

Brève revue sur la supraconductivité et certaines approches théoriques l'expliquant

OLIVIER SIMARD*

Université de Sherbrooke
olivier.simard2@usherbrooke.ca

10 août 2016

Résumé

La supraconductivité peut être approchée de plusieurs manières. L'une d'entre elles est la théorie du champ moyen dans un modèle d'électrons fortement corrélés. Essentiellement, le champ moyen majore les amplitudes de certains paramètres caractérisant les interactions que ressentent les électrons pour chacun des sites (régions) sur lesquels les électrons existent dans une structure cristalline (matériau). Une brève introduction à la matière est faite et il sera question de ce que cette manière peut apporter à la description d'un système supraconducteur mélangé à de l'antiferromagnétisme.

I. INTRODUCTION

LA Science est historiquement liée à la philosophie. Une science constitue un champ d'étude enveloppé et s'articulant au travers de principes rationnels visant à décrire un objet concerné dans sa perfection, de la manière la plus adéquate et vraie possible. En effet, la Science se fonde sur certains axiomes et s'avère être un système axiomatique. Les théories scientifiques idéalisent les objets concernés alors que l'expérience vérifie si elles adhèrent à la réalité soit en la corroborant ou en la réfutant. Ainsi, on expose la Nature et les attributs des objets la constituant pour éventuellement achever un ensemble complet et cohérent. Est-ce que tout cela est motivé par l'angoisse associée à l'ignorance...je m'aviserai de ne pas trop déborder du cadre du sujet ☺.

De ces objets ressort l'électron, particule élémentaire, dont les propriétés sont mises aux bénéfices des technologies modernes numériques. À ces mêmes électrons est attribuable le phénomène exotique de la supraconductivité. Heike Kamerlingh Onnes, physicien néerlandais, découvrit ce phénomène en 1911 en mesurant la résistance électrique du mercure à 1.5K. Ce même physicien fut le premier à liquéfier l'hélium He^4 en 1908. En 1911, la même année de

la découverte de la supraconductivité, Ernest Rutherford interpréta l'expérience de Geiger et Marsden réalisée en 1909 et effectuée sur une mince feuille d'or bombardée de particules α . Il émit l'hypothèse que la structure atomique s'apparente à celle planétaire : les électrons *graviteraient* autour d'un noyau de charge positive occupant un volume d'espace très petit relativement aux électrons. En mettant les choses en perspective, on réalise qu'à cette époque les atomes et électrons étaient mystérieux.

Le domaine d'étude de la physique qu'est la supraconductivité s'est rapidement développé. En 1933, Meissner et Ochsenfeld découvrirent que les matériaux supraconducteurs expulsent le champ magnétique. Il s'agit de l'effet Meissner. En 1950, une théorie phénoménologique fut développée par Ginzburg-Landau afin d'expliquer les propriétés macroscopiques des supraconducteurs. Toutefois, il fallut attendre l'élaboration de la théorie BCS en 1957[3] afin d'avoir une explication du phénomène d'un point de vue microscopique. Dans cette théorie, les auteurs sont parvenus à concevoir un hamiltonien exploitant la théorie du champ moyen décrivant le comportement des paires de Cooper à l'origine de la supraconductivité¹. Toutefois, le domaine d'application de cette théorie se limite aux supraconducteurs ayant

*Étudiant au baccalauréat de physique.

1. Cet hamiltonien sera présenté et expliqué plus loin

une faible température critique, soit la température sous laquelle la supraconductivité apparaît dans les matériaux.

Il sera question de déconstruire et expliquer le hamiltonien en champ moyen, ainsi que ses paramètres, permettant d'avoir accès aux énergies des configurations possibles d'un système physique supraconducteur antiferromagnétique. Un hamiltonien peut également apporter de l'information d'autre nature sur le système, à savoir celle sur la densité (quantité d'électrons par unité de surface en 2D) d'électron existant dans un état particulier, celle sur la variété d'état d'électron affectée et excitée lorsqu'une certaine énergie est injectée dans le système, etc.

II. HAMILTONIEN DU SYSTÈME PHYSIQUE

Le hamiltonien d'un système est un opérateur mathématique permettant de décrire son évolution dans le temps et l'espace réel. Les valeurs propres du hamiltonien consiste en les énergies propres du système, c'est-à-dire les énergies de configurations possibles du système. Il sera question ici d'un hamiltonien décrivant le comportement supraconducteur des électrons appariés en paires de Cooper ainsi que du comportement antiferromagnétique des spins des électrons dans les cuprates. Le spin d'un électron correspond au moment magnétique intrinsèque découlant naturellement de l'équation de Dirac. Afin de bien définir un hamiltonien, il faut aussi définir l'environnement des électrons, soit le réseau cristallin dans lequel ils existent. Ce réseau cristallin est bidimensionnel et carré puisque l'on s'intéresse aux électrons dans le plan cuivre-oxygène CuO_2 des cuprates². En effet, ce plan est bon conducteur dans les cuprates. La figure 1 illustre le réseau cristallin complet des cuprates.

2. Voir figure 2

Figure 1 – Réseau cristallin des cuprates

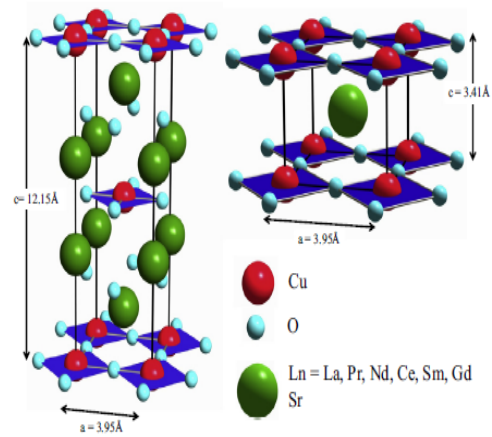
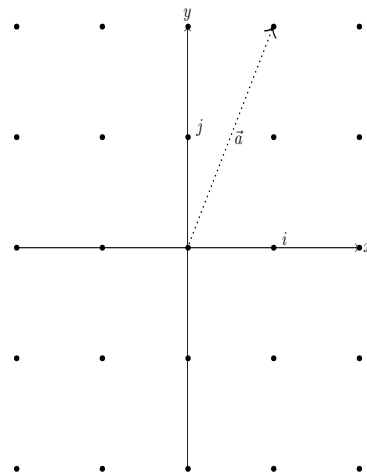


Fig.1. (a) Structure cristalline du $\text{Ln}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. (b) Structure cristalline du SrCuO_2 . Les plans CuO_2 sont décrits par les séries de losange ayant au centre un atome de cuivre (rouge) et en périphérie des atomes d'oxygène (bleu cyan).[2]

De plus, le réseau périodique est soumis à une contrainte associée à l'antiferromagnétisme : deux spins d'électrons adjacents sont énergétiquement défavorisés d'être \uparrow ou \downarrow tous deux.

Figure 2 – Réseau cristallin périodique carré



Les indices i et j de la figure 2 repèrent les sites sur lesquels les électrons sont confinés³ dans le réseau périodique. Le hamiltonien que l'on étudiera est décomposé en plusieurs termes.

i. Terme de saut

Le terme de saut \mathcal{H}_c du hamiltonien représentant l'énergie cinétique du système électronique peut s'écrire ainsi en seconde quantification :

$$\mathcal{H}_c = - \sum_{\vec{r}, \vec{a}, \sigma} t_{\vec{a}, \sigma} c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma} \quad (1)$$

L'opérateur d'échelle $c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma}^\dagger$ crée un électron à la position $\vec{r} + \vec{a}$ sur le réseau périodique illustré à la figure 2 alors que l'opérateur de destruction $c_{\vec{r}, \sigma}$ en détruit un en la position \vec{r} , avec le spin de l'électron $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$. L'action de l'ensemble $c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma}$ est donc de détruire un électron afin de le repositionner dans le réseau. Le préfacteur $t_{\vec{a}, \sigma}$ est un élément matriciel représentant l'énergie qu'il faut fournir afin que cette action se produise. Puisque les électrons sont des fermions, la fonction d'onde du système complet s'antisymétrise⁴ lorsqu'il y a un nombre de transposition impaire effectuée parmi les électrons constituant le système. Il faut définitivement que les opérateurs de création et de destruction obéissent certaines relations d'anticommuation :

$$\begin{aligned} \{c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma'}^\dagger, c_{\vec{r}, \sigma}\} &= c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma} + \\ c_{\vec{r}, \sigma} c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma'}^\dagger &= \delta_{\vec{r}+\vec{a}, \vec{r}} \delta_{\sigma, \sigma'} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \{c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma'}, c_{\vec{r}, \sigma}\} &= c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma'} c_{\vec{r}, \sigma} + \\ c_{\vec{r}, \sigma} c_{\vec{r}+\vec{a}, \sigma'} &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Or, étant donné que l'électron détruit par

3. Les électrons sont considérés confinés puisque les calculs sont faits dans le cadre d'un modèle d'électrons fortement corrélés : théorie des liaisons fortes (tight-binding theory).

4. Un signe (-) apparaît devant la fonction d'onde. Elle change donc de signe.

eq.1 est repositionné ailleurs sur le réseau, le delta de Kronecker $\delta_{\vec{r}'+\vec{a}, \vec{r}}$ de eq.2 donne une valeur nulle, car $\vec{r}' + \vec{a} \neq \vec{r}$ avec $\vec{a} \neq \vec{0}$. La relation d'anticommuation eq.2 devient alors :

$$\begin{aligned} \{c_{\vec{r}'+\vec{a}, \sigma'}^\dagger, c_{\vec{r}, \sigma}\} &= c_{\vec{r}'+\vec{a}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma} + \\ c_{\vec{r}, \sigma} c_{\vec{r}'+\vec{a}, \sigma'}^\dagger &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

$$\Rightarrow c_{\vec{r}'+\vec{a}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{r}, \sigma} = -c_{\vec{r}, \sigma} c_{\vec{r}'+\vec{a}, \sigma'}^\dagger \quad (5)$$

Le signe négatif apparaissant en eq.5 assure que les opérateurs d'échelle $c_{\vec{r}, \sigma}$ et $c_{\vec{r}'+\vec{a}, \sigma'}^\dagger$ antisymétrisent la fonction d'onde totale du système fermionique, décrit uniquement par eq.1 pour l'instant, lorsqu'il y a transposition d'électrons. En effectuant une transformée de Fourier sur le hamiltonien \mathcal{H}_c , on se trouve à le diagonaliser puisqu'on obtient les énergies propres du système $\epsilon(\vec{k})$ (relation de dispersion des électrons dans le système). Mais d'abord, la transformée de Fourier de l'opérateur de création $c_{\vec{r}, \sigma}^\dagger$ est :

$$c_{\vec{r}, \sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \quad (6)$$

La transformée de Fourier de l'opérateur d'annihilation $c_{\vec{r}, \sigma}$ est l'équivalent de eq.6, mais avec $c_{\vec{r}, \sigma}^\dagger \rightarrow c_{\vec{r}, \sigma}$ et $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \rightarrow e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. On trouve alors, en utilisant eq.6 :

$$\mathcal{H}_c = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) n_{\vec{k}, \sigma} \quad (7)$$

\vec{k} est le nombre d'onde de l'électron. $n_{\vec{k}, \sigma} = c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma}$ est l'opérateur dénombrant le nombre d'électron ayant un vecteur d'onde \vec{k} et un spin σ lorsqu'appliqué sur la fonction d'onde de cet état. Les états des électrons paramétrisés par \vec{k} et σ ne peuvent être que non occupés (0 électron dans l'état $\{\vec{k}, \sigma\}$) ou occupés par un seul électron (1 électron dans l'état $\{\vec{k}, \sigma\}$). Cela est issu du principe d'exclusion de Pauli. La relation de dispersion, indépendante du spin dans

ce cas, associe une énergie aux électrons dans l'état \vec{k} . Ainsi, l'équation 7 additionne toutes les énergies de tous les états d'électrons libres du système. La relation de dispersion $\epsilon(\vec{k})$ obtenue en faisant la transformée de Fourier dans l'espace décrit par la figure 2 est fonction des vecteurs d'onde k_x, k_y ainsi que des termes de saut $t_{\vec{a}',\sigma}$, où \vec{a}' existent dans l'espace des vecteurs d'onde. Il est à noter que les relations d'anticommutation définissant les opérateurs d'échelle des électrons en eq.2 et en eq.3 sont préservées dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{k} d'après le théorème de Plancherel-Parseval.

ii. Terme d'antiferromagnétisme

Qu'arrive-t-il si l'on insère maintenant l'antiferromagnétisme dans le système? L'antiferromagnétisme se caractérise par le fait que les spins des électrons sont favorisés énergétiquement à adopter une configuration où les spins des électrons adjacents sont mutuellement antiparallèles. Il faut ajouter un terme au hamiltonien \mathcal{H}_c . Ce terme additionnel \mathcal{H}_{AF} s'exprime ainsi dans l'espace réel :

$$M \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} (n_{\vec{r},\uparrow} - n_{\vec{r},\downarrow}) + c.h. \quad (8)$$

où $n_{\vec{r},\sigma} = c_{\vec{r},\sigma}^\dagger c_{\vec{r},\sigma}$ est encore l'opérateur dénombrant le nombre d'électron ayant un vecteur d'onde \vec{k} et un spin σ . Le terme $(n_{\vec{r},\uparrow} - n_{\vec{r},\downarrow})$ dans eq.8 se charge donc de dénombrer les spins \uparrow et \downarrow dans le système qui apparaissent en alternance. Ce terme, combiné à l'exponentielle, assure que la configuration antiferromagnétique favorise l'énergie du système en la diminuant. Pour que la période d'oscillation des spins soit de 2 spins, il est requis que $\vec{Q} = (\pi, \pi)$. En effet, l'exponentielle en eq.8 assure que les premiers voisins (sites adjacents) aient des électrons de spin antiparallèle : l'exponentielle fait en sorte que l'existence de spins adjacents antiparallèles diminue l'énergie du système, puisqu'elle fait apparaître un signe négatif en alternance devant le hamiltonien (d'où $(n_{\vec{r},\uparrow} - n_{\vec{r},\downarrow})$). M est le terme associé à l'énergie de magnétisation des spins des électrons. Ce terme est obtenu dans le cadre de

la théorie du champ moyen. Le terme *c.h.* est le conjugué hermitique du premier terme de eq.8. On prend maintenant la transformée de Fourier de eq.8 afin que \mathcal{H}_c et \mathcal{H}_{AF} représente le système dans le même espace, soit celui des vecteurs d'onde \vec{k} de l'électron ; il ne faut certainement pas oublier que la fonction d'onde de l'électron libre a comme paramètre \vec{k} . Cela donne :

$$\mathcal{H}_{AF} = M \sum_{\vec{k}} \left(c_{(\vec{k}+\vec{Q}),\uparrow}^\dagger c_{\vec{k},\uparrow} - c_{(\vec{k}+\vec{Q}),\downarrow}^\dagger c_{\vec{k},\downarrow} \right) + c.h. \quad (9)$$

Le terme en champ moyen de eq.9 est introduit de façon phénoménologique. On cherche maintenant à interpréter le plus simplement possible l'action des opérateurs $c_{(\vec{k}+\vec{Q}),\sigma}^\dagger$ et $c_{\vec{k},\sigma}$ sur les fonctions d'onde des états du système : l'action combinée de ces deux opérateurs renseigne sur le nombre d'électron successif dans l'espace des vecteurs d'onde $(\pm\vec{Q})$ (0 ou 1) à l'électron de vecteur d'onde \vec{k} de même spin.

iii. Terme de supraconductivité

Il reste un dernier phénomène à introduire dans le système : la supraconductivité d-wave. Pour ce faire, il faut ajouter un terme \mathcal{H}_{BCS} au hamiltonien total $\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{AF}$ [3]. Ce terme \mathcal{H}_{BCS} s'exprime ainsi dans l'espace réel :

$$\sum_{\vec{r},\vec{a}} \Delta_{\vec{a}} \left(c_{\vec{r},\uparrow} c_{(\vec{r}+\vec{a}),\downarrow} - c_{\vec{r},\downarrow} c_{(\vec{r}+\vec{a}),\uparrow} \right) + c.h. \quad (10)$$

Une paire de Cooper consiste en l'appariement de deux électrons sur des sites différents par la médiation de phonon. Toutefois, étant donné la supraconductivité d-wave, ce ne sont généralement pas les phonons qui médient l'appariement ; ce ne sont pas les phonons qui domine la répulsion de Coulomb entre les électrons pour former la paire. En supraconductivité d-wave, le terme en champ moyen $\Delta_{\vec{a}}$ obéit aux conditions suivantes :

$$\Delta_{\vec{a}}^{(*)} = \begin{cases} +\Delta^{(*)} & \text{si } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| = \hat{x} \\ -\Delta^{(*)} & \text{si } |\vec{r}_i - \vec{r}_j| = \hat{y} \end{cases}$$

$\Delta^{(*)}$ est un scalaire pouvant être complexe. Afin de développer une intuition sur la fonction du terme $\Delta_{\vec{a}}$, on peut le concevoir comme étant l'énergie nécessaire à fournir au système afin que les paires de Cooper se brisent pour devenir des bogoliubons. Les bogoliubons sont des quasi-particules de nature fermionique ayant la caractéristique d'être la superposition d'électrons et de trous (absences d'électron). Les paires de Cooper peuvent se condenser à faible température et engendrer l'état supraconducteur, puisqu'elles se comportent similairement aux bosons. Dans l'espace des vecteurs d'onde, le hamiltonien \mathcal{H}_{BCS} de 10 devient :

$$\sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \left(c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} + c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} \right) \quad (11)$$

Où $\Delta_{\vec{k}} = 2\Delta (\cos k_x - \cos k_y)$ est l'énergie nécessaire à fournir à la paire de Cooper pour la briser en relation avec les vecteurs d'onde k_x et k_y des électrons la constituant. Δ a donc les unités d'une énergie. L'opérateur $c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger}$ crée une paire de Cooper construit à partir d'électrons de vecteur d'onde \vec{k} alors que l'opérateur $c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow}$ détruit une paire de Cooper construit à partir d'électron de vecteur d'onde \vec{k} . On combine maintenant les termes constituant le hamiltonien total du système $\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{AF} + \mathcal{H}_{BCS}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k},\sigma} + \\ & M \sum_{\vec{k}} \left(\left(c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{Q},\uparrow} + c_{\vec{k},\downarrow}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{Q},\downarrow} \right) + c.h. \right) \\ & + \sum_{\vec{k}} \left(\Delta_{\vec{k}} c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} + \Delta_{\vec{k}}^* c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

iv. Formalisme de Nambu

Il est souhaitable de représenter le hamiltonien eq.12 sous forme matricielle. Afin d'y parvenir, il faut avoir recours au formalisme de Nambu[5] :

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k} \in RBZ} \Psi_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{\mathcal{H}} \Psi_{\vec{k}} \quad (13)$$

Puisque le réseau cristallin de la figure 2 est périodique, cette région délimitée dans l'espace des vecteurs d'onde, soit la zone de Brillouin originale, se répète indéfiniment. Il suffit donc que d'en sélectionner une seule pour étudier fidèlement toutes les propriétés du système. Le domaine de vecteur d'onde \vec{k} sur lequel la sommation est effectuée est celui de la zone de Brillouin réduite, d'où $\vec{k} \in RBZ$ (*Reduced Brillouin zone*). Dans ce cas-ci, l'alignement des spins des électrons se répète à concurrence de deux électrons (spins) étant donné l'antiferromagnétisme. Cela se traduit au travers les opérateurs d'échelle de la façon suivante : soit l'opérateur d'annihilation $c_{\vec{k},\sigma}$ dans la première zone de Brillouin réduite et $c_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma}$ celui dans la deuxième zone réduite. Puisque $\vec{Q} = (\pi, \pi)$, on a que $c_{\vec{k}+2\vec{Q},\sigma} = c_{\vec{k},\sigma}$. Ainsi, la zone de Brillouin originale, qui constitue l'espace des vecteurs d'onde, se voit segmentée en deux régions distinctes. De plus, puisque \vec{Q} est un vecteur d'onde fixe, il suffit de sommer sur les vecteurs d'onde \vec{k} de la première zone de Brillouin réduite afin de sommer l'intégralité des vecteurs d'onde de la zone de Brillouin originale. Les opérateurs $\Psi_{\vec{k}}^{\dagger}$ ainsi que $\Psi_{\vec{k}}$ sont des spineurs de Nambu. En développant le produit des opérateurs spineurs sur le hamiltonien matriciel eq.13, on retrouve le hamiltonien eq.12. Afin de reproduire le hamiltonien eq.12 à l'aide du formalisme de Nambu, par l'entremise de démarches astucieuses, on parvient à définir les opérateurs spinoriels ainsi que le hamiltonien matriciel lui-même :

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k} \in \text{RBZ}} \begin{pmatrix} c_{\vec{k},\uparrow}^\dagger & c_{\vec{k}+\vec{Q},\uparrow}^\dagger & c_{-\vec{k},\downarrow} & c_{-(\vec{k}+\vec{Q}),\downarrow} \end{pmatrix} \times \\
 \begin{pmatrix} \epsilon(\vec{k}) & 2M & \Delta_{\vec{k}} & 0 \\ 2M & \epsilon(\vec{k}+\vec{Q}) & 0 & \Delta_{\vec{k}+\vec{Q}} \\ \Delta_{\vec{k}} & 0 & -\epsilon(-\vec{k}) & 2M \\ 0 & \Delta_{\vec{k}+\vec{Q}} & 2M & -\epsilon(-(\vec{k}+\vec{Q})) \end{pmatrix} \times \\
 \begin{pmatrix} c_{\vec{k},\uparrow} \\ c_{\vec{k}+\vec{Q},\uparrow} \\ c_{-\vec{k},\downarrow} \\ c_{-(\vec{k}+\vec{Q}),\downarrow} \end{pmatrix} \quad (14)$$

Les signes négatifs apparaissent sur les relations de dispersion dans la diagonale de \mathcal{H} à cause des propriétés d'anticommutation des opérateurs d'échelle des électrons eq.2. Pour ces mêmes relations de dispersion, un signe négatif émerge devant l'argument du vecteur d'onde conséquemment à une substitution astucieuse. En effet, le domaine de sommation dans la première zone de Brillouin réduite est $\{-|\vec{k}|, |\vec{k}|\}$. En effectuant un changement de variable ne changeant en rien la périodicité de la configuration des spins⁵, on se trouve à inclure les opérateurs associés au terme supraconducteur du hamiltonien présenté à l'équation 11 agissant sur les électrons de spin \downarrow . On est donc parvenu, avec eq.14, à représenter le hamiltonien du système antiferromagnétique et supraconducteur dans la base des opérateurs de création et d'annihilation des électrons. Si quelqu'un voulait avoir une représentation du hamiltonien dans l'espace diagonal, soit celui des quasi-particules du système, il aurait à diagonaliser la matrice \mathcal{H} en eq.14. Quelqu'un pourrait simplement bâtir les matrices de transfert de base à partir des vecteurs propres normalisés obtenus en diagonalisant le hamiltonien \mathcal{H} pour ensuite les appliquer sur \mathcal{H} non diagonal afin de se projeter dans la base diagonale ; un exemple est fait sur un système ne comportant que l'antiferromagnétisme dans cet article[1].

5. Pour les individus intéressés et plutôt téméraires, un document complet est disponible comportant toutes les démarches essentielles des calculs entrepris. Ces gens n'ont qu'à me contacter.

Les énergies propres obtenues seraient alors celles des bandes d'énergie (relation de dispersion) des quasi-particules et les vecteurs propres consisteraient en les opérateurs de création et d'annihilation de cette quasi-particule. Ces nouveaux opérateurs d'échelle obéissent de la même façon aux relations d'anticommutation définies en eq.2 et en eq.3. Ce sont donc des fermions.

III. FONCTION DE GREEN À UN CORPS SANS INTERACTION

La fonction de Green à un corps sans interaction est présentée et discutée. Afin d'avoir un justification de la forme de cette fonction, consultez le document complet que j'ai produit entre autres à cet effet. La fonction de Green obéit à l'équation de Dyson, qui s'écrit :

$$\hat{G}(\vec{k}, \omega)^{-1} = (\omega - i\eta) \mathbb{I} - \hat{\mathcal{H}}_0 - \hat{\Sigma} \quad (15)$$

On décortique néanmoins quelque peu la fonction de Green afin d'avoir un aperçu sur sa fonctionnalité. Étant donné le hamiltonien eq.14, dénoté $\hat{\mathcal{H}}_0$, représenté dans une forme matricielle, la fonction de Green eq.15 est également sous forme matricielle. Il est la matrice identité, $\hat{\mathcal{H}}_0$ est le hamiltonien diagonal ne comportant que les relations de dispersion $\epsilon(\vec{k})$, $\epsilon(\vec{k}+\vec{Q})$, $-\epsilon(-\vec{k})$ et $-\epsilon(-(\vec{k}+\vec{Q}))$ dans la diagonale de eq.14. La matrice $\hat{\Sigma}$ comporte de l'information sur la *self-energy* des électrons. Cette matrice comprend tous les autres termes : ceux hors-diagonaux de la matrice eq.14. On peut voir la *self-energy* comme étant tout ce qui *habille* l'électron, tout ce qui fait que l'électron n'est plus libre, puisque ce dernier est soumis à des contraintes associées à l'antiferromagnétisme et à la supraconductivité. Le terme $i\eta$ y est pour des fins de convergence lorsqu'intégrée dans le plan complexe, mais il peut être omis pour la discussion physique, car on a que $\eta \rightarrow 0$. Finalement, le terme ω signifie l'énergie transférée au système complet. Puisque la fonction de Green est une fonction matricielle, il faut qu'elle soit représentée dans une base ;

cette base est naturellement celle du hamiltonien eq.14.

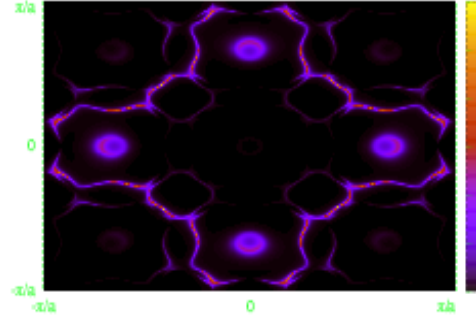
La quasi-particule⁶, soit l'électron habillé par l'antiferromagnétisme ainsi que la supraconductivité, existe en tant que superposition d'une variété d'état d'électron; comme si les quasi-particules utilisaient les électrons (et les trous) pour se définir et exister. Les états des électrons, avec le gap supraconducteur Δ , l'énergie d'aimantation M et les paramètres de saut $t'_{\vec{a},\sigma}$ bien définis, ont comme paramètres k_x, k_y ainsi que σ . Or, dans ce système, les spins \uparrow et \downarrow requièrent la même énergie pour exister. Les paramètres pertinents se résument donc à k_x et k_y dans la zone de Brillouin réduite. Il est possible de savoir, à l'aide de la fonction de Green eq.15, quels états d'électrons sont sollicités afin d'assurer l'existence d'une quasi-particule à un énergie ω donnée. La fonction spectrale contient cette information et est déduite de l'équation 15, car représentée dans la base des opérateurs des électrons :

$$A(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \hat{G}(\vec{k}, \omega) \quad (16)$$

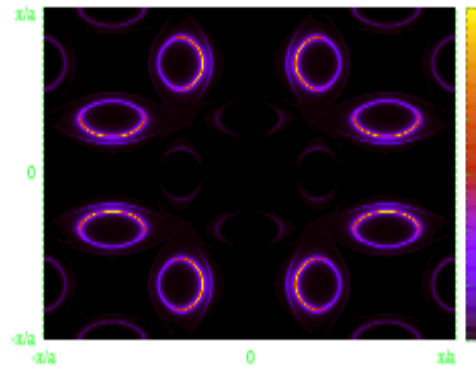
La relation 16 est l'expression pour la fonction spectrale. Une démonstration de sa forme est disponible dans le document complémentaire que j'ai produit. Afin d'obtenir la fonction spectrale, il faut inverser la matrice de Green de l'équation de Dyson 15 et en prendre sa partie imaginaire. Puisque $\eta \rightarrow 0$, la partie imaginaire de la fonction de Green ne peut être contenue que dans la *self-energy* de l'électron $\hat{\Sigma}$. Deux figures illustrent des fonctions spectrales parmi les centaines que j'ai simulées à l'aide du supercalculateur Mammouth hébergé dans le sous-sol de l'Université de Sherbrooke. Les régions chaudes mettent en évidence les électrons de vecteurs d'onde k_x et k_y qui composent en plus grande proportion les quasi-particules étant donnés certains paramètres fixés. Les régions sombres dénotent l'absence d'utilisation de ces électrons dans les quasi-particules existant pour certains paramètres fixés.

6. On parle de bogoliubon lorsque seulement la supraconductivité habille l'électron.

Figure 3 – Poids spectral des quasi-particules pour un dopage aux trous de $\frac{1}{6}$ selon divers paramètres dans le cas d'onde de spin incommensurable.



(a) $\omega = 0, \Delta = 0.00, M = 0.2$ et le paramètre de saut au premier site voisin $t' = -0.17$ et deuxième site voisin $t'' = 0.08$. Les axes des x et y dénotent l'étendue de la zone de Brillouin originale.



(a) $\omega = 0, \Delta = 0.03, M = 0.5$ et le paramètre de saut au premier site voisin $t' = -0.51$ et deuxième site voisin $t'' = 0.07$. Les axes des x et y dénotent l'étendue de la zone de Brillouin originale.

IV. CONCLUSION

Plusieurs approches théoriques sont tentées et l'ont été dans le dessein d'expliquer et comprendre les mécanismes microscopiques à l'origine de la supraconductivité à haute température critique, présente dans les cuprates. La théorie BCS ne parvient pas à expliquer et prévoir les aspects de la supraconductivité à haute température. Il serait possible et excessivement facile de compliquer le système traité dans le présent article de vulgarisation en introduisant, par exemple, de l'ordre de charge et de l'ordre de spin incommensurable, s'apparentant à l'antiferromagnétisme. Il existe des approches beaucoup plus raffinées pour approcher la supraconductivité dans les cuprates, telle la théorie de Yang-Rice-Zhang[4], la *Variational Cluster Approximation* (VCA), la *Cluster Dynamical Mean Field Theory* (CDMFT), etc.

RÉFÉRENCES

- [1] Subir Sachdev Andreas Eberlein, Walter Metzner and Hiroyuki Yamase. Fermi surface reconstruction and drop of hall number due to spiral antiferromagnetism in high- t_c cuprates. *arXiv*, 1607.0608(1), 2016.
- [2] P. Fournier. t' and infinite-layer electron-doped cuprates. *Elsevier Physica C*, 2015.
- [3] L. N. Cooper J. Bardeen and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 1957.
- [4] T. M. Rice Kai-Yu Yang and Fu-Chun Zhang. Phenomenological theory of the pseudogap state. *Physical Review B*, 73, 2006.
- [5] Giovanni A.C. Ummarino. *Eliashberg Theory*. Departement of Applied Science and Technology, Politecnico di Torino, 10129 Turin, Italy. <http://www.cond-mat.de/events/corre113/manuscripts/ummarino.pdf>.