = v/n$ (n entier naturel), correspondent à des minima anguleux. Nous reviendrons dans la partie qui suit (C.1.b.α) sur l'origine des points anguleux.

Pour les métaux où la théorie des électrons libres s'applique bien (alcalins, etc...), la courbe de la figure (C.1) permet de comprendre l'origine du diamagnétisme de Landau. Etant donnée la valeur élevée de la densité d'électrons dans les métaux, le champ magnétique correspondant à un quantum de flux par particule ($\phi = v$) est extrêmement élevé : de l'ordre de 10^5 Tesla. En pratique, on se trouve donc dans la région des champs faibles et les oscillations de l'énergie sont trop rapides pour être perçues (excepté dans certaines limites où elles donnent lieu à l'effet De Haas-Van Alphen). La courbe $\Delta E(\phi)$ peut être remplacée par une parabole et l'énergie du système croît comme le carré du

champ appliqué. Tout se passe donc comme si le système présentait un moment induit opposé et proportionnel au champ appliqué (susceptibilité négative). On voit là l'origine du diamagnétisme de Landau.

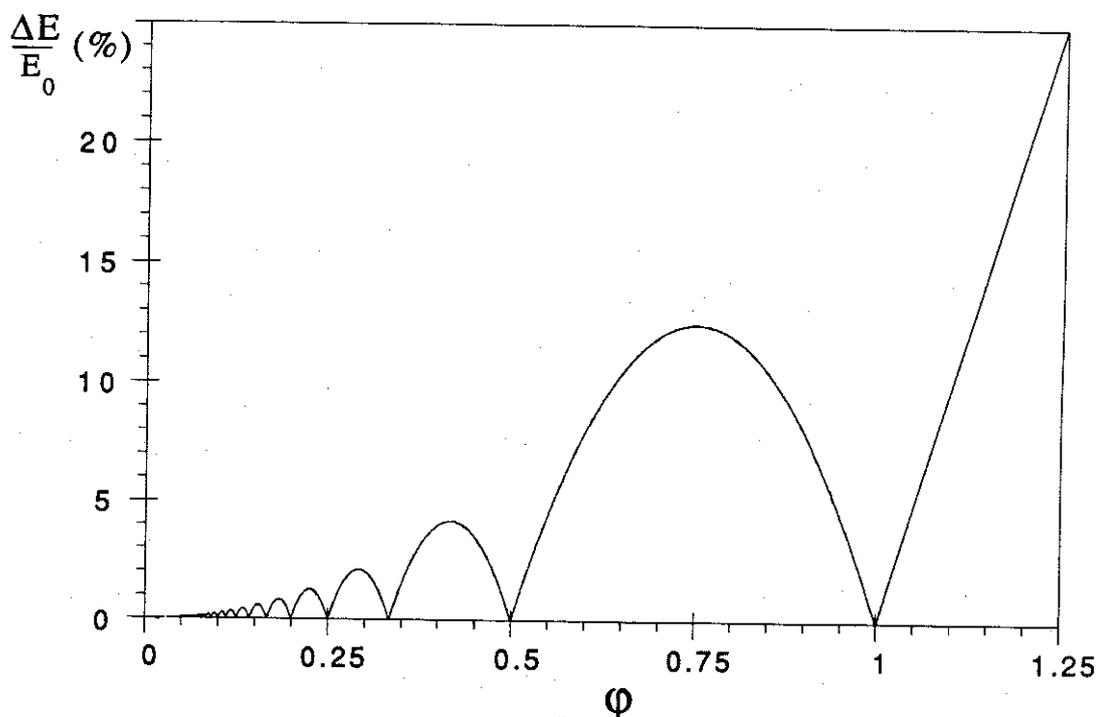


Figure C.1 : Variation relative, $\Delta E/E_0$, de l'énergie cinétique d'électrons à deux dimensions en fonction du nombre de quanta de flux, ϕ , par particule (sans spin). Cette fonction est donnée par la formule exacte : $\Delta E/E_0 = \phi^2 \{1/\phi\} (1 - \{1/\phi\})$ où l'on prend la partie fractionnaire des expressions entre accolades.

2.b Le réseau carré

b.α Conséquence des gaps

Comme nous l'avons vu dans la partie IV.B, le spectre des énergies pour des électrons sur un réseau carré présente un certain ressemblance avec un spectre pour des particules libres (niveaux de Landau). Les énergies permises sont réparties en paquets de sous-bandes dont la "dégénérescence" est égale à un quantum de flux par particule (et par spin) et dont la disposition varie continûment avec le champ appliqué. La variation du nombre d'états contenus dans des "niveaux" séparés par des gaps dont la largeur reste non nulle, lorsque le paramètre extérieur (ϕ) varie de façon arbitrairement faible est un phénomène tout à fait remarquable typique de l'effet orbital d'un champ magnétique. Comme nous le montrons ci-après, ce phénomène a pour conséquence la présence de

points anguleux sur la courbe $E_v(\varphi)$ qui représente la variation de l'énergie avec le flux appliqué (pour le remplissage, ν , de la bande).

Sur la figure C.2 nous avons mis en évidence les principaux "niveaux de Landau" dans le diagramme d'Hofstadter (le quart inférieur gauche de la figure B.9, plus exactement) ainsi que les gaps qui les séparent et qui correspondent à $M=0$ dans la relation de Wannier (donnée en [B.15]). Indexons ces gaps par la valeur de N (donnée par la relation de Wannier). Notons $E_N^-(\varphi)$, le bord inférieur du $N^{\text{ième}}$ gap et $E_N^+(\varphi)$, le bord supérieur. Ces énergies sont portées en traits pleins sur la figure C.2. De plus, nous avons représenté (en pointillés) l'énergie moyenne d'un "niveau de Landau" calculée comme suit :

$$\langle \mathcal{E} \rangle_N = \frac{1}{\varphi} \int_{E_N^+}^{E_{N+1}^-} \varepsilon \rho_{(\varepsilon)} d\varepsilon \quad [C.2]$$

Notons $E_{<N}(\varphi)$, l'énergie intégrée sous le $N^{\text{ième}}$ gap :

$$E_{<N} = \varphi \sum_{n=0}^N \langle \mathcal{E} \rangle_n \quad [C.3]$$

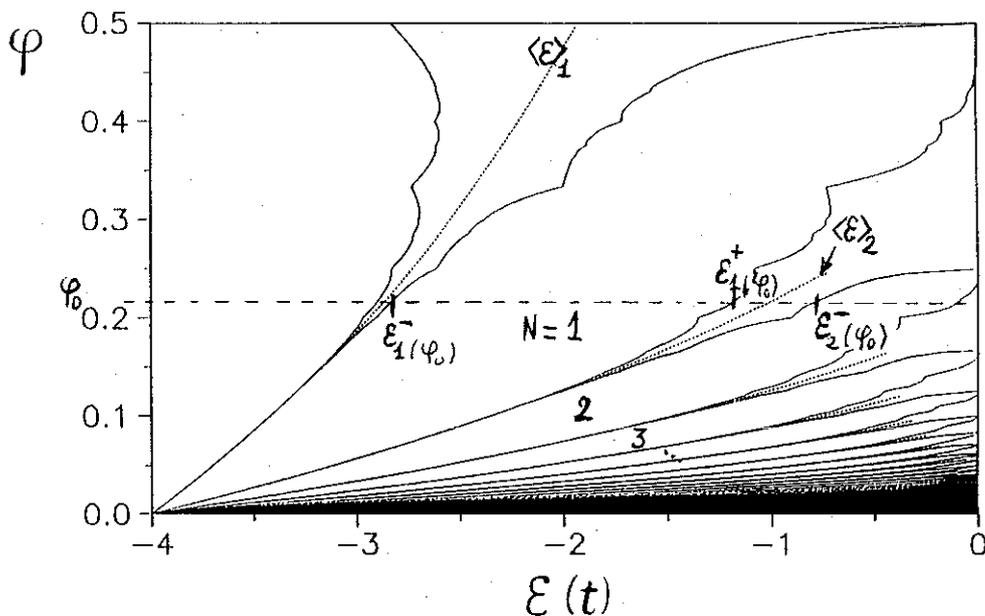


Figure C.2 : Limites (traits pleins) et énergies moyennes (pointillés) des "niveaux de Landau" du diagramme d'Hofstadter (voir texte).

D'après la variation de $\langle \epsilon \rangle_n(\varphi)$ portée sur la figure C.2, il semble que cette quantité soit continûment dérivable par rapport à φ (tant que le gap existe). Nous allons supposer que c'est effectivement le cas. Considérons une valeur fixée de la densité d'électrons, ν , et faisons varier le flux, φ . Soit le flux : $\varphi_N = \nu/N$. Pour cette valeur du flux, le niveau de Fermi se trouve dans le $N^{\text{ième}}$ gap de la figure C.2. Considérons une valeur du flux très légèrement inférieure : $\varphi = \varphi_N - \delta\varphi$. Pour cette valeur du flux, la dégénérescence des niveaux de Landau est plus faible et le niveau de Fermi se trouve donc au-dessus du $N^{\text{ième}}$ gap ($\epsilon_f > \epsilon_N^+$). L'énergie cinétique du gaz d'électrons s'écrit :

$$E_V(\varphi_N - \delta\varphi) = E_{<N}(\varphi_N - \delta\varphi) + \langle \epsilon_N^+ \rangle \delta\nu \quad [C.4]$$

où $\delta\nu$ est le nombre d'électrons au-dessus du gap et où $\langle \epsilon_N^+ \rangle$ est l'énergie moyenne de ces électrons ($E_{<N}(\varphi)$ est défini en [C.3]). D'après la relation de Wannier,

$$\delta\nu = N \delta\varphi \quad [C.5]$$

Il vient donc :

$$\frac{E_V(\varphi_N) - E_V(\varphi_N - \delta\varphi)}{\delta\varphi} = \frac{E_{<N}(\varphi_N) - E_{<N}(\varphi_N - \delta\varphi)}{\delta\varphi} + N \langle \epsilon_N^+ \rangle_{(\varphi_N - \delta\varphi)} \quad [C.6]$$

$\epsilon_N^+(\varphi)$ étant une fonction continue (d'après le théorème de continuité d'Hofstadter) et la densité d'états dans une sous-bande n'étant jamais nulle, $\langle \epsilon_N^+ \rangle_{(\varphi_N - \delta\varphi)}$ tend vers ϵ_N^+ lorsque $\delta\varphi$ tend vers zéro. Par ailleurs, nous supposons $E_{<N}(\varphi)$ continûment dérivable. $E_V(\varphi)$ est donc dérivable à gauche de φ_N :

$$\left. \frac{\partial E_V}{\partial \varphi} \right|_{\varphi_N^-} = \left. \frac{\partial E_{<N}}{\partial \varphi} \right|_{\varphi_N^-} + N \epsilon_N^+(\varphi_N) \quad [C.7]$$

De la même façon, on trouve :

$$\left. \frac{\partial E_V}{\partial \varphi} \right|_{\varphi_N^+} = \left. \frac{\partial E_{<N}}{\partial \varphi} \right|_{\varphi_N^+} + N \epsilon_N^-(\varphi_N) \quad [C.8]$$

On en déduit que les demi-tangentes à droite et à gauche du point $\varphi = \nu/N$ font un angle, α , proportionnel à la largeur du gap, G :

$$\alpha = N G \quad [C.9]$$

Cette formule explique les points anguleux observés aux valeurs $\phi=v/N$ sur la courbe de la figure C.1 qui représente la variation de l'énergie cinétique d'électrons libres.

En fait, la démonstration ci-dessus est valable pour n'importe quel gap du spectre d'Hofstadter (pas seulement pour les gaps qui sont portés sur la figure C.2). On en déduit donc, d'après la relation de Wannier, que la fonction $E_v(\phi)$ pour des électrons sur un réseau carré présente une infinité de points anguleux qui constituent un ensemble dense dans l'ensemble des nombres réels.

b.β La conjecture de Wiegmann

Au vu de la similitude déjà rappelée plus haut du spectre d'Hofstadter avec des niveaux de Landau, on s'attend à une certaine ressemblance de la variation de l'énergie cinétique avec celle obtenue pour des particules libres et portée sur la figure C.1. Ainsi, les points $\phi=v/N$ sont probablement des minima prononcés comme sur la figure C.1. Par contre, il n'y a aucune raison pour que la dégénérescence remarquable observée dans le cas des particules libres soit conservée. En d'autres termes, on s'attend à ce que la présence d'un potentiel cristallin lève la dégénérescence des points " $\phi=v/N$ ". La question qui demeure est de savoir si l'énergie pour le flux $\phi=v$ (un quantum de flux par particule) est supérieure ou inférieure à l'énergie en champ nul.

Rappelons que le gap correspondant à $N=1$ est le plus large du spectre d'Hofstadter. Cela suggère une plus forte stabilisation du système pour le flux $\phi=v$. Hasegawa, Lederer, Rice et Wiegmann ont calculé l'énergie cinétique pour quelques valeurs simples du flux et du remplissage / Hasegawa & al. 89 /. Ils ont obtenu une énergie plus faible pour le flux $\phi=v$ qu'en l'absence de flux. Ils en ont tout naturellement déduit que l'énergie cinétique du gaz d'électrons indépendants présente probablement un minimum absolu pour cette valeur du flux. C'est la "conjecture de Wiegmann".

Ce résultat est remarquable car il remet en cause la théorie du diamagnétisme de Landau. Comme nous l'avons rappelé plus haut, cette dernière repose sur un accroissement de l'énergie cinétique en présence d'un champ. En outre, comme on pourra s'en convaincre dans la dernière partie de ce chapitre, cet abaissement d'énergie est à l'origine de l'intérêt des phases à flux commensurables pour l'étude du modèle t-J.

Pour calculer l'énergie cinétique des électrons, il suffit d'intégrer l'énergie des états à une particule jusqu'au niveau de Fermi. Il est donc nécessaire de disposer de la densité d'états. Afin de déterminer la densité d'états, Hasegawa et al. ont utilisé

l'équation de Harper [B.12] qui, pour un flux rationnel ($\varphi=p/q$), est un système linéaire de q équations à q inconnues. Leur calcul numérique de l'énergie est donc limité à de faibles valeurs de q et ne peut rendre compte de la forme de la fonction $E_V(\varphi)$. Le calcul de cette fonction permettrait, en particulier, de s'assurer de la véracité de la conjecture de Wiegmann.

b.γ Calcul de l'énergie cinétique.

Afin de déterminer cette fonction, nous avons utilisé une méthode de calcul de la densité d'états non limitée aux faibles valeurs de q . Il s'agit de la méthode de récursion / Haydock & al. 72 /. Cette dernière permet, en effet, de déterminer la densité d'états sur un site dans le cas où le cristal n'est pas périodique. Cette méthode a déjà été exposée en détails par ailleurs / Mayou 87 /. Disons simplement qu'elle consiste à ramener le problème au calcul de la densité d'états sur l'extrémité d'une chaîne linéaire semi-infinie et à calculer cette densité en sommant une fraction continue.

Dans le cas particulier d'un réseau carré en présence d'un champ magnétique, la terminaison de la fraction continue est remarquablement aisée / Czycholl & Ponischowski 88 ; Peter & al. 89 /. Nous avons ainsi pu déterminer avec précision les densités d'états pour des valeurs rationnelles du flux dont le dénominateur, q , s'élève jusqu'à environ 500.

L'intégration numérique des densités d'états lorsque q est élevé est délicate car, (comme le suggèrent les figures B.8 et B.9), ces dernières présentent des variations extrêmement rapides et inégalement réparties. Afin de contourner cette difficulté, nous avons remplacé l'intégration de la densité d'états sur l'axe réel par l'intégration de la fonction de Green, sur un contour dans le plan complexe. Cette dernière est, en effet, une fonction analytique reliée à la densité d'états. Si $\rho_R(\epsilon)$ est la densité d'états sur le site R , on a :

$$\rho_R(\epsilon) = - \text{Im}(G_{(R)}(\epsilon)) / \pi \quad [\text{C.10}]$$

$$\text{avec : } G_{(R)}(\epsilon) = \langle R | (z-H)^{-1} | R \rangle$$

Il suffit alors d'introduire l'expression [C.10] dans l'intégration [C.1], de faire commuter l'intégration et la projection sur l'axe des imaginaires (Im) et d'appliquer le théorème des résidus.

b.8 Résultats.

Sur la figure C.3, nous avons représenté l'énergie cinétique des électrons en fonction du flux pour les remplissages $\nu = 1/10, 1/4$ et $1/2$. On vérifie la présence de minima marqués pour les flux $\phi = \nu/n$. En pratique, les points anguleux correspondant aux autres gaps ($M \neq 0$) sont peu apparents. Conformément à la conjecture de Wiegmann, le minimum absolu de l'énergie est toujours obtenu pour le flux $\phi = \nu$.

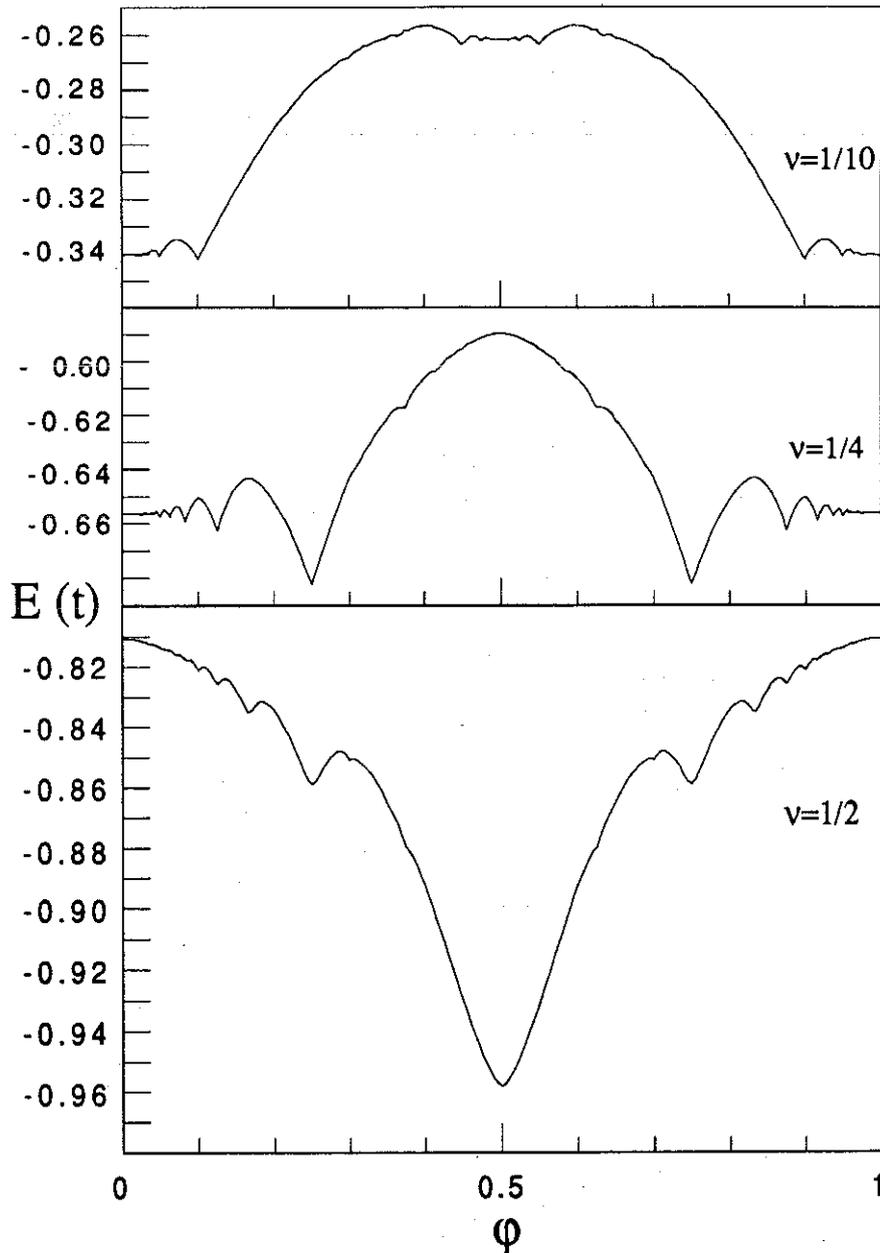


Figure C.3 : Energie cinétique par site et par spin du gaz d'électrons indépendants sur un réseau carré en fonction du nombre de quanta de flux par plaquette, ϕ , et pour plusieurs valeurs du nombre d'électrons par site et par spin, ν .

Dans le cas où la bande est presque vide et où le flux est faible, on retrouve bien un comportement de particule libre. Notons que, dans le cas particulier où la bande est exactement demi-pleine ($\nu=1/2$), les minima ne sont pas anguleux. Ceci est bien en accord avec le diagramme d'Hofstadter (figure B.9) où les "gaps" en centre de bande sont de largeur nulle.

Sur la figure C.4, nous avons porté l'énergie cinétique des électrons en l'absence de flux (trait continu) et avec le flux $\phi=\nu$ (pointillés) en fonction du remplissage de la bande. L'énergie minimisée par rapport au flux (pointillés) varie de façon très régulière avec le remplissage. L'abaissement de l'énergie cinétique par le champ n'est sensible qu'au voisinage de la bande demi-pleine où il est maximum et représente environ 18% de l'énergie en l'absence de champ.

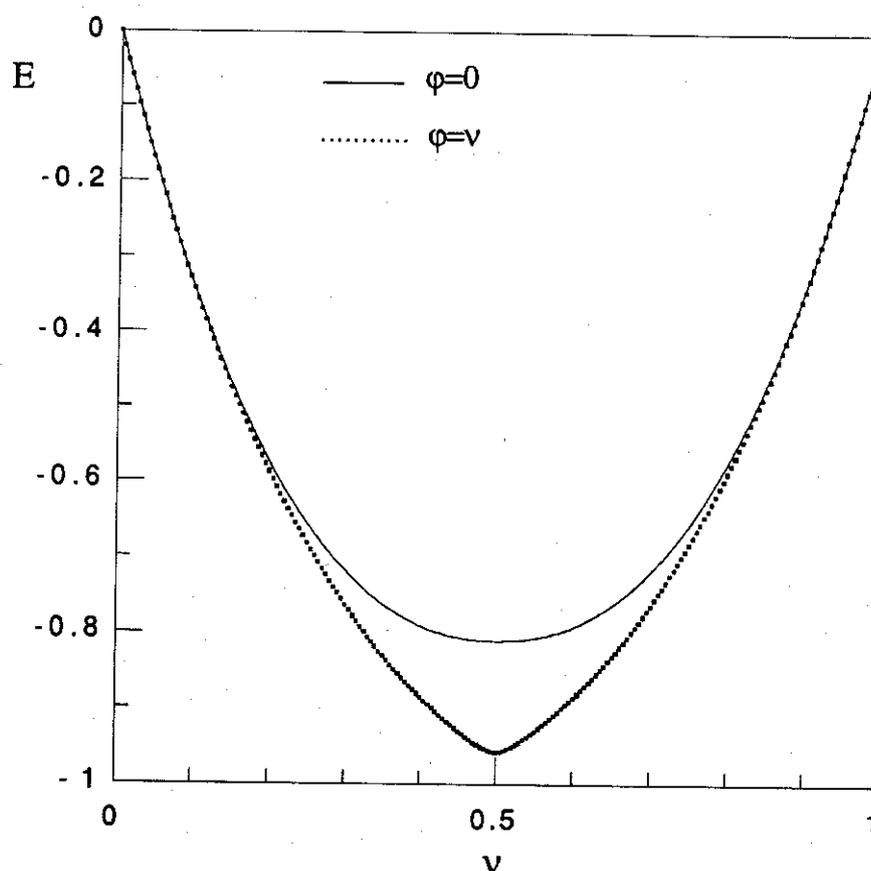


Figure C.4 : Energie cinétique du gaz d'électrons indépendants sur un réseau carré en l'absence de flux (trait plein) et en présence d'un demi-quantum de flux par particule (pointillés). L'énergie représentée est l'énergie par site et par spin. (Les points sont les valeurs effectivement calculées).

Ces mêmes résultats ont été obtenus de façon différente par Montambaux / Montambaux 89 /. Ce dernier a remplacé l'expression exacte de la densité d'états

signalée en IV.B.2.b par un ensemble de pics de dirac. Cette approximation est parfaitement justifiée lorsque q est grand. Récemment, Rammal et Bellissard ont montré par une approche semi-classique que l'énergie est minimum pour $\phi=v$ avec un point anguleux dont l'angle, α , est donné par la formule [C.8] et que la courbe $E_{\phi=v(v)}$ portée en pointillés sur la figure C.4 est infiniment différentiable excepté en $v=0$ et $v=1/2$ / Rammal & Bellissard (90) /.

3.c Autres réseaux

Qualitativement, les résultats obtenus pour le réseau carré peuvent être généralisés à d'autres réseaux bidimensionnels. Ainsi, nous avons vu plus haut que le gap le plus large du spectre d'Hofstadter, à l'origine du minimum absolu de l'énergie cinétique, apparaît au premier ordre des perturbations en t_y/t_x pour des chaînes linéaires d'intégrale de saut t_x faiblement couplées par une intégrale de saut t_y . Comme l'illustre la figure B.8, l'effet de l'anisotropie est donc de réduire la largeur des gaps dont l'ordre N (donné par [B.15]) est élevé sans altérer sensiblement la largeur des gaps principaux. On s'attend donc à retrouver essentiellement les mêmes résultats pour un réseau rectangulaire ($t_y \neq t_x$).

Ceci a été confirmé par des calculs numériques d'Hasegawa, Hatsugai, Kohmoto et Montambaux qui ont également examiné le cas de réseaux triangulaires / Hasegawa & al. 90 /. Barford et Kim ont étudié l'effet d'une intégrale de saut entre seconds voisins, t_2 , et ont constaté que, pour le réseau carré "frustré" ($t_2=t/2$), le système est littéralement paramagnétique puisque l'énergie est abaissée quelque soit le flux / Barford & Kim (90) /. Dans la partie qui suit, nous nous intéressons à l'effet d'une intégrale de saut couplant les sites de réseaux carrés "superposés".

C.2 Electrons à trois dimensions

2.a Position du problème

Dans les oxydes supraconducteurs, le système n'est pas rigoureusement bidimensionnel. Les différents plans CuO_2 sont faiblement couplés entre eux. On peut se demander ce que deviennent les courbes $E_v(\phi)$ lorsque l'on prend en compte ce couplage et, en particulier, si les minima anguleux qui jouent un rôle fondamental dans la théorie de

Lederer et al. de la supraconductivité sont conservés. De plus, le diamagnétisme de Landau en présence d'un potentiel tridimensionnel présente un intérêt en soi car il n'a, à notre connaissance, jamais été étudié auparavant.

Pour des particules libres à trois dimensions, la variation de l'énergie en fonction du flux est représentée figure C.5. On note que l'énergie cinétique augmente avec le champ magnétique appliqué ce qui donne lieu au diamagnétisme de Landau classique.

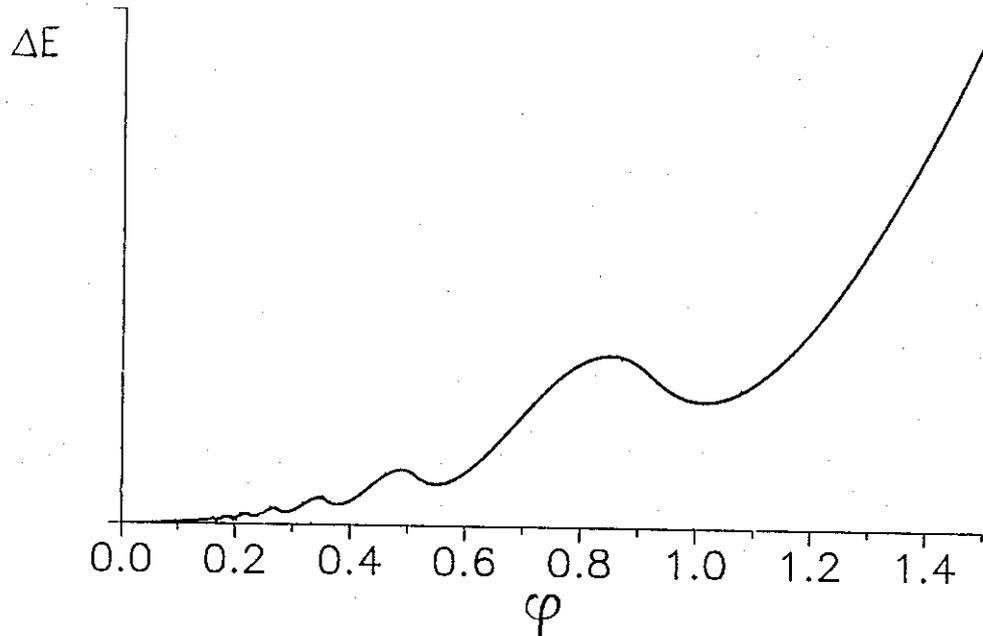


Figure C.5 : Variation de l'énergie cinétique de particules libres à trois dimensions sous l'effet d'un champ magnétique. Unité arbitraire.

Dans cette partie, nous modélisons le couplage entre des réseaux carrés par le réseau tétragonal simple représenté sur la figure C.6. De plus, nous nous limitons au cas où le champ magnétique est orienté verticalement.

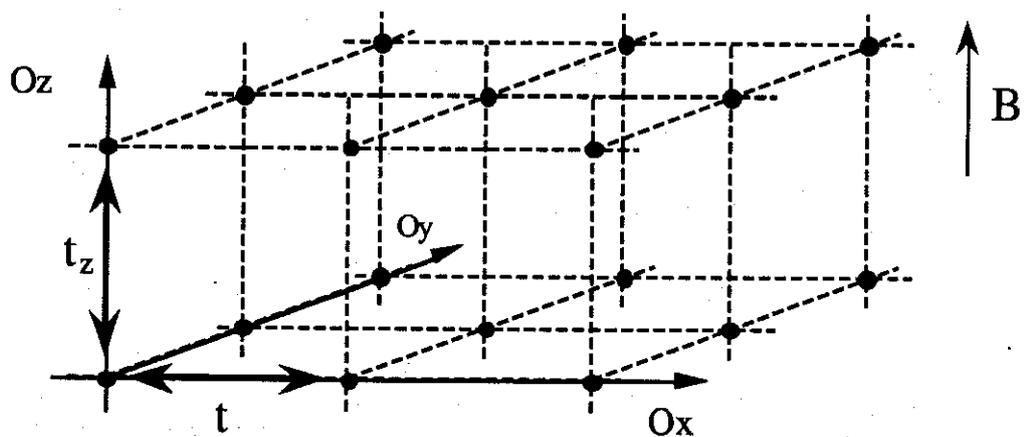


Figure C.6 : Réseau tétragonal simple.

2.a Faible couplage interplan

Nous avons vu en IV.B.4 quelle était la densité d'états de ce système. Rappelons que cette dernière peut s'écrire comme une superposition de sous-bandes. Ceelles-ci s'obtiennent en convoluant les sous-bandes d'Hofstadter pour le réseau carré avec la densité d'état, ρ_{z1} , d'une chaîne linéaire d'intégrale de saut t_z (donnée en [B.19]). L'énergie peut s'écrire en sommant la contribution de chacune des sous-bandes :

$$E = \sum_i E_i \quad ; \quad E_i = \int_{-\infty}^{\epsilon_f} \epsilon \rho_i(\epsilon) d\epsilon \quad [C.11]$$

ρ_i est la densité d'états correspondant à la $i^{\text{ème}}$ sous-bande et ϵ_f est le niveau de Fermi.

ρ_{z1} est une fonction paire et normée. On en déduit aisément que si l'on fait croître t_z à partir de zéro, la contribution d'une sous-bande à l'énergie cinétique est inchangée tant que la totalité de cette sous-bande reste en dessous du niveau de Fermi. Pour étudier l'effet du couplage interplan, il est donc suffisant de ne prendre en compte que les sous-bandes qui "coupent" le niveau de Fermi.

En particulier, si, pour le réseau carré ($t_z=0$), le niveau de Fermi se trouve dans un gap, la valeur de l'énergie reste inchangée tant que l'élargissement des sous-bandes dû au couplage interplan n'a pas "comblé" le gap. D'après [B.16], la largeur d'un gap diminue linéairement avec le couplage interplan pour s'annuler lorsque :

$$t_z = G/4 \quad [C.12]$$

où G est la largeur du gap en l'absence de couplage.

L'équation [C.8] qui implique l'existence d'un point anguleux lorsque le niveau de Fermi se trouve dans un gap est toujours valable à trois dimensions. On en déduit que le point anguleux de l'énergie en fonction du flux pour le réseau carré persiste pour $t_z < G/4$, l'angle diminuant linéairement avec le couplage. Cependant, cela ne signifie pas que ces points restent des minima tant que $t_z < G/4$. En général, ce n'est pas le cas.

On peut néanmoins prouver que pour un remplissage, ν , différent de 0 et 1/2, il existe un couplage t_z non nul en dessous duquel le minimum absolu d'énergie a lieu pour le flux $\phi=\nu$. Nous le démontrons dans le paragraphe qui suit.

Si $v = \varphi$ et $v \neq 0, 1/2$, le niveau de Fermi se trouve dans un gap. On a donc un point anguleux, les demi-tangentes à gauche et à droite étant données par [C.7] et [C.8]. Si, conformément à la conjecture de Wiegmann, le flux $\varphi = v$ correspond au minimum absolu d'énergie pour le réseau carré, les demi-tangentes à gauche et à droite sont respectivement strictement négative et strictement positive. D'après la remarque du paragraphe précédent, cette propriété est conservée pour un couplage interplan suffisamment faible. Si $\varphi = v$ n'est plus le minimum d'énergie ce dernier n'est donc pas dans son voisinage. Comme par ailleurs, l'énergie varie continûment avec le couplage interplan et la fonction $E_v(\varphi)$ est définie et continue dans l'intervalle fermé $[0, 1/2]$, il existe des couplages interplans non nuls pour lesquels $\varphi = v$ correspond toujours au minimum absolu d'énergie.

2.c Fort couplage interplan.

Nous étudions ici, par une approche perturbative, le comportement du système dans la limite où t_z/t tend vers l'infini. En développant en série de Taylor, la densité d'états de la chaîne linéaire, ρ_1 , au voisinage du niveau de Fermi, on obtient les expressions suivantes du remplissage de bande, v , et de l'énergie cinétique, E , valables pour $t_z/t > 2$:

$$v = \int_{-\infty}^{\varepsilon_f} \rho_1(\varepsilon) d\varepsilon + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\rho_1^{(p)}(\varepsilon_f)}{(p+1)!} M_{p+1} \quad [\text{C.13}]$$

$$E = \int_{-\infty}^{\varepsilon_f} \varepsilon \rho_1(\varepsilon) d\varepsilon + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\rho_1^{(p)}(\varepsilon_f)}{(p+2)!} [(p+2) \varepsilon_f M_{p+1} - M_{p+2}] \quad [\text{C.14}]$$

M_p est le moment d'ordre p de la densité d'états, ρ , du réseau carré en présence d'un flux :

$$M_p = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^p \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad [\text{C.15}]$$

Soit n , le premier ordre pour lequel le moment, M_n , est modifié par la présence du champ. Dans la limite où t_p/t tend vers zéro, le développement en série de Taylor dans les équations [C.13] et [C.14] peut être tronqué à un ordre fini. En supprimant les termes du développement au-dessus de $p=n-2$, on vérifie que l'énergie cinétique varie de la quantité :

$$\Delta E = - \frac{\rho_1^{(n-2)}(\epsilon_f)}{n!} \Delta M_n \quad [C.16]$$

où ΔM_n est la variation du moment d'ordre n sous l'effet du champ : $\Delta M_n = M_n(\varphi) - M_n(0)$.

Une phase à flux étant un état homogène, la densité d'états totale par site est égale à la densité d'états locale sur un site. D'une façon générale, les moments, M_n , de la densité d'états locale sur un site R peuvent s'exprimer en fonction des éléments de matrice de l'hamiltonien dans l'espace direct. Rappelons, en effet, que la densité d'états, ρ , sur le site R s'exprime :

$$\rho_{(\epsilon)} = \sum_i \delta_{(\epsilon-\epsilon_i)} |\psi_i(R)|^2 \quad [C.17]$$

La sommation porte sur les états propres pour l'hamiltonien de fonction d'onde $\psi_i(R)$ et de valeur propre ϵ_i . $\delta_{(\epsilon)}$ est la distribution de dirac. En insérant [C.17] dans [C.15], il vient :

$$M_n = \sum_i \epsilon_i^n |\psi_i(R)|^2 \quad [C.18]$$

En explicitant $\psi_i(R)$ comme le produit scalaire de l'état stationnaire $|i\rangle$ et de l'orbitale $|R\rangle$, il vient :

$$M_n = \langle R | H^n | R \rangle \quad [C.19]$$

soit :

$$M_n = \sum_{R_1 \dots R_{n-1}} \langle R | H | R_1 \rangle \langle R_1 | H \dots H | R_{n-1} \rangle \langle R_{n-1} | H | R \rangle \quad [C.20]$$

Dans le cas présent, où seules les intégrales de saut entre sites premiers voisins sont non nulles, l'expression [C.20] revient à sommer sur tous les parcours fermés dont la figure C.7 donne quelques exemples.

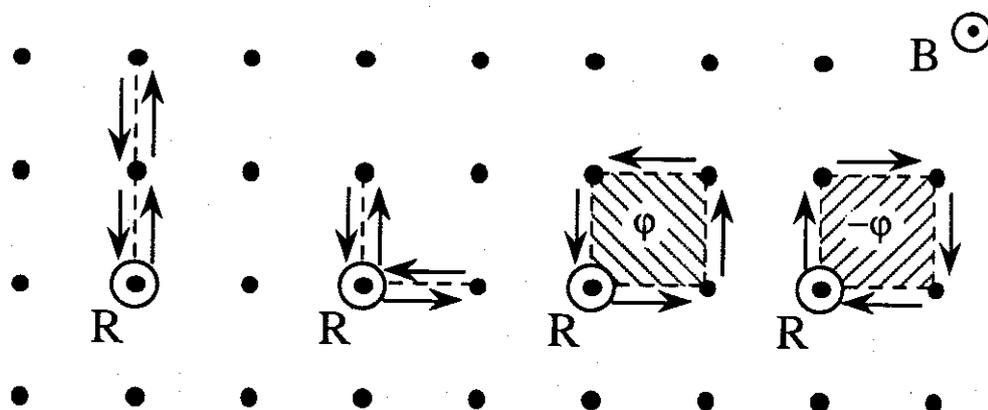


Figure C.7 : Exemples de parcours d'ordre quatre pour le réseau carré.

Dans le cas d'un réseau avec une intégrale de saut constante entre sites premiers voisins, la contribution au moment total d'un circuit comportant n sites est donc : $t^n e^{i\phi}$ où ϕ est le nombre de quanta de flux traversant la surface délimitée et orientée par le circuit (d'après [B.9]). La contribution d'un parcours à la variation du moment sous l'effet du champ est donc :

$$\delta M_n = 2t^n (\cos\phi - 1) \quad [C.21]$$

Seuls les parcours qui ne "reviennent pas par le même chemin" contribuent à la variation du moment, ΔM_n , sous l'effet du champ.

Dans le cas du réseau carré, le premier ordre pour lequel le champ intervient est donc l'ordre 4 (voir figure C.7). La variation de l'énergie cinétique sous l'effet d'un flux ϕ est donc (d'après [C.16] et [C.21]) :

$$\Delta E = -t^4/3 \rho_1''(\epsilon_f) (\cos\phi - 1) \quad [C.22]$$

La dérivée seconde de ρ_1 est toujours positive. L'énergie cinétique est donc augmentée quelque soit le champ. Pour un champ magnétique orienté verticalement, le réseau tétragonal est donc diamagnétique dans la limite où t_z/t tend vers l'infini (quelque soit le remplissage de la bande).

Plus généralement, on montre, de cette façon, que les réseaux de chaînes linéaires faiblement couplées et disposées parallèlement selon un réseau carré, triangulaire ou en nids d'abeille, le champ magnétique étant orienté parallèlement aux chaînes, sont diamagnétiques sauf pour le cas triangulaire lorsque la bande est plus qu'à moitié pleine où le système est paramagnétique / Peter & al. 90 /.

Dans le cas de bandes symétriques (réseau carré, en nid d'abeilles...) et lorsque la bande est demi-remplie, les équations [C.13] et [C.14] permettent d'obtenir un résultat exact. Dans ce cas, le champ magnétique conservant la symétrie de la bande par rapport à l'axe $\epsilon=0$, le niveau de Fermi reste toujours égal à zéro. Les dérivées successives, $\rho_1^{(n)}(0)$, de la densité d'états de la chaîne linéaire sont nulles aux ordres impairs et strictement positives aux ordres pairs. Seuls les moments d'ordre pair contribuent donc à la variation de l'énergie cinétique avec le flux. D'après [C.21] et [C.22], cette variation est nécessairement positive. Pour $\nu=1/2$ et $t_\perp/t > 2$, le système est donc diamagnétique.

2.d Couplage quelconque

d.α Calculs numériques

Afin de calculer l'énergie, nous avons utilisé la formule [C.11]. Dans le cas où le dénominateur du flux, q , est suffisamment élevé ($q > 10$), le remplacement de la densité d'états réelle du réseau carré par un ensemble de pics de dirac introduit une erreur négligeable ($\delta E/E < 10^{-4}$). Grâce à cette approximation, l'intégration de chaque sous-bande peut se faire de façon analytique (la densité est donnée par la formule [B.19]). Notre méthode permet donc un calcul très rapide et pour un grand nombre de valeurs du flux.

d.β Résultats

L'effet du couplage interplan est illustré sur la figure C.8 où nous avons représenté l'énergie en fonction du flux pour le remplissage $\nu=1/4$ et des couplages interplans inférieurs au couplage entre les sites d'un même plan. On vérifie bien que, conformément à nos prévisions, l'angle des points anguleux augmente avec le couplage tandis que l'énergie en ces points reste constante tant que le point anguleux persiste. On observe que la diminution d'énergie pour les autres valeurs du flux est telle que les minima laissent place à des maxima locaux lorsque le point anguleux disparaît.

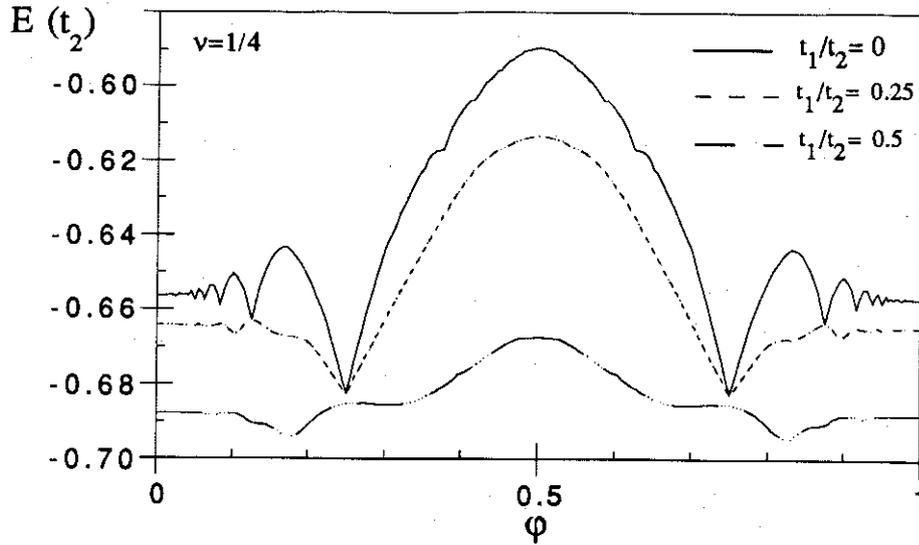


Figure C.8 : Energie cinétique du gaz d'électrons indépendants sur un réseau tétragonal simple en présence d'un champ magnétique selon l'axe (001) en fonction du nombre de quanta de flux par plaquette, ϕ , et pour différentes valeurs du rapport, t_z/t , entre les intégrales de saut selon (001) et selon (100). Le nombre d'électrons par site et par spin, ν , est égal à $1/4$. L'énergie est calculée par site, par spin et en unité de t .

La figure C.9 représente la variation de l'énergie en fonction du flux pour la même densité d'électrons ($\nu=1/4$) mais pour des couplages interplans plus élevés. Il apparaît que, pour un réseau tridimensionnel où le couplage interplans n'est pas très inférieur à l'intégrale de saut du réseau bidimensionnel, il n'y a certes plus de minima anguleux à $\phi=\nu$, mais l'énergie continue généralement d'être abaissée par des flux non

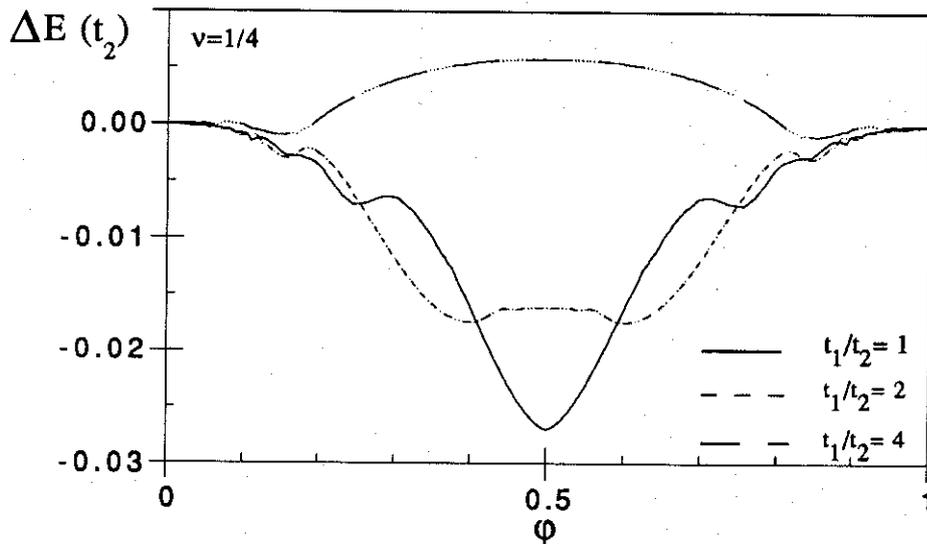


Figure C.9 : Idem que figure C.8 mais pour des valeurs plus élevées de t_z/t . De plus l'énergie pour le flux $\phi=0$ est prise comme l'origine des énergies .

nuls. Ceci est en opposition avec le cas des particules libres dans l'espace à trois dimensions où l'énergie augmente avec le champ appliqué (voir figure C.5). Par exemple, pour le réseau cubique, l'énergie est abaissée pour tout flux non nul.

Pour le cas $t_z \gg t$, on retrouve bien le comportement diamagnétique prévu plus haut. Notons cependant que l'effet du champ sur l'énergie est alors très faible. Cela se comprend dans la mesure où, dans cette limite, le système devient unidimensionnel. Or un champ magnétique ne peut avoir d'effet sur un système rigoureusement unidimensionnel.

Sur la figure C.10, nous avons représenté, pour le réseau cubique et en fonction du remplissage, la valeur du flux, φ_{\min} (trait plein), qui abaisse le plus l'énergie pour chaque remplissage et la variation d'énergie correspondante (tirets) par rapport au système non magnétique. Il apparaît que, contrairement au cas du réseau carré, l'abaissement maximum de l'énergie cinétique par le champ magnétique n'a plus lieu pour la bande demi-pleine. Par contre, on note que cet abaissement maximum est toujours obtenu pour un demi-quantum de flux par plaquette quelque soit la valeur du couplage interplan.

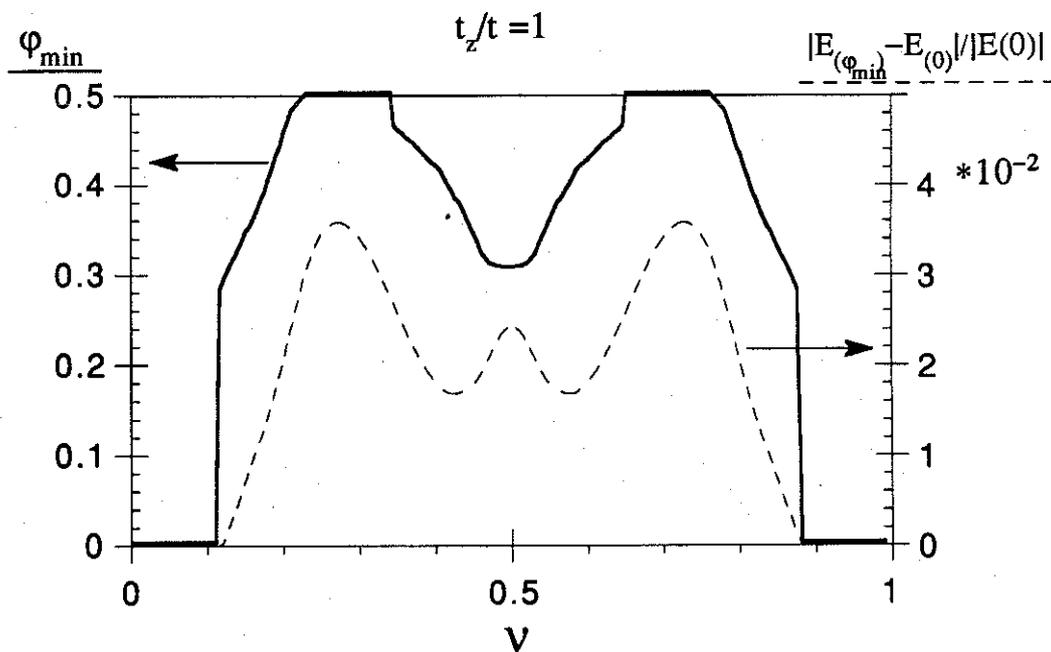


Figure C.10 : Pour le réseau cubique, valeur du flux, φ_{\min} , (trait plein) minimisant l'énergie et abaissement relatif d'énergie correspondant (tirets), en fonction du remplissage de la bande.

Le diagramme de la figure C.11 indique les régions du plan $(\nu, t_z/t)$ où le système est minimisé par un flux nul ($\phi=0$, hachures fines), les régions pour lesquelles l'énergie est minimisée par un demi-quantum de flux par plaquette ($\phi=1/2$, hachures épaisses) et les régions pour lesquelles l'énergie est minimisée par un quantum de flux par particule ($\phi=\nu$, zone noircie).

On vérifie bien que la minimisation par le flux $\phi=\nu$ correspond à des couplages interplans inférieurs au quart du gap principal du diagramme d'Hofstadter ($M=0, N=1$, voir figure C.2). En outre, on vérifie bien que le système est diamagnétique en bords de bande ce dernier cas pouvant être décrit par un modèle de particules libres.

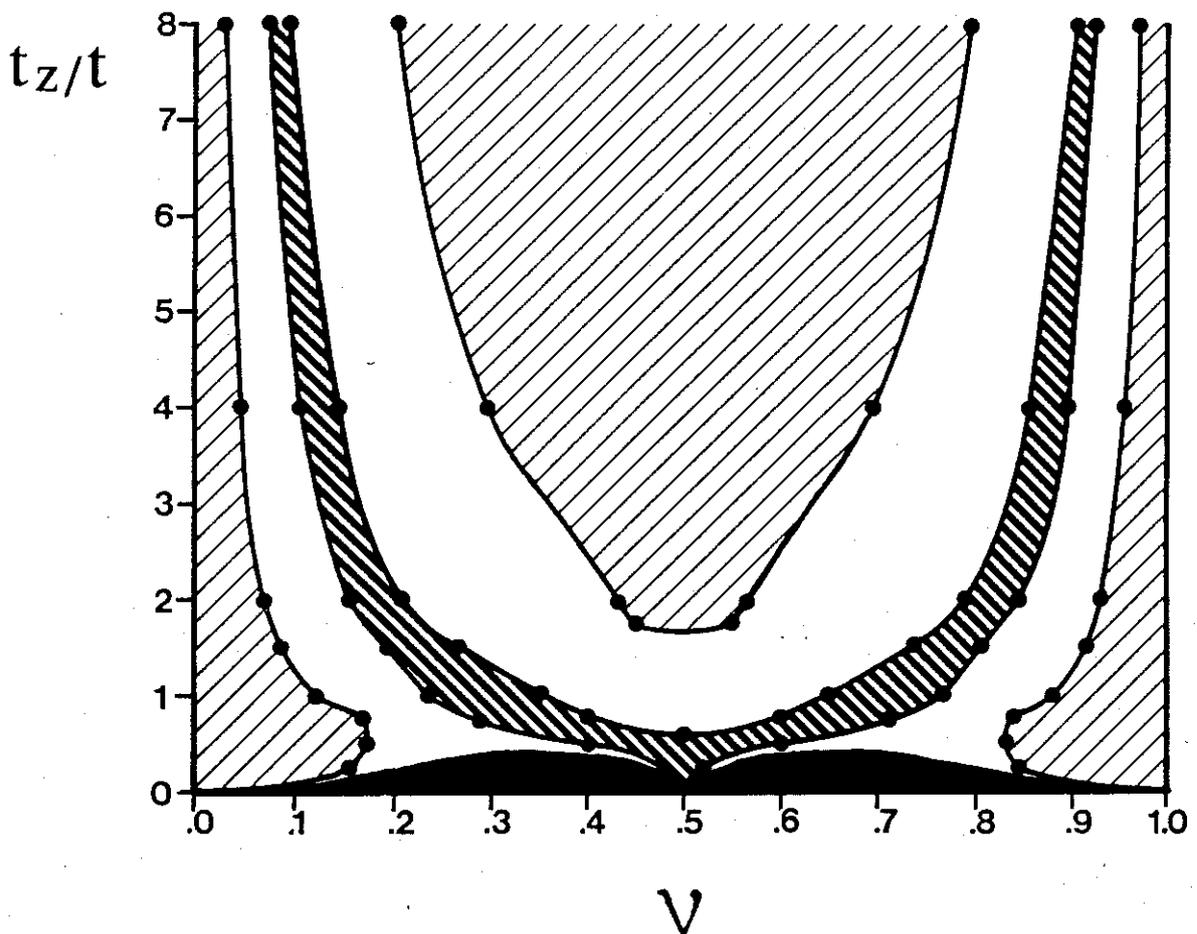


Figure C.11 : Régions dans le plan $(\nu, t_z/t)$ pour lesquelles l'énergie cinétique des électrons est minimum en flux nul (hachures fines), pour un demi-quantum de flux par plaquette (hachures épaisses) et pour un quantum de flux par particule (zone noircie).

Pour la bande demi-pleine, le système est diamagnétique ($\phi_{\min}=0$) pour t_z/t supérieur à environ 1.7. Ceci est en accord avec le résultat analytique annoncé plus haut et qui prévoit, pour $t_z/t > 2$, un comportement diamagnétique. Enfin, on vérifie bien que le système est diamagnétique dans la limite où t_z/t tend vers l'infini. On note cependant que cette limite n'est que très lentement atteinte à cause de la persistance d'un domaine de remplissage minimisé par des flux non nuls qui, assez curieusement, tend vers la bande presque vide (ou presque pleine) dans la limite des forts couplages interplans.

Sur la figure C.12, nous avons porté le plus fort abaissement relatif d'énergie obtenu pour chaque valeur du couplage interplan. Il apparaît qu'un abaissement de quelques pourcents persiste jusqu'à des couplages très supérieurs à t . Cependant, on note une nette réduction de cette quantité lorsque l'on passe du réseau carré au réseau cubique (de 18% à 3%).

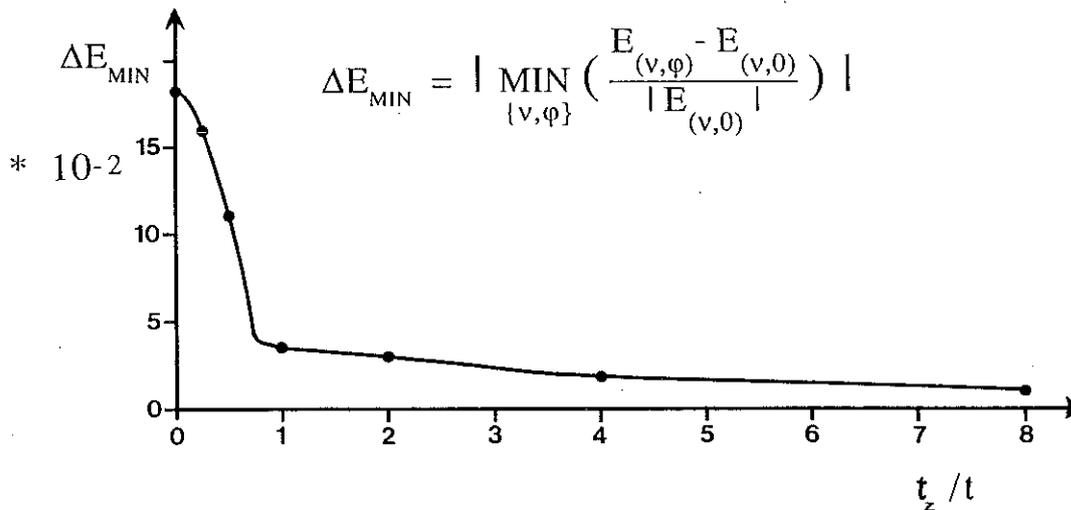


Figure C.12 : Abaissement relatif d'énergie maximisé par rapport au flux et au remplissage en fonction du couplage interplan t_z/t .

Très récemment, Hasegawa a calculé l'énergie cinétique des électrons pour des valeurs simples du flux ($\phi=1/2, 1/3\dots$) et les orientations (001), (011) et (111) du champ magnétique / Hasegawa (90) /. Ses résultats suggèrent que, lorsque le champ magnétique est dirigé selon l'axe (111), la relation fondamentale, $\phi=v$, donnant le flux qui minimise l'énergie pour les réseaux bidimensionnels reste valable (tant que le niveau de Fermi n'est pas trop près des bords de bande). Pour cette valeur du flux, l'énergie serait minimum pour l'orientation (111) tandis qu'elle serait maximum pour l'orientation (001).

V.D STABILITE DES PHASES A FLUX UNIFORMES

Introduction

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons vu que, lorsque la répulsion coulombienne, U , de deux électrons sur le même site est très supérieure à l'intégrale de saut, t , entre deux sites premiers voisins, il est possible de restreindre l'espace des états électroniques en interdisant à deux électrons d'occuper le même site. Nous avons vu que, dans cet espace, \mathcal{E}_0 , l'énergie cinétique des électrons est à l'origine, d'une part, d'une énergie cinétique des lacunes (sites vides) et, d'autre part, d'un couplage antiferromagnétique des spins. Ces deux aspects sont respectivement à l'origine du terme cinétique, H_t et du terme de Heisenberg, H_J , de l'hamiltonien t-J. Soit P , le projecteur sur \mathcal{E}_0 . (P est le projecteur de Gutzwiller dans la limite des fortes répulsions). Soit χ_{ij}^σ , l'opérateur de saut entre les sites i et j pour le spin σ . L'hamiltonien t-J s'écrit :

$$H_{t-J} = H_t + H_J \quad [D.1]$$

$$H_t = P H_c P \quad ; \quad H_c = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \chi_{ij}^\sigma + \chi_{ji}^\sigma \quad [D.2]$$

$$H_J = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j \quad [D.3]$$

$$\begin{aligned} S_i \cdot S_j &= S_{iz} \cdot S_{jz} + S_{ix} \cdot S_{jx} + S_{iy} \cdot S_{jy} \\ &= (n_i^\uparrow - n_i^\downarrow)(n_j^\uparrow - n_j^\downarrow)/4 - (\chi_{ij}^\uparrow \chi_{ji}^\downarrow + \chi_{ij}^\downarrow \chi_{ji}^\uparrow)/2 \end{aligned} \quad [D.4]$$

La notation $\langle ij \rangle$ signifie que l'on somme sur les paires de sites premiers voisins.

Afin d'estimer variationnellement le fondamental de l'hamiltonien t-J, il est possible de prendre comme fonction d'onde d'essai, la projection, $|\Psi\rangle$, sur l'espace \mathcal{E}_0 , d'un état de particules indépendantes, $|\Psi_0\rangle$: $|\Psi\rangle = P |\Psi_0\rangle$. Dans la partie précédente, nous avons vu qu'un champ magnétique appliqué à un gaz d'électrons indépendants est à l'origine d'un nouvel état orbital du système. Le projeté sur \mathcal{E}_0 d'un tel état est ce qu'on appelle une "phase à flux". L'objet de cette partie est d'étudier variationnellement le fondamental de l'hamiltonien t-J à l'aide de phases à flux.

Dans un premier temps, nous estimons, par la méthode de Gutzwiller, la valeur moyenne de l'hamiltonien t-J dans une phase à flux. Nous exposons ainsi l'approche de Lederer, Poilblanc et Rice / Lederer & al. 89 /. Dans ce calcul, il subsiste une difficulté concernant l'évaluation du terme cinétique. Dans un second temps, nous présentons une approche permettant de contourner cette difficulté. Enfin, nous discutons les résultats obtenus par cette dernière approche quant à la stabilisation des phases à flux dans le modèle t-J.

D.1 Energie moyenne dans une phase à flux

Nous avons vu au chapitre I, que, moyennant un facteur de renormalisation adéquat, l'approximation de Gutzwiller permet de remplacer la valeur moyenne d'un opérateur dans l'état projeté, $|\Psi\rangle$, par la valeur moyenne de l'opérateur dans l'état non projeté, $|\Psi_0\rangle$. En particulier, nous avons déterminé les facteurs de renormalisation, g_t et g_J , pour l'opérateur de saut, χ_{ij}^σ , et l'opérateur de couplage spin-spin, respectivement (voir I.C.1.d). En appliquant l'approximation de Gutzwiller, on obtient donc :

$$\langle H_t \rangle = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} g_t (\langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0 + \langle \chi_{ji}^\sigma \rangle_0) \quad [D.5]$$

$$\langle H_J \rangle = J \sum_{\langle ij \rangle} g_J \langle S_i \cdot S_j \rangle_0 \quad [D.6]$$

Où $\langle A \rangle$ est la valeur moyenne de l'opérateur A dans la phase à flux $|\Psi\rangle$ et $\langle A \rangle_0$ est la valeur moyenne dans l'état de particules indépendantes $|\Psi_0\rangle$. D'après [I.B.15] et [I.C.15], l'expression des facteurs de renormalisation en fonction du dopage, $x = 2(1/2 - \nu)$, est :

$$g_t = \frac{2x}{1+x} \quad ; \quad g_J = \frac{4}{(1+x)^2} \quad [D.7]$$

La renormalisation de Gutzwiller défavorise l'énergie cinétique et favorise les corrélations antiferromagnétiques. Plus particulièrement, pour la bande demi-pleine, l'énergie cinétique est nulle et les "corrélations antiferromagnétiques" sont augmentées d'un facteur 4. Cela se comprend aisément en comptabilisant les configurations possibles

d'une paire de sites pour les états projeté et non projeté. Ces configurations sont portées sur le tableau D.1.

$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\downarrow\uparrow$	$\downarrow\downarrow$
$\uparrow\downarrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow\downarrow$	$\downarrow\uparrow\downarrow$
$\emptyset\uparrow$	$\emptyset\downarrow$	$\uparrow\emptyset$	$\downarrow\emptyset$
$\uparrow\downarrow\emptyset$	$\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$	$\emptyset\uparrow\downarrow$	$\emptyset\emptyset$

Tableau D.1 : Configurations de spin d'une paire de sites premiers voisins. En présence de fortes corrélations et lorsque la bande est demi-pleine, seules les configurations de la première ligne sont permises.

Seules les configurations de la première ligne du tableau D.1, ne sont pas éliminées par la projection (pour $v=1/2$). Dans l'expression de la valeur moyenne d'un opérateur, le poids des configurations des trois dernières lignes est donc annulé tandis que celui d'une configuration de la première ligne est renormalisé par un facteur 4 (à cause de l'augmentation de son poids relatif). Or l'opérateur de saut et l'opérateur de couplage spin-spin ne couplent respectivement que des configurations des trois dernières lignes et de la première ligne (entre elles). D'où la renormalisation annoncée plus haut.

Comme nous l'avons déjà signalé, la valeur moyenne de l'opérateur de couplage spin-spin dans un état de particules indépendantes peut s'écrire à l'aide d'opérateurs de saut (voir équation [A.3]). En outre, une phase à flux est un état singulet de spin, les valeurs moyennes dans un tel état sont donc indépendantes du spin et l'équation [D.6] donne donc :

$$\langle H_J \rangle = -\frac{3}{2} J g_J \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} |\langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0|^2 \quad [D.8]$$

Il ne reste plus qu'à estimer la quantité $\langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0$. Dans le cas où la fonction d'onde d'électrons indépendants est un déterminant de Slater d'ondes planes, cette quantité est indépendante de i et j et est donc directement proportionnelle à l'énergie cinétique des électrons indépendants. Ce n'est plus le cas ici. Par contre, on vérifie que la quantité $e^{i\varphi_{ij}} \langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0$ où φ_{ij} est relié au potentiel vecteur par la relation [B.9], est

indépendante de la paire de premiers voisins, $\langle ij \rangle$, et est donc proportionnelle à l'énergie cinétique, E_0 , des électrons en présence d'un flux magnétique / Lederer & al. 89 / :

$$\langle e^{i\varphi_{ij}} \chi_{ij}^\sigma \rangle_0 = \frac{1}{8L_t} \langle t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} e^{i\varphi_{ij}} \chi_{ij}^\sigma \rangle_0 = \frac{1}{4t} E_0(\varphi)$$

$$\langle \chi_{ij}^\sigma \rangle_0 = -e^{-i\varphi_{ij}} \xi_0/4 \quad [D.9]$$

$\xi_0(\varphi)$ est la valeur absolue du rapport à l'intégrale de saut de l'énergie cinétique par site et par spin du gaz d'électrons indépendants en présence du flux par plaquette, φ . Cette quantité a été calculée dans la partie précédente ($\xi_0 = E_0/t$).

En introduisant [D.9] dans [D.5] et [D.8], il vient :

$$\langle H_t \rangle / L = -2 |t| g_t \langle \langle \cos \varphi_{ij} \rangle \rangle \xi_0(\varphi) \quad [D.10]$$

$$\langle H_J \rangle / L = -3/16 J g_J \xi_0^2(\varphi) \quad [D.11]$$

$\langle \langle \cos \varphi_{ij} \rangle \rangle$ est la valeur moyenne de $\cos \varphi_{ij}$ sur toutes les liaisons entre premiers voisins. Cette quantité dépend de la jauge choisie.

La démarche adoptée par Lederer et al. consiste à minimiser l'énergie moyenne non seulement par rapport au flux φ mais aussi par rapport à la jauge. Le choix de la jauge n'intervient que sur la valeur moyenne du terme cinétique. Afin de minimiser l'énergie totale, il suffit donc de minimiser par rapport au flux l'expression :

$$\langle H_{t-J} \rangle = -2 |t| g_t K \xi_0 - 3/16 J g_J \xi_0^2 \quad [D.12]$$

Où $K(\varphi)$ est obtenu en maximisant $\langle \langle \cos \varphi_{ij} \rangle \rangle$ par rapport à la jauge.

En fait, la quantité $K(\varphi)$ a déjà été étudiée à l'occasion d'autres problèmes / Teitel & Jayaprakash 83 ; Hasley 85 /. Elle reste cependant difficile à estimer. Le nombre de jauges que l'on peut choisir pour une valeur du flux est considérable si bien qu'une maximisation numérique de $\langle \langle \cos \varphi_{ij} \rangle \rangle$ est difficile et limite l'étude à des valeurs rationnelles simples du flux ($\varphi = p/q$ avec $q \approx 10$). Lederer et al. ont estimé la valeur de K pour quelques valeurs simples du flux. Pour ce faire, ils ont déterminé la plus grande valeur de $\langle \langle \cos \varphi_{ij} \rangle \rangle$ pour un ensemble de jauges particulières, ils obtiennent ainsi une estimation par défaut de K .

D.2 Une approche variationnelle

2.a Linéarisation de l'espace variationnel

En somme, la méthode de Lederer et al. consiste à minimiser l'énergie dans l'espace des phases à flux uniforme, une phase à flux étant déterminée par le choix d'un potentiel vecteur, $A(\mathbf{R})$, correspondant à un champ magnétique uniforme. Mais l'espace variationnel ainsi défini est trop grand pour que l'on puisse faire une minimisation numérique rigoureuse. Afin d'éviter cette difficulté, plutôt que de restreindre l'espace variationnel, nous allons le prolonger de façon à lui donner une structure vectorielle. Moyennant un certain nombre d'approximations justifiées dans la limite des faibles dopages, nous obtenons une expression de l'énergie ne dépendant plus du choix de jauge.

Une configuration quelconque du système est donnée, d'une part, par l'ensemble, T , des sites occupés par des lacunes et, d'autre part, par l'état de spin, S_T , des autres sites du cristal. Une phase à flux peut être représentée par sa fonction d'onde dans \mathbf{E}_0 , $\Psi_{(T,S_T)}$. L'idée est de modifier la dépendance en T de Ψ en conservant sa dépendance en S_T , pour une valeur donnée de T .

Soit $|\Psi_T\rangle$ la projection de $|\Psi\rangle$ sur le sous-espace engendré par les configurations électroniques correspondant à une même répartition des lacunes, T :

$$\Psi_{T'(T',S_T)} = \Psi_{(T,S_T)} \quad \text{si } T'=T \quad \text{et} \quad \Psi_{T'(T',S_T)} = 0 \quad \text{si } T' \neq T \quad [\text{D.13}]$$

La norme au carré de cette projection est la probabilité, $P_{(T)}$, de la configuration de lacunes, T , dans l'état $|\Psi\rangle$:

$$P_{(T)} = \langle \Psi_T | \Psi_T \rangle = \sum_{S_T} |\Psi_{(T,S_T)}|^2 \quad [\text{D.14}]$$

Soit $|T\rangle$, le vecteur obtenu en normant $|\Psi_T\rangle$:

$$|T\rangle = \frac{|\Psi_T\rangle}{\sqrt{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle}} \quad [\text{D.15}]$$

L'ensemble des vecteurs $|T\rangle$ constitue une famille orthonormée. Le sous-espace vectoriel, \mathcal{A} , engendré par cette famille généralise la phase à flux $|\Psi\rangle$ pour le potentiel vecteur A . Ainsi, on a :

$$|\Psi\rangle = \sum_T \sqrt{P(T)} |T\rangle \quad [\text{D.16}]$$

Plus généralement, un vecteur quelconque, $|\phi\rangle$, de \mathcal{A} est donné par sa "fonction d'onde", $\phi(T)$:

$$|\phi\rangle = \sum_T \phi(T) |T\rangle \quad [\text{D.17}]$$

Les électrons étant des fermions, les fonctions d'onde des états $|\phi\rangle$ et $|T\rangle$ sont antisymétriques. $\phi(T)$ est donc une fonction d'onde symétrique. De plus, deux lacunes ne peuvent occuper le même site. L'espace \mathcal{A} peut être vu comme décrivant l'état d'un ensemble de particules sans spin sur un réseau, ces dernières correspondant aux lacunes et se comportant comme des bosons de coeur dur. On peut voir là une correspondance avec les holons / Kivelson & al 89 /.

Notre méthode variationnel consiste, pour chaque valeur du potentiel vecteur, A , à minimiser l'énergie par rapport à la "fonction d'onde" de lacunes, $\phi(T)$. Cette dernière minimisation se faisant dans un espace vectorielle, est équivalente à diagonaliser l'hamiltonien en projection dans cet espace. Pour cela, il faut déterminer ses éléments de matrice, $\langle T' | H | T \rangle$. Nous allons voir que l'approximation de Gutzwiller permet une évaluation de ces éléments de matrice.

2.b L'hamiltonien effectif

Dans l'hamiltonien t-J, le terme de Heisenberg, H_J , ne modifie pas la configuration des lacunes tandis que le terme cinétique, H_t , la modifie nécessairement. Dans \mathcal{A} , H_J détermine donc les éléments de matrice diagonaux de H tandis que H_t détermine les éléments non diagonaux.

Soit l'élément diagonal correspondant à la configuration T :

$$\langle T | H | T \rangle = \langle T | H_J | T \rangle \quad [\text{D.18}]$$

Cette quantité est déterminée par la fonction d'onde de spin en dehors des lacunes. Dans le cas d'un faible nombre de lacunes, en première approximation, on peut supposer cette quantité indépendante de T :

$$E^* \cong E(T) = \langle T | H_J | T \rangle \cong \langle \Psi | H_J | \Psi \rangle \quad [\text{D.19}]$$

D'après [D.11],

$$E^* \equiv \langle H_J \rangle \equiv -3/16 L J g_J \xi_0^2 \quad [D.20]$$

Soit l'élément non diagonal entre les vecteurs $|T'\rangle$ et $|T\rangle$:

$$\langle T' | H | T \rangle = \langle T' | H_t | T \rangle \quad [D.21]$$

D'après la forme de H_t , cet élément n'est non nul que si T et T' ne diffèrent que par le déplacement d'une lacune entre deux sites premiers voisins. De plus, à faible dopage, les lacunes peuvent être supposées indépendantes. Il est raisonnable de supposer cet élément de matrice indépendant de la configuration des lacunes en dehors de celle qui se déplace. Tout se passe donc comme si l'on était en présence d'un ensemble de particules sur un réseau carré avec l'intégrale de saut entre premiers voisins :

$$t_{ij}^* = \langle T_i' | H_t | T_i \rangle / L = t \langle T_i' | \chi_{ij} | T_i \rangle \quad [D.22]$$

T_i est une configuration des lacunes où le site i est occupé par une lacune et T_i' est déduite de T_i par déplacement d'une lacune de i vers j . χ_{ij} est l'opérateur de saut indépendamment du spin :

$$\chi_{ij} = \chi_{ij}^\uparrow + \chi_{ij}^\downarrow \quad [D.23]$$

Par ailleurs, en développant $|\Psi\rangle$ sur la base des $|T\rangle$, il vient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \chi_{ij} | \Psi \rangle &= \sum_{T_i} \sqrt{P(T_i') P(T_i)} \langle T_i' | \chi_{ij} | T_i \rangle \\ \langle \Psi | \chi_{ij} | \Psi \rangle &= \left(\sum_{T_i} \sqrt{P(T_i') P(T_i)} \right) t_{ij}^* / t \end{aligned} \quad [D.24]$$

Dans la limite des faibles dopages, les lacunes peuvent être supposées indépendantes si bien que $P(T_i')$ et $P(T_i)$ peuvent être pris égaux. On en déduit aisément que le terme entre parenthèses dans l'équation [D.24] est la probabilité, p_{01} , pour qu'il y ait une lacune sur le site i et qu'il n'y en ait pas sur le site j . D'après [D.11], la valeur moyenne d'un opérateur de saut dans une phase à flux est reliée à l'énergie cinétique sous champ. Dans

la limite des faibles dopages $p_{01} = x(1-x)$. D'après [D.24], [D.23] et [D.22], on obtient l'intégrale de saut effective pour les lacunes (qui est non nulle pour les faibles dopages) :

$$t_{ij}^* = e^{-i\varphi_{ij}} \frac{\xi_0}{2(1-x^2)} t \quad [D.25]$$

Pour chaque valeur du flux, il suffit de diagonaliser l'hamiltonien à une particule :

$$\begin{aligned} H^* &= E^* + \sum_{\langle ij \rangle} t^*_{ij} \chi_{ij} \\ &= E^* + \frac{\xi_0}{2(1-x^2)} t \sum_{\langle ij \rangle} e^{-i\varphi_{ij}} \chi_{ij} + e^{+i\varphi_{ij}} \chi_{ji} \end{aligned} \quad [D.26]$$

On reconnaît là un hamiltonien de particules indépendantes en présence d'un champ magnétique. Tout se passe donc comme si les lacunes voyaient le champ magnétique $+B$. On vérifie bien, aussi, que lorsque l'on effectue un changement de jauge, la fonction d'onde des lacunes change comme s'il s'agissait de particules de charge $+e$. Dans la limite des faibles dopages, l'énergie de l'état fondamental s'obtient en donnant aux lacunes la plus basse énergie du spectre d'Hofstadter pour le flux considéré. Soit $\mu_0(\varphi)$, le bord inférieur du spectre d'Hofstadter (porté sur la figure C.5). En posant : $K^*(\varphi) = \mu_0/4t$, l'énergie moyenne s'écrit pratiquement comme en [D.12] :

$$\langle H_{tJ} \rangle / L = -\frac{3}{4(1+x^2)} J \xi_0^2 - \frac{2}{1-x^2} |t| K^* \xi_0 \quad [D.27]$$

Notons que cette quantité est indépendante du choix de jauge. Sur la figure D.1, nous avons porté la fonction de $K^*(\varphi)$ ainsi que les valeurs de K estimées par Lederer & al. (triangles) et Teitel & Jayaprakash (carrés).

On vérifie bien que, comme on pouvait s'y attendre compte tenu de l'élargissement de l'espace variationnel, K^* est toujours supérieur à K . De plus, on note la présence de maxima locaux pour les valeurs rationnelles simples du flux. Ces maxima se retrouvent aussi sur la fonction $K(\varphi)$ (valeurs de Teitel & Jayaprakash). Les fonctions K et K^* présentent donc une certaine ressemblance.

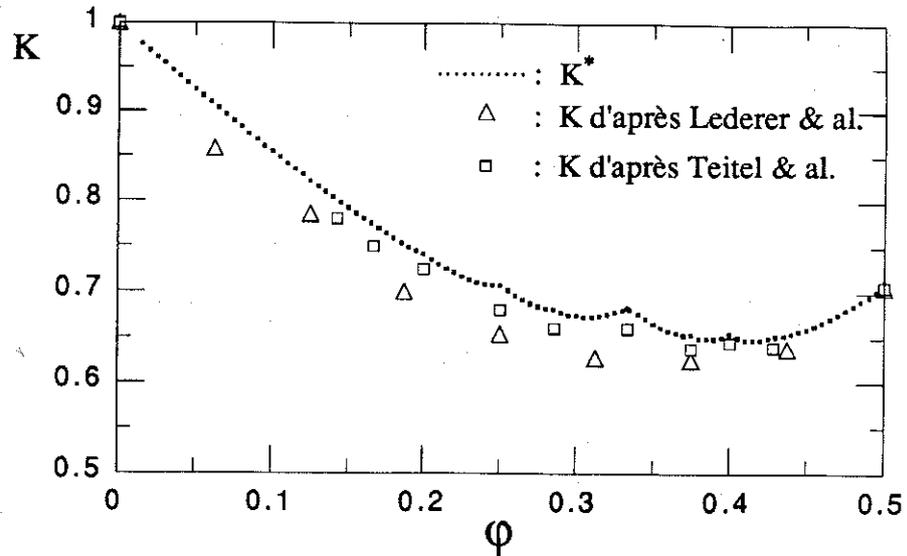


Figure D.1 : Les pointillés représentent la largeur totale du spectre d'hofstadter en unité de la largeur de bande pour le réseau carré sans flux. (les petits points sont les points qui ont été effectivement calculés). Les carrés et les triangles représentent la valeur moyenne de $\cos\phi_j$ maximisée par rapport au choix de jauge estimée dans des contextes différents par Teitel & Jayaprakash et Lederer, Poilblanc & Rice respectivement.

D.4 La stabilité des phases à flux

4.a Le composé non dopé

Lorsque la bande est demi-pleine, seule l'énergie magnétique ($\langle H_J \rangle$) intervient. Cette dernière ne dépend que de $\xi_0(\phi)$ (voir [D.11]) et favorise donc la phase d'Affleck et Marston. Il est intéressant de comparer les énergies obtenues à quelques énergies connues. Sur la figure D.2, nous avons porté, à titre de référence, l'énergie de l'état de Néel et celle du Fondamental de l'hamiltonien de Heisenberg quantique (d'après les meilleurs estimations / Trivedi & Ceperley 89 /). Nous avons porté les énergies de la phase sans flux ($\phi=0$) et de la phase d'Affleck & Marston ($\phi=1/2$) obtenues par la formule [D.12] d'une part et par les calculs de Liang et Trivedi d'autre part. Ces derniers sont allés au-delà de l'approximation de Gutzwiller en ayant recours à une méthode de Monte Carlo / Liang & Trivedi 90 /.

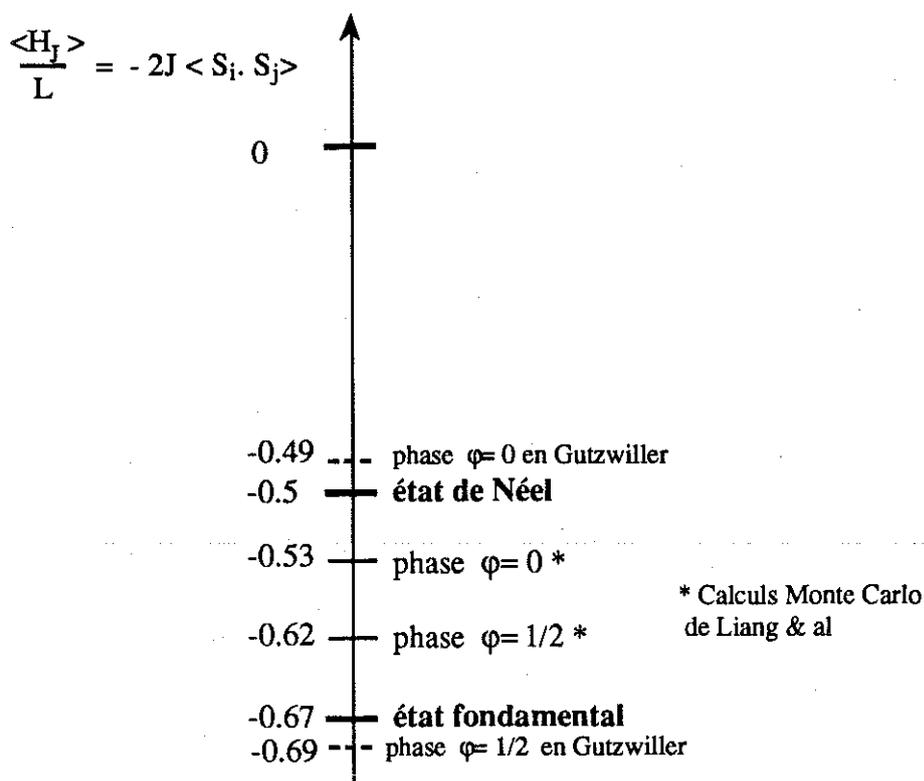


Figure D.2 : énergies magnétiques par site de différentes fonctions d'ondes.

L'enseignement principal de ce diagramme est la faible énergie que l'on peut obtenir en projetant simplement sur \mathcal{E}_0 des états de particules indépendantes. Par exemple, le projeté du simple déterminant de Slater d'ondes planes ($\varphi=0$) maximise plus les corrélations antiferromagnétiques que l'état de Néel (d'après Liang et Trivedi). L'optimisation du seul terme d'Ising est donc manifestement une mauvaise approche de l'état fondamental de l'hamiltonien de Heisenberg quantique. Dans le même ordre d'idée, il faut ajouter que Liang, Douçot et Anderson ont obtenu des états de type RVB (donc : sans ordre à longue distance) extrêmement proches du fondamental ($\langle H_J \rangle / L = 0.668J$) /Liang & al. 88 /.

Notons que les calculs de Liang et Trivedi confirment bien la stabilisation de la phase d'Affleck et Marston. D'une façon plus générale, un certain nombre de calculs numériques "sur cluster" suggèrent fortement que la stabilisation des phases à flux n'est pas un artéfact de l'approximation de Gutzwiller / Poilblanc & al. 90 ; Liang & Trivedi 90 /.

4.b Le composé dopé

Lorsque l'on introduit des lacunes, il faut ajouter à l'énergie magnétique, l'énergie cinétique des lacunes. A dopage fixé, le poids relatif de ces deux termes est donné par le rapport t/J . L'état fondamental de l'hamiltonien t - J dépend, a priori, de ce paramètre.

L'énergie magnétique ne dépend que de $\xi_0(\varphi)$ et favorise donc la phase à flux commensurable ($\varphi=v$). Cette dernière est donc stabilisée dans la limite où t/J tend vers zéro. L'énergie magnétique est portée sur la figure D.3 en fonction du remplissage pour la phase sans flux, la phase commensurable, et la phase d'Affleck et Marston.

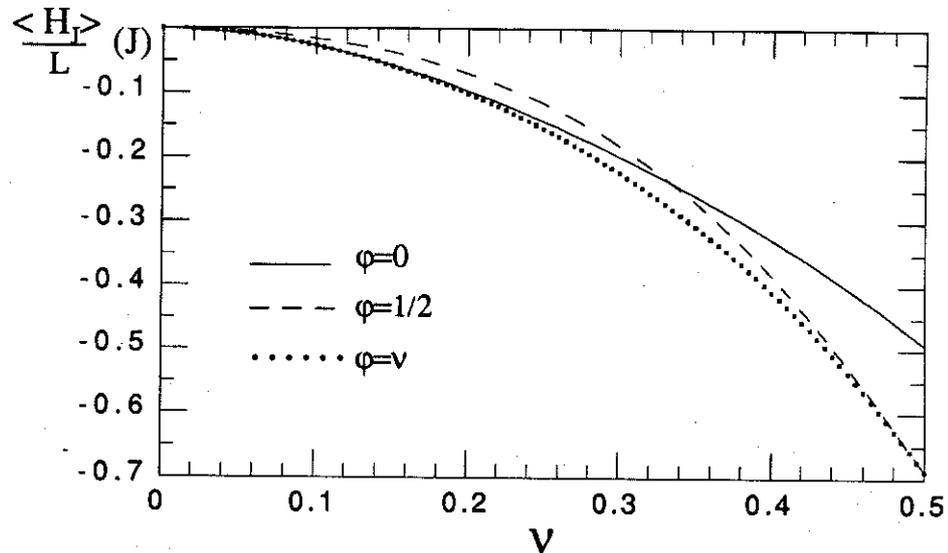


Figure D.3 : Energie magnétique par site, $\langle H_I \rangle / L$, en fonction du nombre d'électrons par spin, ν , pour les phases sans flux ($\varphi=0$), avec un demi-quantum de flux par site ($\varphi=1/2$), et un demi-quantum de flux par électron ($\varphi=\nu$).

Le terme cinétique, quant à lui, fait intervenir, en plus de l'énergie cinétique du gaz de particules indépendantes, ξ_0 , (qui favorise la phase commensurable), le facteur K^* calculé plus haut. La figure D.4 montre que le terme cinétique favorise la phase sans flux quelque soit le dopage. Cela provient de ce que la largeur du spectre d'Hofstadter est diminuée par la présence d'un flux (voir figure D.1). La phase sans flux est donc stabilisée dans la limite où t/J tend vers l'infini.

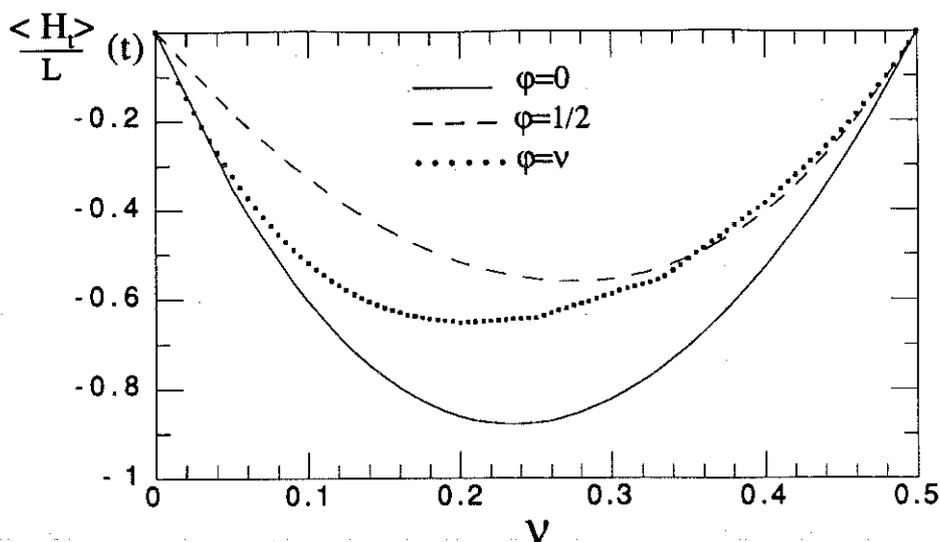


Figure D.4 : Energie cinétique par site, $\langle H_T \rangle / L$, en fonction du nombre d'électrons par spin, n , pour les phases sans flux ($\phi=0$), avec un demi quantum de flux par site ($\phi=1/2$), et un quantum de flux par particule ($\phi=\nu$).

Lederer, Poilblanc et Rice ont comparé l'énergie de la phase à flux commensurable ($\phi=\nu$) avec la phase sans flux ($\phi=0$) et la phase d'Affleck et Marston ($\phi=1/2$) pour quelques valeurs rationnelles simples du remplissage, ν . Ils ont trouvé que la phase $\phi=1/2$ est stabilisée à faible dopage et que la phase commensurable est stabilisée en dessous d'une valeur critique du paramètre t/J . La valeur critique qu'ils obtiennent s'avère faible quelque soit le remplissage envisagé ($t/J < 1$). Rappelons, en effet, que le modèle t - J ne décrit un gaz d'électrons fortement corrélé que dans la limite $t/J \gg 1$. Lederer et al. avaient néanmoins l'espoir que cette valeur pouvait être sensiblement augmentée par une meilleure estimation du facteur K .

De plus le calcul de K ne pouvant être fait que pour des valeurs rationnelles simples du flux, la stabilisation de la phase commensurable par rapport aux autres phases à flux ($\phi \neq 0$), pour des valeurs finies de t/J , restait un point d'interrogation. En particulier, au vu des maxima locaux observés plus haut sur la fonction $K(\phi)$, on pouvait s'attendre à l'existence de "plateaux" de stabilité pour des valeurs rationnelles simples de ϕ ($\phi=1/3, 2/5$ etc...). Cette possibilité avait déjà été suggérée / Anderson & al. 89 /.

Nous avons minimisé l'énergie par rapport à ϕ pour un grand nombre de valeurs du remplissage et du paramètre t/J . Le résultat est résumé sur le diagramme de la figure D.5 où nous avons porté les valeurs du flux stabilisées dans le plan $(\nu, t/J)$. Ce diagramme suggère une réponse négative aux spéculations évoquées plus haut. Il semble

qu'il n'y ait pas d'autre phase que les phases $\varphi=0$, $\varphi=v$ et $\varphi=1/2$ (les plateaux, s'ils existent, seraient moins larges que $\delta v=0.005$).

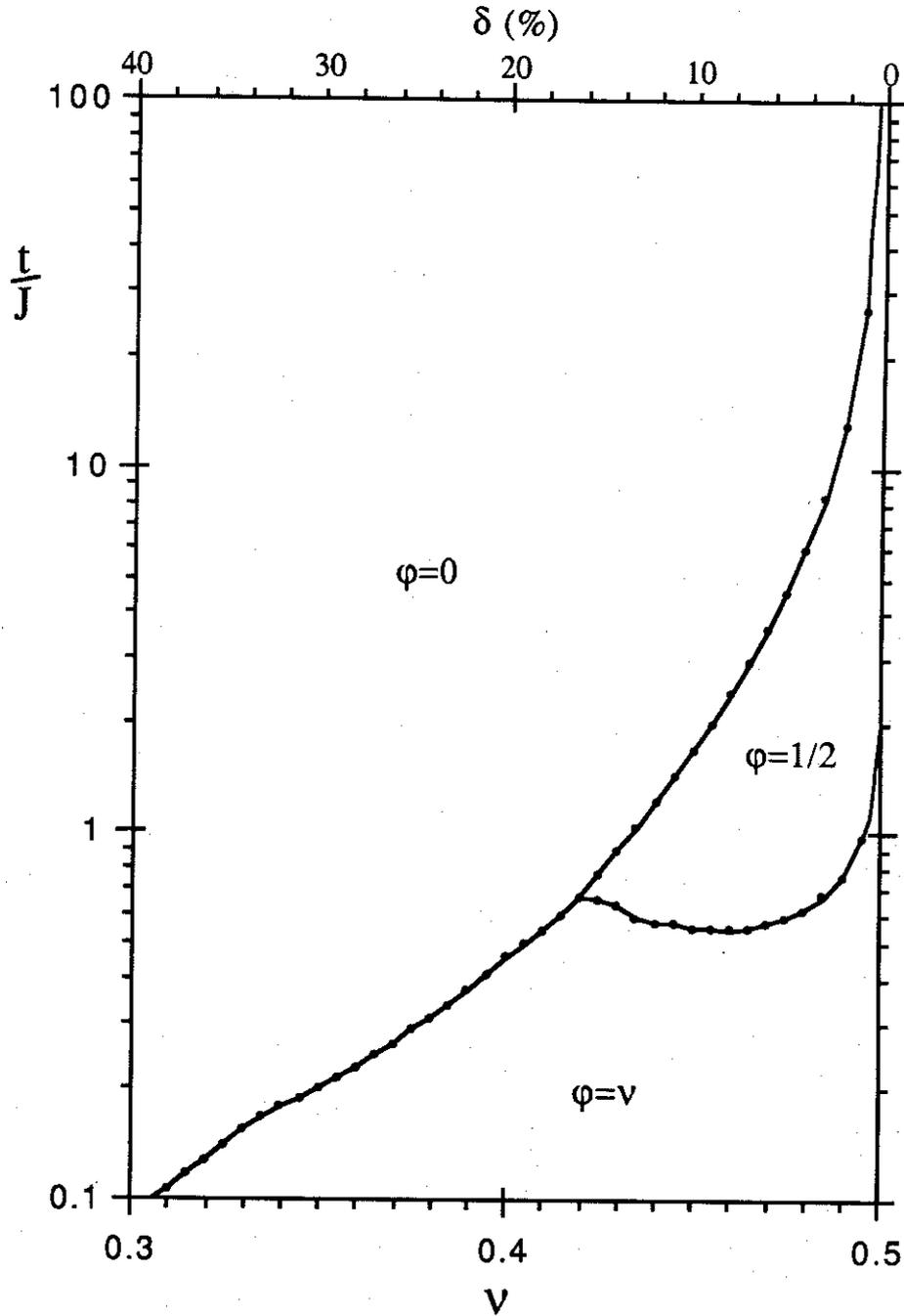


Figure D.5 : régions de stabilité relative des différentes phases à flux uniformes (φ quelconque) dans l'espace $(v, t/J)$. v est le remplissage de la bande par site et par spin. t est l'intégrale de saut et J est le couplage de Heisenberg. Les points correspondent aux valeurs calculées.

Par ailleurs, la limite de stabilité de la phase à flux commensurable reste faible malgré notre élargissement de l'espace variationnel. La valeur critique du paramètre t/J que l'on obtient, délimitant les phases $\varphi=0$ et $\varphi=v$, est en accord quantitatif avec celle obtenue par Rodriguez et Douçot. Ces derniers ont déterminé cette limite pour quelques valeurs simples du remplissage ($v=p/q$, $q < 8$) grâce à une méthode de bosons esclaves généralisant l'approche d'Affleck et Marston / Rodriguez & Douçot 90 /. Le calcul par une méthode de Monte Carlo réalisé par Liang et Trivedi donne des valeurs à peine supérieures pour cette limite : $t/J=0.2$ pour $v=0.333$ et $t/J=5$ pour $v=0.458$ / Liang & Trivedi 90 /.

Si la phase commensurable de Lederer, Poilblanc et Rice semble mal placée comme fondamentale de l'hamiltonien de Hubbard fortement corrélé, il n'en est pas de même de la phase d'Affleck et Marston. Cette dernière a une énergie plus faible que la phase sans flux pour des valeurs réalistes du paramètre t/J à condition de considérer de faibles dopages. La valeur critique de t/J correspondante est inversement proportionnelle au dopage au voisinage de la bande demi-pleine.

Si l'on fixe le dopage et que l'on fait varier le paramètre t/J , l'"état fondamental" que l'on obtient est inchangé sauf aux limites entre deux des trois phases possibles où l'on a une transition du premier ordre. Ce résultat est probablement dû au fait que notre espace variationnel ne comprend que des phases à flux uniformes. D'après des calculs en champ moyen sur cluster de Poilblanc / Poilblanc 90 /, il semble, en effet, que cette transition brutale doive être remplacée par une évolution continue entre les phases $\varphi=v$ (pour $t/J = 0$) et $\varphi=0$ (pour $t/J \rightarrow \infty$) lorsque l'on généralise l'espace variationnel à toutes les phases à flux.

Signalons, en outre, que les phases à flux alternées sont moins défavorisées par l'énergie cinétique des lacunes et peuvent être stabilisées pour des valeurs réalistes du rapport t/J / Zhang 90 /. En ce qui concerne les phases à flux commensurables, il semble qu'une répulsion entre les lacunes pourrait augmenter leur stabilité / Poilblanc & al. 90 /.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, afin de rechercher quelles sont les propriétés d'un gaz d'électrons fortement corrélés à basse température, nous nous sommes intéressés à l'état fondamental de l'Hamiltonien t-J. Nous nous sommes focalisés sur une forme particulière de fonction d'onde variationnelle, les phases à flux, obtenue en appliquant un champ magnétique fictif à l'échantillon.

Dans un premier temps, nous avons étudié l'effet d'un champ magnétique sur l'énergie cinétique du gaz d'électrons indépendants.

Nous avons déterminé la variation de cette énergie en fonction du flux pour des électrons sur un réseau carré. En fait, cette dépendance est périodique, un nombre entier de quanta de flux par carré élémentaire étant équivalent à l'absence de flux. Nous avons vérifié la présence d'un minimum anguleux pour un $N^{\text{ième}}$ de quantum de flux par particule sans spin (N entier). Le minimum absolu d'énergie est atteint pour un quantum de flux par particule (conjecture de Wiegmann) et non pas pour le flux nul. Nous avons vu que cette variation présente des points anguleux pour toute valeur rationnelle du nombre de quanta de flux par plaquette ($\phi=p/q$) dont l'angle est proportionnel à la largeur du gap où se trouve le niveau de Fermi en présence du flux ($\alpha=NG$). Cependant, l'énergie minimisée par rapport au flux ($E(\phi=v)$) varie très régulièrement avec le remplissage de la bande, l'abaissement d'énergie par rapport à l'énergie en l'absence de flux étant maximum lorsque la bande est demi-pleine.

Nous avons également examiné le cas d'un réseau tétragonal simple, le champ magnétique étant orienté selon l'axe c (les oxydes supraconducteurs ont une symétrie tétragonale). Nous avons vu que les minima anguleux observés à deux dimensions persistent pour des valeurs non nulles du couplage interplan (t_z). Le minimum absolu de l'énergie pour un quantum de flux par particule ($\phi=v$), lorsque la bande est demi-pleine ($v=1/2$), disparaît pour une intégrale de saut, t_z , selon l'axe c égale à environ la moitié de l'intégrale de saut, t , dans le plan (a,b) . Par contre, bien que le système devienne diamagnétique dans la limite où t_z est très supérieur à t , en général, l'énergie cinétique est minimum pour des valeurs non nulles du flux. Par exemple, dans le réseau cubique ($t_z=t$), l'énergie est maximum lorsque le flux est nul. Ce résultat est contraire à l'hypothèse fondamentale du diamagnétisme de Landau selon laquelle l'énergie cinétique du gaz électronique est augmentée par l'application d'un champ magnétique. En général,

le remplissage de la bande qui donne lieu au plus fort abaissement d'énergie (quelque soit le flux) n'est pas la bande demi-pleine (comme pour le réseau carré), mais cet abaissement maximum correspond toujours à un demi-quantum de flux par carré élémentaire du plan (a,b).

Dans un second temps, nous avons investigué le fondamental de l'hamiltonien t - J à l'aide de phases à flux.

Pour ce faire, nous avons ramené le problème, moyennant des approximations de type champ moyen justifiées dans la limite des faibles dopages, à celui d'un gaz de bosons de coeur dur (les lacunes) en présence d'un champ magnétique fictif (ϕ). Cela nous a permis de déterminer un diagramme de phase dans le plan ($v, t/J$) mettant en évidence les domaines de stabilité relative des différentes phases à flux uniformes. Malgré notre élargissement de l'espace variationnel, le domaine de stabilité de la phase commensurable (un quantum de flux par particule : $\phi=v$) reste limité à des valeurs peu réalistes du paramètre d'interaction coulombienne, t/J ($t/J < 1$). Par contre, la phase à flux correspondant à un demi-quantum de flux par carré élémentaire ($\phi=1/2$) est stabilisée pour des valeurs réalistes de ce paramètre dans le composé faiblement dopé. En outre, il semble que les phases $\phi=0$, $\phi=1/2$ et $\phi=v$, soient les seules qui stabilisent le système (quelque soit le remplissage et le paramètre d'interaction).

Bien entendu, il ne s'agit là, que de la stabilisation du système par rapport à la fonction d'onde de Gutzwiller traditionnelle (déterminant de Slater d'ondes planes projeté sur l'espace des configurations sans double occupation de site). Des calculs numériques indiquent que les phases à flux les plus stables ne sont pas uniformes dans le composé dopé. En outre, Il serait intéressant de comparer l'énergie des phases à flux avec celle d'autres fonctions d'onde variationnelles (état R.V.B., état antiferromagnétique etc...).

REFERENCES

- Affleck I. & Marston J.B. Phys. Rev. B 37 P.3774 (88)
- Anderson P.W. Phys. Rev. 115 P.2 (59)
- Anderson P.W. Science 235 P.1196 (87)
- Anderson P.W.,
Shastry B.S. & Hristopoulos D. Phys. Rev. B 40 P.8939 (89)
- Barford W. & Kim J.H. A paraître (soumis à Phys. Rev. B)
- Bastide C. & Lacroix C. Solid State Comm. 70 P.93 (89)
- Birgeneau R.J.,
Gabbe D.R., Jennsen H.P., Kastner M.A., Picone J., Thurston T.R.,
Shirane G., Endoh Y., Sato M., Yamada K, Hidaka Y., Oda M., Enomoto
Y., Suzuki M. & Marakami T. Phys. Rev. B 38 P.6614 (88)
- Brinkman W.F. & Rice T.M. Phys. Rev. B 2 P.1324 (70)
- Chao K.A.,
Spalek J. & Oleś A.M. J. Phys. C 10 P.L271 (77)
- Czycholl R. & Ponischowski W. Z. Phys. B 73 P.343 (88)
- Douçot B. & Wen X.G. Phys. Rev. B 40 P.2719 (89)
- Halperin B.I.,
March-Russell J. & Wilczek F. Phys. Rev. B 40 P.8726 (89)
- Hasegawa Y. A paraître (soumis à J. Phys. Soc. Japan)
- Hasegawa Y.,
Hatsugai Y., Kohmoto M. & Montambaux G. Phys. Rev. B 41 P.9174 (90)

Hasegawa Y., Lederer P., Rice T.M., Wiegmann P.B.	Phys. Rev. Lett.	<u>63</u>	P.907	(89)
Hasley T.C.	Phys. Rev. B	<u>31</u>	P.5728	(85)
Haydock R., Heine V. & Kelly M.J.	J. Phys. C	<u>5</u>	P.2845	(72)
Hirsch J.E. & Tang S.	Phys. Rev. Lett.	<u>62</u>	P.591	(89)
Hofstadter D.R.	Phys. Rev. B	<u>14</u>	P.2239	(76)
Kivelson S.A., Rohsar D.S., Sethna J.P. & Shore J.D.	Phys. Rev. B	<u>40</u>	P.7343	(89)
Kohn W.	Phys. Rev.	<u>115</u>	P.1460	(59)
Khveshchenko D.V. & Kogan Y.I.	Int. J. Mod. Phys. B.	<u>4</u>	P.631	(90)
Landau L.D. & Lifshitz E.M.	Quantum mechanics (Pergamon, New York 1958)			
Langbein D.	Phys. Rev.	<u>180</u>	P.633	(69)
Lederer P., Poilblanc D., Rice T.M.	Phys. Rev. Lett.	<u>63</u>	P.1519	(89)
Liang S., Douçot B. & Anderson P.W.	Phys. Rev. Lett.	<u>61</u>	P.365	(88)
Liang S. & Trivedi N.	Phys. Rev. Lett.	<u>64</u>	P.232	(90)
MacDonald A.H.	Phys. Rev. B	<u>28</u>	P.6715	(83)
Mayou D.	Thèse Université Joseph Fourier			(87)
Montambaux G.	Phys. Rev. Lett.	<u>63</u>	P.1657	(89)
Nagaoka Y.	Phys. Rev.	<u>147</u>	P.392	(66)

Peter D., Cyrot M., Mayou D. & Khanna S.N.	Phys. Rev. B	<u>40</u>	P.9382	(89)
Peter D., Mayou D. & Cyrot M.	Phys. Rev. Lett.	<u>65</u>	P.386	(90)
Poilblanc D.	Phys. Rev. B	<u>40</u>	P.7376	(89)
Poilblanc D.	Phys. Rev. B	<u>41</u>	P.4827	(90)
Poilblanc D., Hasegawa Y. & Rice T.M.	Phys. Rev. B	<u>41</u>	P.1949	(90)
Rammal R. & Bellissard J.	A paraître (soumis à Phys. Rev. Lett.)			
Rodriguez J.P. & Douçot B.	Europhys. Lett.	<u>11</u>	P.451	(90)
Schellhuber H.J. & Obermair G.M.	Phys. Rev. Lett.	<u>45</u>	P.276	(80)
Streda P.	J. Phys. C	<u>15</u>	P.L717	(82)
Teitel S. & Jayaprakash C.	Phys. Rev. Lett.	<u>51</u>	P.1999	(83)
Trivedi N. & Ceperley D.M.	Phys. Rev. B	<u>40</u>	P.2737	(89)
Wannier G.H.	Phys. Stat. Sol. (b)	<u>88</u>	P.757	(83)
Wannier G.H., Obermair G.M. & Ray R.	Phys. Stat. Sol. (b)	<u>93</u>	P.337	(79)
Wiegmann P.B.	Phys. Rev. Lett.	<u>60</u>	P.821	(88)
Yokoyama H. & Shiba H.	J. Phys. Soc. Japan	<u>56</u>	P.3570	(87)
Zaanen J. & Oleś A.M.	Phys. Rev. B	<u>37</u>	P.9423	(88)
Zhang F.C.	Phys. Rev. Lett.	<u>64</u>	P.974	(90)

CONCLUSION GENERALE



CONCLUSION GENERALE

En premier lieu, nous avons généralisé la méthode de Gutzwiller de façon à pouvoir traiter un état inhomogène très général et un hamiltonien de Hubbard étendu quelconque. Nous avons, ensuite, grâce à cette méthode, étudié l'antiferromagnétisme de l'oxyde supraconducteur, $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Dans un premier temps, nous avons adopté une approche de magnétisme itinérant qui nous a permis de discuter, outre les propriétés antiferromagnétiques du composé, les valeurs des paramètres du modèle à deux bandes, et les limites de l'approche de Gutzwiller. Dans un second temps, nous nous sommes intéressés au problème des phases à flux. Après une étude de l'effet orbital d'un champ magnétique sur un gaz d'électrons indépendants, nous avons abordé le problème de la stabilité des différentes phases à flux uniformes dans le modèle t-J.

Il s'est avéré, que l'application de la méthode de Gutzwiller au modèle à deux bandes ne permet de traiter correctement que le cas où la liaison est plutôt covalente ($\Delta\varepsilon < 2t_0$), l'étude du modèle à une bande permettant de rendre compte de la limite ionique. L'étude de l'ordre antiferromagnétique dans le composé non dopé (La_2CuO_4) a permis de conclure à une ionicité minimum ($\Delta\varepsilon > t_0$) et à une répulsion coulombienne minimum sur le cuivre ($U_d > W^*/4$). Par contre, une ionicité ($\Delta\varepsilon/t_0$) plus élevée semble requise afin d'expliquer le caractère isolant du composé non dopé au-dessus de sa température de Néel.

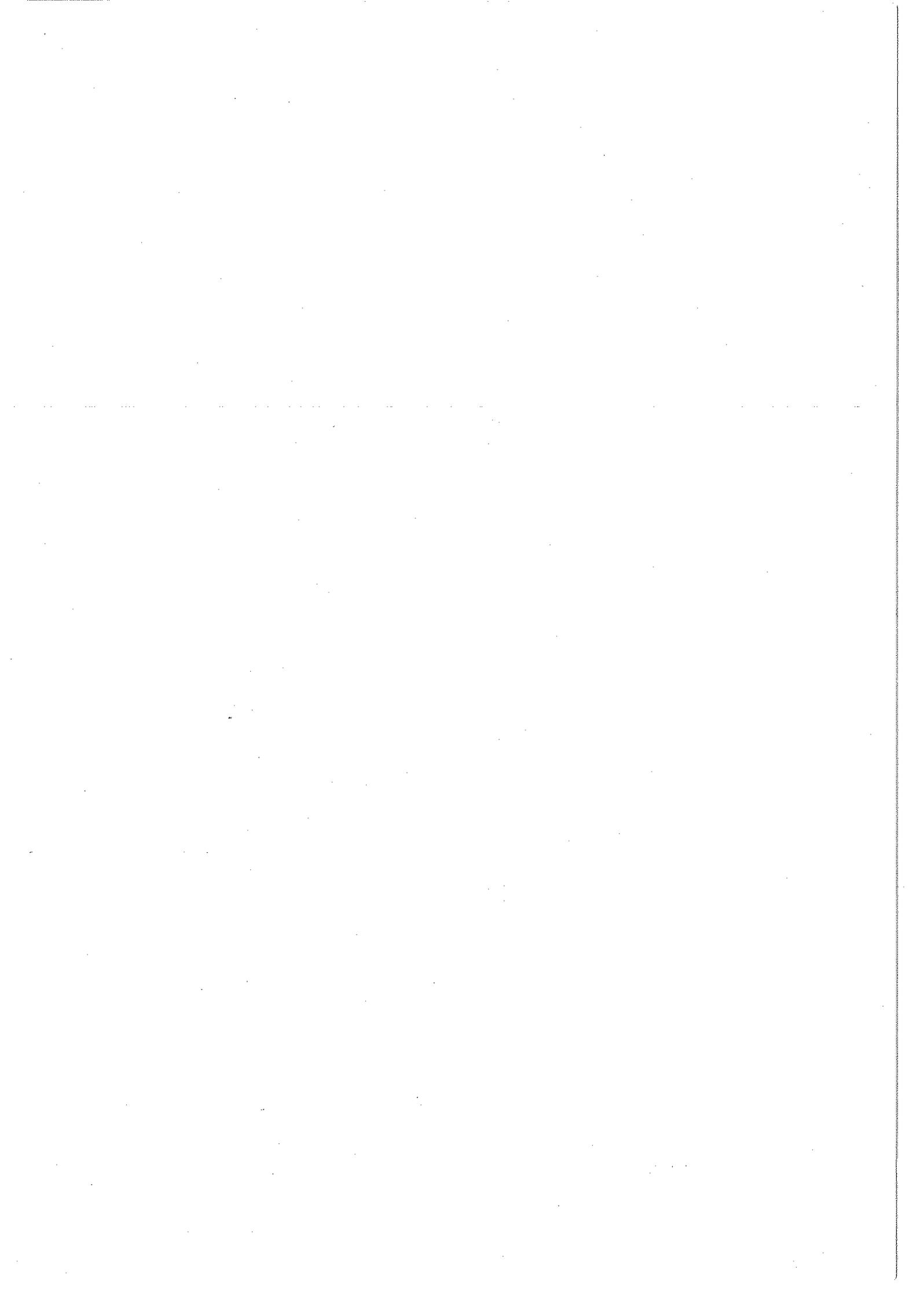
Pour des valeurs de l'ionicité et de la répulsion coulombienne compatibles avec les propriétés du composé non dopé, la répulsion coulombienne sur le cuivre étant de l'ordre de grandeur la largeur de la bande antiliante, nous avons trouvé, pour des valeurs élevées du dopage ($x \approx 20\%$), un état présentant un ordre antiferromagnétique et ayant une énergie plus faible que celle de l'état paramagnétique simple. Ce résultat suggère fortement la présence de corrélations antiferromagnétiques à courtes distance dans la phase supraconductrice de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Notre approche est confortée en ce qu'elle redonne le transfert de charge du cuivre vers l'oxygène qui est observé expérimentalement avec le dopage en trous. En outre, l'état ordonné antiferromagnétiquement présente un instabilité par rapport à la séparation de phases.

Puis, nous nous sommes intéressés au gaz d'électrons indépendants dans un champ magnétique à deux et à trois dimensions. En particulier, nous avons examiné la

variation de l'énergie cinétique des électrons sur un réseau carré ce qui nous a permis de vérifier la conjecture de Wiegmann selon laquelle l'énergie présente un minimum absolu pour un quantum de flux par particule sans spin ($\phi_{\min}=\nu$). Nous avons également examiné l'effet d'un couplage interplan sur cette énergie. Nous avons montré que la conjecture de Wiegmann reste valable pour de faibles couplages interplans. Pour des couplages interplans de l'ordre de l'intégrale de saut dans un plan, nous avons trouvé que, bien que l'énergie n'est plus minimum pour un champ correspondant à un quantum de flux par particule sans spin, elle reste généralement minimum pour un flux non nul (contrairement à ce que suppose la théorie du diamagnétisme de Landau, justifiée pour des particules libres).

Enfin, nous avons examiné la stabilité des phases à flux dans le modèle t-J. Par une approche variationnelle originale, nous avons ramené le problème à celui d'un gaz de particules de charge positive (les lacunes) dans un champ magnétique (fictif). Par cette approche, nous avons pu déterminer, en fonction du dopage et du paramètre de "répulsion coulombienne", t/J , les zones de stabilité relative des différentes phases à flux uniformes (ϕ quelconque). Quelques soient les valeurs des paramètres du modèle t-J, il semble qu'il n'y ait que trois phases possibles : la phase sans flux ($\phi=0$), la phase d'Affleck et Marston ($\phi=1/2$) et la phase commensurable ($\phi=\nu$). La stabilité de cette dernière reste néanmoins limitée à de faibles valeurs du rapport t/J ($t/J < 1$) tandis que la phase d'Affleck et Marston est limitée à de faibles dopages ($x < 10\%$ pour $t/J > 2$).

Il semble fort que les solutions "simples" que nous avons envisagées (ordre antiferromagnétique à longue distance, phases à flux uniformes) soient encore loin de présenter tous les caractères de l'état fondamental du gaz d'électrons dans le composé dopé. Il semble que la répartition spatiale des électrons et la structure magnétique qui en découle soit plus complexe. La méthode de Gutzwiller, telle que nous l'avons généralisée, permet, en principe, d'étudier de telles structures. En particulier, cela permettrait de vérifier la crédibilité dans le cas de systèmes fortement corrélés (oxydes supraconducteurs) d'un certain nombre de solutions qui n'ont été testées que par l'approche de Hartree-Fock (solitons, spin-bags...). Nous avons vu, en outre, que notre approche se prête à des améliorations de la méthode de Gutzwiller elle-même. La possibilité d'étudier de plus fortes répulsions permettrait de répondre à de très nombreuses questions qui restent en suspens.



- Calcul de courbes nulles
- gros travail numérique
- Champ magnétique
- méthode des or d'ordre du réseau alterné

limite unique à cyl - modèle à une bande
covalente deux

- rédaction de la thèse
- la rapatrié à la dernière minute beaucoup de chose

RESUME

Le principal centre d'intérêt de cette thèse est l'antiferromagnétisme dans les oxydes supraconducteurs. Nous étudions le modèle de Hubbard du réseau carré, le modèle à deux bandes du plan CuO_2 et le modèle t-J dans une large gamme des valeurs de leurs paramètres. Pour ce faire, nous adoptons la méthode de Gutzwiller dont nous avons généralisé le domaine d'application.

Nous retrouvons la bonne valeur du moment alterné moyen sur les sites de cuivre dans le composé La_2CuO_4 , le caractère isolant de ce composé au-dessus de sa température de Néel et le fort transfert de charge du cuivre vers l'oxygène observé lors du dopage en trous. Pour cela, il est toutefois nécessaire que la répulsion coulombienne sur les sites de cuivre soit supérieure à l'énergie de transfert de charge cuivre-oxygène et que cette dernière soit supérieure à la largeur de la bande antiliante (résultant de l'hybridation cuivre-oxygène). Pour une répulsion coulombienne de l'ordre de grandeur de la largeur de la bande antiliante, nous prévoyons d'importantes corrélations antiferromagnétiques dans la phase supraconductrice du composé.

Nous incluons une étude de l'effet orbital d'un champ magnétique sur des électrons indépendants dans un réseau carré et dans un réseau tétragonal. Il apparaît que, même pour des particules à trois dimensions, la présence d'un potentiel cristallin remet en cause l'hypothèse fondamentale du diamagnétisme de Landau selon laquelle l'énergie cinétique d'un gaz d'électrons est toujours augmentée par la présence d'un champ magnétique. Nous appliquons les résultats de cette étude au problème des électrons fortement corrélés. Nous en déduisons un diagramme de phase mettant en évidence les zones de stabilité relative des différentes phases à flux uniformes en fonction des paramètres du modèle t-J. La phase à flux commensurable n'est stabilisée que pour de faibles valeurs du paramètre de "répulsion", t/J . En outre, un couplage non nul suffisamment faible entre les plans CuO_2 ne remet pas en cause la stabilité de cette phase.

MOTS-CLEFS :

Antiferromagnétisme

Oxyde supraconducteur

Diamagnétisme de Landau

Corrélations électroniques

Modèle de Hubbard

Méthode de Gutzwiller



