

Méthodes d'amas quantiques dans l'étude des modèles de Hubbard

par

Jean Paul Latyr FAYE

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

FACULTÉ des SCIENCES
UNIVERSITÉ de SHERBROOKE

Sherbrooke, Québec, Canada

28 juillet 2015

Le 28 juillet 2015

le jury a accepté la thèse de Monsieur Jean Paul Latyr Faye dans sa version finale.

Membres du jury

Professeur David Sénéchal
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Denis Morris
Membre interne
Département de physique

Dr Michel Ferrero
Membre externe
Chercheur CNRS
Centre de Physique Théorique (CPTH)
École Polytechnique, France

Professeur Claude Bourbonnais
Président rapporteur
Département de physique

À mes parents et amis

Sommaire

Cette thèse porte sur trois modèles d'électrons fortement corrélés : le modèle de Kitaev-Hubbard, le modèle de Hubbard sur le réseau en treillis et le modèle de Hubbard sur le réseau en nid d'abeille. La résolution de ces trois modèles est basée sur les méthodes d'amas quantiques telles que l'approximation de l'amas variationnel (VCA), le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) et l'approximation de l'impureté dynamique sur amas (CDIA). Le solveur utilisé avec ces méthodes est la diagonalisation exacte (ED) à température nulle.

Le modèle de Kitaev-Hubbard est une variante du célèbre modèle de Hubbard, défini sur le réseau du graphène et comportant un terme de saut t' dépendant du spin, qui joue un rôle analogue à celui d'une interaction spin-orbite. Au demi-remplissage et dans la limite à couplage fort ($U \rightarrow \infty$), ce modèle est une interpolation entre le modèle de Heisenberg pour l'antiferromagnétisme et le modèle de Kitaev utilisé en information quantique. Contrairement au modèle idéalisé de Kitaev, le modèle de Kitaev-Hubbard peut être réalisé dans des réseaux optiques d'atomes froids et ainsi supporter, dans certaines limites ($t' \sim t, U \gg t$), des calculs quantiques topologiques. À couplage modéré, notre étude conduit à un diagramme de phase comportant de l'antiferromagnétisme, de liquide de spin algébrique ainsi que deux types de semi-métaux. Ces différentes phases du modèle se rencontrent en un seul point sur le plan (U, t') . La transition entre la phase antiferromagnétique et les phases semi-métallique est du deuxième ordre, alors qu'elle est du premier ordre entre le liquide de spin algébrique et l'antiferromagnétisme. La méthode d'amas quantique utilisée dans ce projet est l'approximation de l'impureté dynamique sur amas (CDIA).

Le réseau en treillis constitue une description simplifiée du matériau $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, qui a une structure en échelles couplées. C'est un matériau supraconducteur découvert en 1996, mais dont la température critique est très sensible à la pression. La présence et le mécanisme de la supraconductivité, ainsi que la symétrie du paramètre d'ordre restent des sujets de recherche. Le matériau présente aussi des propriétés similaires aux cuprates et reste le seul supraconducteur à base d'oxyde de cuivre n'ayant pas une structure plane. Pour cette raison, l'étude du $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ est d'intérêt dans le but de comprendre le mécanisme de la supraconductivité causée par les

corrélations électroniques, comme celle des cuprates. Notre étude montre que la supraconductivité est présente dans une gamme de densités électroniques s'échelonnant entre le demi-remplissage et un dopage d'environ 20%. De plus, les résultats montrent que le paramètre d'ordre est de type singulet $d + id$ dans une gamme de dopage. Ainsi, la supraconductivité est peut-être chirale, c'est-à-dire qu'elle brise l'invariance par inversion du temps. Ce système porterait donc du courant spontané à la périphérie de l'échantillon même en absence de champ magnétique. Pour étudier ce modèle, nous avons utilisé l'approximation de l'amas variationnel (VCA) et le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT).

Le modèle de Hubbard étendu sur le réseau en nid d'abeille décrit approximativement le graphène et les matériaux analogues. L'étude de ce modèle montre que la supraconductivité peut être présente dans ce système. De plus, en fonction du dopage, notre étude montre que le paramètre d'ordre est de type triplet et de symétrie $p + ip$. Ainsi, la supraconductivité serait chirale. Les résultats indiquent aussi que la répulsion électron-électron entre atomes voisins favorise la supraconductivité dans sa forme chirale. Ces résultats ont été obtenus à la fois par l'approximation de l'amas variationnel (VCA) et le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT).

Abstract

This thesis describes three models of strongly correlating electrons : the Kitaev-Hubbard model, the Hubbard model on the trellis lattice and the Hubbard model on the graphene lattice. The Hamiltonians of these models are solved using quantum cluster methods, such as the variational cluster approximation (VCA), the cellular dynamical mean field theory (CDMFT) et the cluster dynamical impurity approximation (CDIA). These methods are combined with an exact diagonalization (ED) solver at zero temperature.

The Kitaev-Hubbard model is a variant of the famous Hubbard model defined on the honeycomb lattice with a spin-dependent hopping t' that plays a role analogous to a spin-orbit interaction. At half-filling and in the strong coupling limit ($U \rightarrow \infty$), this model is an interpolation between the Heisenberg model for antiferromagnetism and the Kitaev model used in quantum information. Unlike the idealized Kitaev model, the Kitaev-Hubbard model can be realized in optical lattices of cold atoms and support in a certain limit ($t' \sim t, U \gg t$) topological quantum computation. At moderate coupling, we obtain the phase diagram of the model, which contains an antiferromagnetic phase, an algebraic spin liquid and two types of semi-metal. These different phases meet at a single point on the (U, t') plane. The transition between the antiferromagnetic and semi-metallic phases is continuous, whereas it is discontinuous between the algebraic spin liquid and the antiferromagnetic phase. The quantum cluster method used in this project is the cluster dynamical impurity approximation (CDIA).

The Hubbard model on the trellis lattice offers a simplified description of the compound $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, which has the structure of coupled spin ladders. Its superconductivity was discovered in 1996, but the critical temperature is very sensitive to pressure. The theoretical description of superconductivity in this compound, including the symmetry of the order parameter, are still current problems. The compound also has properties similar to cuprates and remains the only superconductor copper oxide without a planar structure. For this reason, this problem is of interest in order to understand the mechanism of superconductivity caused by electron correlations, like in cuprates. Our studies show that the superconductivity is present in a range of electron density ranging from half-filling to a doping of approximately 20%. Furthermore, we show that the order

parameter is a singlet of $d + id$ symmetry in a range of doping. Thus, the superconductivity is chiral, that is, it breaks time-reversal symmetry. This means that the system would carry a spontaneous current at the periphery of the sample even in the absence of a magnetic field. To study this model, we use the variational cluster approximation (VCA) and the cellular dynamical mean field approximation (CDMFT).

The extended Hubbard model on the honeycomb lattice approximately describes graphene and similar materials. Our study of this model shows that superconductivity is present. In a large range of doping, we show that the order parameter is a triplet of $p + ip$ symmetry. Thus, again, superconductivity is chiral. We also show that the Coulomb repulsion between neighboring sites favors this $p + ip$ superconductivity. These results are obtained both by the variational cluster approximation (VCA) and by cellular dynamical mean field theory (CDMFT).

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à David Sénéchal, mon directeur de thèse qui a bien voulu m'accueillir dans son groupe de recherche. Merci encore Professeur David Sénéchal, j'ai beaucoup bénéficié de ta profonde connaissance du domaine, de tes conseils et les choses exceptionnelles qui ont mené à bien l'avancement de mes travaux de doctorat. Je n'ai jamais imaginé dans ma vie de rencontrer un Professeur aussi exceptionnel que vous sur tous les plans. Votre disponibilité, votre patience et votre gentillesse m'ont beaucoup aidé en tant qu'étudiant international et ont renforcé mes souvenirs inoubliables à l'Université de Sherbrooke. Merci infiniment.

Je remercie profondément le professeur Claude Bourbonnais d'avoir accepté de présider le jury, mais aussi de ses conseils et de m'avoir initié à l'auxiliaire d'enseignement. Merci encore Professeur Bourbonnais, d'avoir manifesté de l'intérêt pour mes résultats. Il n'existe pas pour moi une chose plus gratifiante que cela pour celui qui a l'ambition d'être théoricien.

Je remercie le professeur Denis Morris d'accepter de faire partie du jury bien qu'une thèse théorique ne soit pas toujours facile d'accès pour un expérimentateur. Merci beaucoup de vos efforts pour comprendre cette thèse et de votre intérêt pour mes résultats.

Je tiens à remercier le membre de jury externe, Michel Ferrero, d'avoir accepté ce travail laborieux et pour sa disponibilité. Je suis très reconnaissant envers vous.

Je remercie profondément mes collaborateurs Syed Raghil Hassan, Ganapathy Baskaran, Peyman Sahebsara , P. V. Sriluckshmy d'accepter de travailler avec moi dans plusieurs domaines.

Je suis très reconnaissant des discussions que j'ai eues avec le Professeur André-Marie Tremblay, merci infiniment. Vous êtes vraiment pour moi une référence dans la recherche scientifique.

Je remercie tous les membres du département de physique de m'avoir aidé à surmonter certaines situations difficiles.

Je remercie profondément Ababacar Sadihe Ndao de m'avoir conseillé beaucoup dans la vie. Grâce à lui j'ai pu faire ma demande à The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics

(ICTP) pour un Master en physique théorique conduisant aujourd'hui à un doctorat. Merci infiniment vos conseils ont été très utiles dans ma vie.

J'exprime en fin ma gratitude à toute la communauté sénégalaise de l'Université de Sherbrooke, merci beaucoup Mohamadou Sarr vous m'avez bien aidé du début à la fin avec vos conseils exceptionnels.

Publications

■ Topological phases of the Kitaev-Hubbard model at half filling

J. P. L. Faye , S. R. Hassan and D. Sénéchal, **Phys. Rev. B** **89**, 115130 (2014)

J'ai fait les calculs et analysé les résultats, puis j'ai écrit la première version du manuscrit. Les co-auteurs ont participé à l'analyse des résultats et à la correction du manuscrit final.

■ d-wave superconductivity in coupled ladders

J. P. L. Faye, S. R. Hassan, P. V. Sriluckshmy, G. Baskaran and D. Sénéchal, **Phys. Rev. B** **91**, 195126 (2015)

J'ai participé à l'élaboration du projet, j'ai fait les calculs et analysé les résultats. J'ai écrit la première version du manuscrit. Les co-auteurs ont participé à l'analyse des résultats et à la correction du manuscrit final.

■ Chiral triplet superconductivity on the graphene lattice

J. P. L. Faye, P. Sahebsara and D. Sénéchal, **ArXiv1505.07890** (2015), accepté à Phys. Rev. B

J'ai participé à l'élaboration du projet, j'ai fait les calculs et analysé les résultats. J'ai écrit la première version du manuscrit. Les co-auteurs ont participé à l'analyse des résultats et à la correction du manuscrit final.

Table des matières

Sommaire	ii
1 Introduction et généralités	1
1.1 Le modèle de Hubbard	1
1.1.1 Fonctions de Bloch et de Wannier	2
1.1.2 Hamiltonien de Hubbard	4
1.1.3 La limite de bande et la limite atomique du modèle de Hubbard	6
1.1.4 Modèle de Hubbard étendu	7
1.2 Notion de corrélation	9
1.3 Degré de corrélation entre les électrons	9
1.4 Description des fermions fortement corrélés	10
1.4.1 Fonction de Green à $T = 0$	10
1.4.2 Représentation spectrale de la fonction de Green	12
1.4.3 Le poids spectral et la self-énergie	13
1.4.4 Valeurs moyennes et fonction de Green	16
1.5 Les supraconducteurs fortement corrélés	17
1.5.1 La supraconductivité	17
1.5.2 Les supraconducteurs à haute température critique	18
1.5.3 Les supraconducteurs organiques	21
1.6 Les échelles de spins	22
1.6.1 Les matériaux isolants en échelles de spins	22
1.6.2 Les échelles dopées aux trous	26
1.7 Possibilité de supraconductivité dans le graphène	29
1.8 Modèle de Hubbard sur le réseau du graphène	30
1.8.1 Structure cristallographique et bande électronique.	30
1.8.2 Représentations irréductibles et paramètres d'ordre supraconducteur	34
1.9 Frustration et liquides de spins algébriques : modèle de Kitaev-Hubbard	36

2	Méthodologie	37
2.1	La théorie des perturbations inter amas	38
2.1.1	Fonction de Green CPT périodique	40
2.2	La diagonalisation exacte	42
2.2.1	Codage des états	43
2.2.2	Construction et diagonalisation du hamiltonien	44
2.2.3	Algorithme de Lanczos : état fondamental	45
2.2.4	Algorithme de Lanczos pour la fonction de Green de l'amas.	46
2.2.5	Algorithme de Lanczos de bande pour la fonction de Green de l'amas.	47
2.3	L'approche de la fonctionnelle de Potthoff	49
2.4	Approximation de l'amas variationnel	53
2.4.1	Champ de Weiss	53
2.4.2	VCA et procédure	56
2.5	Le champ moyen dynamique sur amas	56
2.6	Approximation de l'impureté dynamique sur amas	59
2.7	Limites des méthodes d'amas quantiques.	60
3	Phases du modèle de Kitaev-Hubbard	61
3.1	Complément : hystérésis et valeurs critiques	71
4	Supraconductivité de symétrie d dans les échelles de spin faiblement couplées dopées en trous	73
4.1	Complément : diagramme de phase au demi-remplissage	83
5	Supraconductivité triplet p et $p + ip$ sur le réseau du graphène	87
5.1	Complément : solutions p et f par la CDMFT	98
6	Conclusion générale	101
	Bibliographie	103

Liste de acronymes

AF	<i>Antiferromagnetism</i> Antiferromagnétisme
ASL	<i>Algebraic spin liquid</i> Liquide de spin algébrique
CDIA	<i>Cellular Dynamical Impurity Approximation</i> Approximation de l'impureté dynamique sur amas
CDMFT	<i>Cellular Dynamical Mean Field Theory</i> Théorie du champ moyen dynamique sur amas
CPT	<i>Cluster Perturbation Theory</i> Théorie des perturbations inter amas
ED	<i>Exact diagonalization</i> Diagonalisation exacte
RVB	<i>Resonating Valence Bond</i> Liaison de valence résonnante
VCA	<i>Variational Cluster Approximation</i> Approximation de l'amas variationnel
SM	<i>Semi-metal</i> Semi-métal

Chapitre 1

Introduction et généralités

On introduit dans ce chapitre le contexte théorique et expérimental motivant l'étude des systèmes d'électrons fortement corrélés. On examine la notion de fortes corrélations électroniques et les composés d'électrons fortement corrélés tels que les supraconducteurs à haute température critique et les supraconducteurs organiques. Les matériaux en échelles seront présentés avec un accent sur la supraconductivité. On verra, enfin, les différentes représentations irréductibles du groupe de symétrie D_{6h} du réseau du graphène. D'un point de vue théorique, nous montrerons que ces représentations irréductibles définissent les différents types de symétries possibles du paramètre d'ordre supraconducteur.

1.1 Le modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard [1, 2, 3, 4, 5, 6], qui sera décrit en détail à la section 1.1.2, est le modèle le plus simple pour décrire des électrons en interaction sur un réseau. Le modèle a été introduit simultanément en 1963 par John Hubbard [7], Martin C. Gutzwiller [8] et Junjiro Kanamori [9]. Cependant, dans sa théorie du super-échange [10, 11], P. W. Anderson avait déjà utilisé des approximations consistant à négliger la répulsion des électrons localisés sur différents sites.

Malgré sa formulation très simple, la résolution du modèle de Hubbard est complexe et les diagrammes de phase en deux ou trois dimensions restent toujours un défi majeur. En effet, le modèle n'admet des solutions exactes qu'en une dimension [12] et en dimension infinie [13, 14]. Le modèle de Hubbard nous permet principalement de mettre en évidence le rôle des corrélations entre électrons. Nous commencerons par établir brièvement le hamiltonien de Hubbard pour ensuite citer certaines de ses propriétés. Cependant nous discuterons d'abord des fonctions de Bloch et de Wannier que nous allons utiliser dans la suite.

1.1.1 Fonctions de Bloch et de Wannier

Le hamiltonien général H d'un système de N fermions est constitué de l'énergie cinétique notée H_0 , et de l'énergie potentielle dénotée par V . On a :

$$H = H_0 + V \quad (1.1)$$

Dans l'expression (1.1), le terme libre H_0 est donné par :

$$H_0 = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

Dans cette équation, $h(\mathbf{r})$ est le hamiltonien décrivant une particule sans interactions. Il contient l'énergie cinétique et l'ensemble des énergies potentielles $u(\mathbf{r})$ sauf celle provenant de l'interaction électron-électron. On l'écrit sous la forme :

$$h(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2m_e} \nabla^2 + u(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

où m_e est la masse de la particule. Le deuxième terme de (1.1) (ou l'interaction électron-électron) est de la forme :

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

Dans l'équation (1.4), l'expression de $v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ est donnée par :

$$v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.5)$$

Cette quantité décroît rapidement avec la distance entre les atomes. Dans une version simplifiée ne décrivant qu'un sous-ensemble des particules, $v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ peut correspondre à une interaction écrantée. $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ et son conjugué $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ sont des champs d'opérateur de fermions satisfaisant les relations d'anticommutation :

$$\begin{cases} \{\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')\} = 0 \\ \{\psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma, \sigma'} \end{cases} \quad (1.6)$$

où $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est la fonction delta de Dirac et le symbole de Kronecker $\delta_{\sigma, \sigma'}$ est donné par l'expression suivante :

$$\delta_{\sigma, \sigma'} = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma = \sigma' \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (1.7)$$

L'opérateur $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ détruit un électron de spin σ à la position \mathbf{r} ; $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ le crée.

Dans le cas d'un cristal parfait infini, le potentiel $u(\mathbf{r})$, dans l'équation (1.3), possède la périodicité du réseau cristallin, c'est-à-dire il satisfait la relation :

$$u(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{r}) \quad (1.8)$$

où \mathbf{R} est un vecteur du réseau direct. Le hamiltonien $h(\mathbf{r})$ satisfait donc le théorème de Bloch. Ce dernier permet d'obtenir les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$h(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k},n}\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

en stipulant que les fonctions propres $\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$, dites ondes de Bloch, correspondantes aux valeurs propres $\epsilon_{\mathbf{k},n}$, sont de la forme :

$$\psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) \quad (1.10)$$

Dans l'équation (1.10), \mathbf{k} est un vecteur d'onde dans la zone de Brillouin, n l'indice de bande et $u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$ une fonction ayant la périodicité du réseau :

$$u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) \quad (1.11)$$

Les fonctions de Wannier au site i sont définies par la relation :

$$W_{i,n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \psi_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}), \quad (1.12)$$

N_m est le nombre de mailles primitives du réseau cristallin. Par leur définition, on voit bien que les fonctions de Wannier ne sont rien d'autres que les transformées de Fourier des fonctions de Bloch. Cependant, dans la limite où les atomes sont bien séparés les uns des autres, les fonctions de Wannier coïncident avec les orbitales atomiques. Elles sont donc localisées sur les atomes contrairement aux fonctions de Bloch.

Les champs d'opérateur ψ_σ^\dagger et ψ_σ , des expressions (1.2) et (1.4), peuvent être décomposés dans la base de ces fonctions de Wannier :

$$\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{i,n} W_{i,n}^*(\mathbf{r}) c_{i,n\sigma}^\dagger \quad \text{et} \quad \psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{i,n} W_{i,n}(\mathbf{r}) c_{i,n\sigma} \quad (1.13)$$

où $c_{i,n\sigma}^\dagger$ et $c_{i,n\sigma}$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron de spin σ , localisé au site i de la bande n (on posera $n = 1$ pour le reste de ce document). Dans ce qui suit, on utilise ces expressions pour établir le hamiltonien de Hubbard.

1.1.2 Hamiltonien de Hubbard

Nous avons déjà vu que les champs d'opérateurs ψ_σ^\dagger et ψ_σ , peuvent être décomposés dans la base des fonctions de Wannier. En remplaçant les expressions de ψ_σ^\dagger et ψ_σ de l'équation (1.13) dans les équations (1.2) et (1.4), le hamiltonien complet (1.1) devient :

$$H = \sum_{i,j,\sigma} \int d\mathbf{r} W_i^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) W_j(\mathbf{r}) c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad (1.14)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,m} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' W_i^*(\mathbf{r}) W_j^*(\mathbf{r}') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) W_l(\mathbf{r}) W_m(\mathbf{r}') c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{m,\sigma'} c_{l,\sigma}$$

On définit l'amplitude de saut t_{ij} entre les sites i et j du réseau par :

$$t_{ij} = - \int d\mathbf{r} W_i^*(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) W_j(\mathbf{r}) \quad (1.15)$$

Elle décroît avec la distance $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ entre les sites i et j .

L'élément de matrice de l'interaction de Coulomb entre les électrons est de la forme :

$$\langle i, j | v | l, m \rangle = \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' W_i^*(\mathbf{r}) W_j^*(\mathbf{r}') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) W_l(\mathbf{r}) W_m(\mathbf{r}') \quad (1.16)$$

Nous avons vu, dans la sous-section précédente, que la quantité $v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ de l'équation (1.5), décroît rapidement avec la distance $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ entre les atomes. De plus, les fonctions de Wannier de l'équation (1.12) sont localisées. Les interactions entre électrons sont plus importantes s'ils occupent le même site. On procède donc à l'approximation suivante :

$$\langle i, j | v | l, m \rangle = \begin{cases} U & \text{si } i = j = m = l, \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (1.17)$$

C'est-à-dire, qu'on remplace par U les éléments de matrice du potentiel de Coulomb si la condition $i = j = m = l$ est satisfaite, sinon, on les remplace par zéro. En utilisant les équations (1.15) et (1.17), on peut écrire le hamiltonien (1.1) sous la forme :

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.18)$$

où l'opérateur de densité électronique dans l'état $\sigma = \uparrow, \downarrow$ au site i s'écrit :

$$n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \quad (1.19)$$

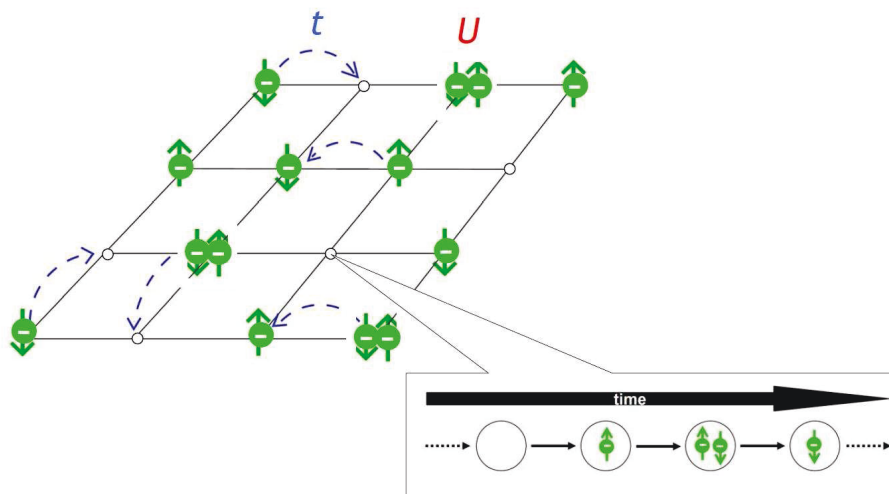


FIGURE 1.1 Illustration schématique des électrons en interaction dans un solide vue par le modèle de Hubbard. Les électrons de charge négative et spin up ou down sautent d'un site à un site voisin avec une amplitude de saut t . La dynamique du système conduit à une variation du nombre d'occupation d'un site donné. Deux électrons sur un même site avec des spins opposés (le principe de Pauli interdit, en effet, l'occupation d'un site par deux électrons de même spin) subissent l'interaction de Coulomb U [15].

Le hamiltonien (1.18) définit le modèle de Hubbard. Il constitue une simplification du vrai hamiltonien à N -corps, comme le montre l'équation (1.17). Cependant il permet toujours de mettre en œuvre la plupart des phénomènes physiques étudiés dans les matériaux où les électrons interagissent fortement entre eux. En effet, le hamiltonien de Hubbard constitue une bonne approximation du vrai hamiltonien à N -corps si les interactions étendues sont petites par rapport à U . Les résultats obtenus dans le cadre du modèle de Hubbard deviennent physiquement convaincants si les fonctions de Wannier sont très localisées, par exemples dans les systèmes avec des bandes étroites. Le modèle de Hubbard devient exact dans la limite où l'interaction de Coulomb $U \rightarrow \infty$. La figure 1.1 montre comment les électrons occupent les différents sites d'un réseau carré. Un site peut rester vide, être occupé par un électron ou doublement occupé. Les électrons sautent d'un site à un site voisin avec une amplitude de saut t . Deux électrons sur un même site avec des spins opposés (le principe de Pauli interdit, en effet, l'occupation d'un site par deux électrons de même spin) subissent l'interaction de Coulomb U .

Les deux termes du hamiltonien de Hubbard (1.18), pris séparément, admettent des solutions analytiques. Dans ce qui suit, nous allons discuter des solutions analytiques du modèle dans la limite de bande et dans la limite atomique.

1.1.3 La limite de bande et la limite atomique du modèle de Hubbard

Dans la limite de bande, correspondant à $U = 0$, le hamiltonien de l'équation (1.18) devient :

$$H_0 = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad (1.20)$$

Si on définit les transformés de Fourier des opérateurs de fermion de la manière suivante :

$$c_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (1.21)$$

où N_s est le nombre de sites du réseau, le hamiltonien (1.20) devient diagonal dans l'espace des vecteurs d'onde. On peut l'écrire sous la forme :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (1.22)$$

où $\epsilon(\mathbf{k})$ est la relation de dispersion donnée par :

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \quad (1.23)$$

En cas d'invariance par translation, t_{ij} ne dépend que de $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$. Dans le cas simple du réseau carré où les électrons peuvent sauter seulement aux premiers voisins, cette relation de dispersion s'écrit de la forme :

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t \cos(k_x) - 2t \cos(k_y) \quad (1.24)$$

où nous avons supposé que la distance a entre deux sites voisins du réseau est égale à l'unité. Cependant, sur le réseau du graphène aux proches voisins, elle est plus complexe. Néanmoins, on peut toujours l'écrire sous sa forme générale :

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \pm t \sum_{j=1,2,3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_j} \quad (1.25)$$

où les \mathbf{e}_j sont les trois vecteurs reliant un site avec ses trois premiers voisins. Ces vecteurs font des angles de 120° entre eux. Ce cas sera étudié dans la suite de ce document.

L'état fondamental $|F\rangle$ (ou mer de Fermi) est un produit d'états à une particule antisymétrique par échange de deux fermions :

$$|F\rangle = \prod_{\mathbf{k}, \epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (1.26)$$

où le niveau de Fermi est zéro et $|0\rangle$ un état vide. Les excitations à une particule sont obtenues en ajoutant une particule à la mer de Fermi $(c_{\mathbf{k}}^\dagger|F\rangle)_{\epsilon(\mathbf{k})>0}$ ou en retranchant une $(c_{\mathbf{k}}|F\rangle)_{\epsilon(\mathbf{k})<0}$

La limite atomique se produit quant $t = 0$ et le hamiltonien (1.18) devient :

$$H = U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \quad (1.27)$$

Les sites du réseau deviennent alors décorrélés les uns des autres avec des états d'énergie 0 , $-\mu$ et $-2\mu + U$, respectivement pour un site vide, occupé et doublement occupé. μ représente ici le potentiel chimique. Les états propres sont localisés dans l'espace réel, contrairement à la limite de bande.

Il devient important de noter que, dans la limite de bande ou dans la limite atomique, il n'y a pas d'ordre à longue portée dans le modèle de Hubbard. En effet, c'est la conjonction des deux termes (cinétique et potentiel) qui peut être responsable de l'apparition d'un ordre à longue portée, et ceci donne au modèle de Hubbard toute sa richesse.

Dans le cas où l'interaction de Coulomb U est faible comparée à la largeur W de la bande, la théorie des perturbations et la théorie du liquide de Fermi [16, 17] sont justifiées. C'est la limite de couplage faible. Dans le cas contraire, on peut utiliser la théorie des perturbations à couplage fort [18, 19, 20]. Cependant dans le cas intermédiaire, la résolution du hamiltonien de Hubbard demande des méthodes numériques comme on le verra au chapitre 2. En effet dans cette limite, les électrons deviennent fortement corrélés, ce qui constitue l'objet de la section 1.2. Nous discutons d'abord brièvement du modèle de Hubbard étendu et du modèle t - J avant d'aborder la notion de corrélation.

1.1.4 Modèle de Hubbard étendu

Le modèle de Hubbard décrit précédemment ne tient compte seulement que des éléments de matrice de l'interaction de Coulomb (1.17) satisfaisant la relation $i = j = l = m$. Cependant, en plus de l'interaction de Coulomb U que subissent deux électrons sur un même site, nous pouvons ajouter une interaction de Coulomb V , pour des électrons localisés aux plus proches voisins, c'est-à-dire :

$$\langle i, j | v | l, m \rangle = \begin{cases} U & \text{si } i = j = m = l, \\ V & \text{si } i \neq j \text{ et } l = i, j = m \text{ ou } l = j, i = m \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (1.28)$$

où dans la deuxième ligne donnant V , i et j sont des voisins immédiats. On parle alors du modèle de Hubbard étendu. Le nouveau hamiltonien prend la forme :

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (1.29)$$

où $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$. Dans ce modèle de Hubbard étendu, il est important de noter que les méthodes d'amas quantiques ne seront plus directement applicables. Nous traiterons ainsi une partie de ces interactions étendues dans l'approximation de Hartree.

Dans la limite de couplage fort, le modèle de Hubbard (1.18) s'identifie avec le modèle t - J que nous allons discuter dans la suite.

Modèle t - J

Le modèle t - J [21], introduit dans le cadre de la théorie des supraconducteurs à haute température critique (voir la sous-section 1.5.2), est généralement utilisé dans la description d'un isolant antiferromagnétique dopé en trous. Le hamiltonien s'écrit de la forme :

$$H_{t-J} = -t \sum_{i,j,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.30)$$

où i et j sont les sites d'un réseau, J l'énergie d'échange de Heisenberg. L'opérateur de spin \mathbf{S}_i s'écrit :

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} c_{i,\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta} c_{j,\beta} \quad (1.31)$$

où les $\sigma_{\alpha\beta}$ sont les composantes des matrices de Pauli. Dans la définition de ce modèle, la double occupation est interdite. Autrement dit, la limite $J \rightarrow 0$ est non-triviale.

Dans la limite de fort couplage, $U \gg t$, le modèle t - J se déduit du modèle de Hubbard de la section précédente. On trouve alors :

$$J \simeq \frac{4t^2}{U} \quad (1.32)$$

Dans cette limite, la double occupation est négligeable dans le modèle de Hubbard.

1.2 Notion de corrélation

En mathématiques, une corrélation entre les quantités A et B s'exprime par le fait que la valeur moyenne du produit n'est pas toujours égale au produit des valeurs moyennes des deux quantités, soit :

$$\langle AB \rangle \neq \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (1.33)$$

Une corrélation très courante est celle existant entre les abeilles comme le montre la figure 1.2. Ici le déplacement d'une abeille dépend fortement de celui des autres.



FIGURE 1.2 Illustration de la corrélation existante entre les abeilles. Le déplacement d'une abeille est fortement corrélé au déplacement d'une autre. Photo tirée de Wikipédia.

1.3 Degré de corrélation entre les électrons

Comme dans les exemples précédents, deux électrons sur une même orbitale d ou f dans un matériau sont aussi corrélés. Nous pouvons exprimer le degré de corrélation électronique de la manière simple suivante : On suppose que la relation de dispersion des particules est donnée par $\epsilon_{\mathbf{k}}$. La vitesse d'une particule $v_{\mathbf{k}}$, calculée à partir de $\epsilon_{\mathbf{k}}$, peut être estimée par la relation :

$$v_{\mathbf{k}} \simeq \frac{a}{\tau} \simeq \frac{aW}{h} \quad (1.34)$$

où a est le pas du réseau et h la constante de Planck. Cette équation conduit à la durée τ , qu'un électron reste autour d'un atome :

$$\tau = \frac{h}{W} \quad (1.35)$$

Physiquement, l'équation (1.35) indique que plus la bande W est étroite, plus l'électron restera longtemps autour d'un atome et sera fortement influencé par la présence des autres électrons. Le confinement spatial augmente les effets de l'interaction de Coulomb entre les électrons. Ainsi les électrons deviennent fortement dépendants : on parle de fortes corrélations électroniques. Les effets de corrélations électron-électron conduisent à de profonds changements quantitatifs et qualitatifs des propriétés physiques des systèmes électroniques. Ils sont responsables de la plupart des phénomènes physiques remarquables et inhabituels observés, par exemple, dans les supraconducteurs à haute température critique et dans les supraconducteurs organiques. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser à la description théorique, basée sur la fonction de Green, des fermions fortement corrélés.

1.4 Description des fermions fortement corrélés

Dans cette section, nous allons nous intéresser aux fonctions de Green à une particule. Les fonctions de Green nous permettront, via des méthodes numériques, de comprendre beaucoup de propriétés des systèmes fortement corrélés.

1.4.1 Fonction de Green à $T = 0$

Nous décrivons, dans cette sous-section, la fonction de Green à température nulle. En désignant toujours par $|F\rangle$ l'état fondamental et E_0 l'énergie correspondante du hamiltonien H de l'équation (1.1), on définit la fonction de Green de la manière suivante [22] :

$$G^\sigma(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -i \langle F | \top \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') | F \rangle \quad (1.36)$$

Les équations d'anticommutation dans l'expression (1.6) deviennent maintenant valables seulement à temps égaux ($t = t'$). L'opérateur \top , dans l'équation (1.36), est le produit ordonné en temps et son action est de la forme :

$$\top \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') = \Theta(t - t') \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') - \Theta(t' - t) \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}', t') \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \quad (1.37)$$

où la fonction de Heaviside $\Theta(t - t')$ est définie par :

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{si } t > t' \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (1.38)$$

Dans le cas d'un système continu en l'absence de potentiel extérieur, le hamiltonien dans l'expression (1.1) devient invariant par translation et indépendant du temps. Ainsi la fonction de Green va dépendre seulement du vecteur $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et de la différence de temps $t - t'$. Nous définissons les transformées de Fourier spatiales $G^\sigma(\mathbf{k}, t - t')$ par :

$$G^\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} G^\sigma(\mathbf{k}, t - t') e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (1.39)$$

et temporelle $G^\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ par :

$$G^\sigma(\mathbf{k}, t - t') = \int \frac{d\omega}{(2\pi)^d} G^\sigma(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega(t - t')} \quad (1.40)$$

où d est la dimension de l'espace. La fonction de Green $G^\sigma(\mathbf{k}, t - t')$ dépendant de l'impulsion \mathbf{k} est définie comme :

$$G^\sigma(\mathbf{k}, t - t') = -i \langle F | \top \psi_{\mathbf{k}, \sigma}(t - t') \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger(0) | F \rangle \quad (1.41)$$

Dans le cas d'un solide, la symétrie de translation n'est satisfaite que pour les vecteurs de translation \mathbf{R} du réseau. En utilisant la transformation de Fourier des champs d'opérateur dans l'expression (1.13), la fonction de Green de l'équation (1.1) devient :

$$G^\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t') = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{n, n'} W_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) W_{n'}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}') G_{n, n'}^\sigma(\mathbf{R} - \mathbf{R}'; t - t') \quad (1.42)$$

Dans l'expression (1.42), la fonction de Green $G^\sigma(\mathbf{R} - \mathbf{R}'; t - t')$ est définie en fonction des opérateurs de création et de destruction des fermions :

$$G_{n, n'}^\sigma(\mathbf{R} - \mathbf{R}'; t - t') = -i \langle F | \top c_{\mathbf{R}n\sigma}(t) c_{\mathbf{R}'n'\sigma}^\dagger(t') | F \rangle \quad (1.43)$$

Dans l'espace réciproque, on utilise la transformation de Fourier sur le réseau cristallin :

$$G_{n, n'}^\sigma(\mathbf{R} - \mathbf{R}'; t - t') = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} G_{n, n'}^\sigma(\mathbf{k}, t - t') \quad (1.44)$$

avec la définition :

$$G_{n,n'}^\sigma(\mathbf{k}; t - t') = -i\langle F | \top c_{\mathbf{k}n\sigma}(t) c_{\mathbf{k}n\sigma}^\dagger(t') | F \rangle \quad (1.45)$$

Le vecteur d'onde \mathbf{k} reste maintenant un élément de la zone de Brillouin.

1.4.2 Représentation spectrale de la fonction de Green

La représentation spectrale permet de déduire le lien existant entre la fonction de Green et le spectre d'énergie du système. En effet, nous verrons que la fonction de Green contient des informations sur les états excités du système. La représentation spectrale constitue aussi un lien direct entre la théorie et l'expérience. En regroupant l'indice n de la bande, le spin σ et le vecteur d'onde \mathbf{k} dans un indice unique k , nous écrivons :

$$G(k, t - t') = -i\Theta(t - t')\langle F | c_k(t) c_k^\dagger(t') | F \rangle + i\Theta(t' - t)\langle F | c_k^\dagger(t') c_k(t) | F \rangle \quad (1.46)$$

À un temps $t > t'$, un électron d'état k est ajouté au système de N particules. On calcule l'expression (1.46) de la fonction de Green de la manière suivante, en insérant une relation de fermeture :

$$\sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m| = \mathbb{1} \quad (1.47)$$

sur l'espace à $N+1$ électrons :

$$\begin{aligned} \langle F | c_k(t) c_k^\dagger(t') | F \rangle &= \sum_m \langle F | c_k(t) | \psi_m \rangle \langle \psi_m | c_k^\dagger(t') | F \rangle \\ &= \sum_m e^{i(E_0 - E_m)(t - t')} |\langle F | c_k | \psi_m \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.48)$$

où $|\Psi_m\rangle$ est un état propre de H correspondant à l'énergie E_m et comportant $N+1$ électrons. De la même façon, la partie avancée ($t < t'$) correspondant à un retrait d'un électron du système devient :

$$\begin{aligned} \langle F | c_k^\dagger(t') c_k(t) | F \rangle &= \sum_{m'} \langle F | c_k^\dagger(t') | \psi_{m'} \rangle \langle \psi_{m'} | c_k(t) | F \rangle \\ &= \sum_{m'} e^{-i(E_0 - E_{m'})(t - t')} |\langle F | c_k^\dagger | \psi_{m'} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.49)$$

où la somme est effectuée sur les états propres de H comportant $N - 1$ électrons. Dans les expressions (1.48) et (1.49), on a utilisé la représentation de Heisenberg pour un opérateur $O(t)$ dépendant du temps :

$$O(t) = e^{itH} O e^{-itH} \quad (1.50)$$

En remplaçant dans l'équation (1.46) les expressions précédentes, la fonction de Green devient :

$$G(k, t - t') = -i \Theta(t) \sum_m e^{i(E_0 - E_m)t} |\langle F | c_k | \psi_m \rangle|^2 + i \Theta(-t) \sum_{m'} e^{-i(E_0 - E_{m'})t} |\langle F | c_k^\dagger | \psi_{m'} \rangle|^2 \quad (1.51)$$

où on a supposé $t' = 0$. En ajoutant un amortissement aux énergies des états excités, c'est-à-dire $E_m \rightarrow E_m + i\eta$ où η est une constante positive infinitésimale, la transformée de Fourier de la fonction de Green (1.51) devient :

$$G(k, \omega) = \sum_m \frac{|\langle F | c_k | \psi_m \rangle|^2}{\omega + E_0 - E_m + i\eta} \quad \text{pour les excitations de type particule} + \sum_{m'} \frac{|\langle F | c_k^\dagger | \psi_{m'} \rangle|^2}{\omega + E_{m'} - E_0 - i\eta} \quad \text{pour les excitations de type trou} \quad (1.52)$$

où $\hbar = 1$. Nous déduisons de l'équation (1.52) que les pôles de la fonction de Green dans le plan complexe des fréquences sont localisés sur l'axe réel avec une partie imaginaire infinitésimale négative pour les excitations de type particule et positive pour les excitations de type trou. Ils correspondent aux fréquences d'excitation associées à chaque état excité. Les éléments de matrice de transition :

$$|\langle F | c_k | \psi_m \rangle|^2 \quad \text{et} \quad |\langle F | c_k^\dagger | \psi_{m'} \rangle|^2 \quad (1.53)$$

sont respectivement les résidus des pôles des excitations de type particule et de type trou.

1.4.3 Le poids spectral et la self-énergie

Le poids spectral ou la densité spectrale est la probabilité qu'un électron de vecteur d'onde k ajouté au système ($\omega > 0$) ou retiré au système ($\omega < 0$) ait une énergie $\hbar\omega$, où $\hbar = h/2\pi$. Les informations sur les états excités vues précédemment sont directement liées à la définition du poids spectral $A(k, \omega)$:

$$A(k, \omega) = \sum_m |\langle F | c_k | \psi_m \rangle|^2 \delta(\omega + E_0 - E_m) + \sum_{m'} |\langle F | c_k^\dagger | \psi_{m'} \rangle|^2 \delta(\omega + E_{m'} - E_0) \quad (1.54)$$

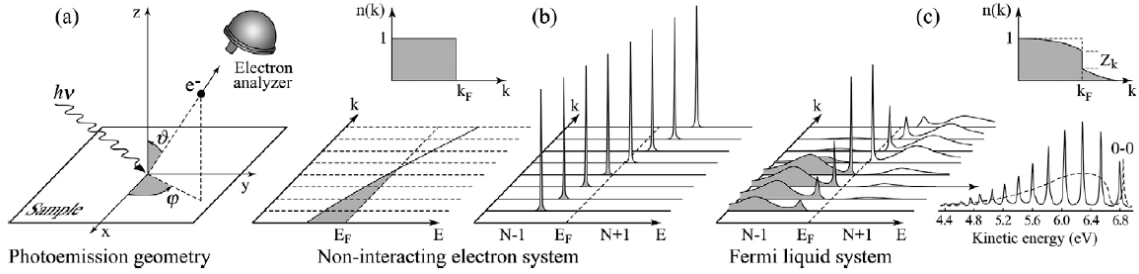


FIGURE 1.3 Le poids spectral d'un système sans interactions et d'un liquide de Fermi. (a) correspond à la géométrie de l'ARPES, (b) et (c) sont respectivement le poids spectral du système libre et du liquide de Fermi. [23]

La fonction de Green dans l'expression (1.52) se réécrit ainsi en fonction du poids spectral :

$$G(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(k, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta \text{sign}(\omega')} \quad (1.55)$$

Ainsi la fonction de Green devient entièrement déterminée par le poids spectral. Ce dernier est une distribution de probabilité, et par conséquent, doit être positif, et normalisé si on intègre sur toutes les fréquences :

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A(k, \omega) = 1 \quad (1.56)$$

Dans le cas d'un système sans interactions, la fonction spectrale correspond à une fonction delta, et on a :

$$A(k, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_k) \quad (1.57)$$

où ϵ_k est la relation de dispersion. Le spectre est donc un pic centré en ϵ_k . La fonction de Green correspondante s'écrit :

$$G_0(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta \text{sign}(-\epsilon_k)} \quad (1.58)$$

Le poids spectral est accessible directement par l'expérience par la technique de photoémission résolue en angle (ARPES) [23]. À la figure 1.3, on illustre le poids spectral obtenu par ARPES dans le cas d'un système sans interactions et d'un liquide de Fermi. Pour un système sans interactions, la distribution spectrale est constituée de pics comme le montre la figure 1.3 (b). Ces pics sont décrits par l'équation (1.57). Cependant, dans un liquide de Fermi ces pics sont élargis à cause des interactions comme le montre la figure 1.3 (c).

En présence des interactions, la fonction de Green est modifiée, et ces modifications sont contenues dans la self-énergie $\Sigma(\omega)$ définie par l'équation de Dyson :

$$G^{-1}(k, \omega) = G_0^{-1}(k, \omega) - \Sigma(k, \omega) \quad (1.59)$$

Pour donner une interprétation physique de la self-énergie, on considère le modèle de Hubbard dans la limite atomique, décrit à la sous-section 1.1.3. On peut écrire l'état fondamental (deux états dégénérés) sous la forme :

$$|F\rangle = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \quad (1.60)$$

La composante $G_{\uparrow}(\omega)$ de la fonction de Green peut être obtenue en calculant :

$$2G_{\uparrow}(\omega) = \langle F|c_{\uparrow}\frac{1}{\omega - H + E_0}c_{\uparrow}^{\dagger}|F\rangle + \langle F|c_{\uparrow}^{\dagger}\frac{1}{\omega + H - E_0}c_{\uparrow}|F\rangle \quad (1.61)$$

où E_0 est la valeur propre du fondamental et peut prendre les valeurs 0 , $-\mu$ ou $-2\mu + U$, respectivement pour un état vide, occupé ou doublement occupé. H est le hamiltonien de Hubbard de l'équation (1.27). En appliquant les opérateurs de création et de destruction sur le fondamental, on obtient :

$$2G_{\uparrow}(\omega) = \frac{1}{\omega - U + \mu} + \frac{1}{\omega + \mu} \quad (1.62)$$

où ω est une fréquence complexe. La fonction de Green du système s'écrit alors :

$$G^{-1}(\omega) = \omega - \Sigma(\omega) = \frac{\omega^2 - \omega(U - 2\mu) - \mu(U - \mu)}{\omega - U/2 + \mu} \quad (1.63)$$

ce qui conduit à la self-energie :

$$\Sigma(\omega) = \omega - \frac{\omega^2 - \omega(U - 2\mu) - \mu(U - \mu)}{\omega - U/2 + \mu} \quad (1.64)$$

Dans le cas particulier, au demi-remplissage, c'est-à-dire lorsque $\mu = U/2$ on obtient :

$$\Sigma(\omega) = \frac{\mu^2}{\omega} \quad (1.65)$$

On voit que lorsque la fréquence tend vers zéro, la self-énergie du modèle diverge, contrairement au liquide de Fermi.

1.4.4 Valeurs moyennes et fonction de Green

Dans cette sous-section, nous verrons comment calculer la valeur moyenne d'un opérateur à un corps connaissant la fonction de Green. En deuxième quantification, on peut écrire un opérateur à un corps, O , sous la forme :

$$O = \sum_{\alpha, \beta} O_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \quad (1.66)$$

où les $O_{\alpha\beta}$ sont les éléments de matrice. La valeur moyenne $\langle O \rangle$ de l'opérateur est donnée par :

$$\langle O \rangle = \sum_{\alpha, \beta} O_{\alpha\beta} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle \quad (1.67)$$

où la moyenne $\langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle$ est calculée par rapport à l'état fondamental :

$$\langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle = \langle F | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} | F \rangle \quad (1.68)$$

On peut écrire la fonction de Green de l'équation (1.52) sous sa forme générale :

$$G_{\beta\alpha}(z) = \langle F | c_{\beta} \frac{1}{z - H + E_0} c_{\alpha}^{\dagger} | F \rangle + \langle F | c_{\alpha}^{\dagger} \frac{1}{z + H - E_0} c_{\beta} | F \rangle \quad (1.69)$$

Ainsi, le théorème des résidus permet d'écrire :

$$\oint_c \frac{dz}{2\pi i} G_{\beta\alpha}(z) = \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} \rangle \quad (1.70)$$

où le contour c est le demi-cercle, dans le plan complexe, passant le long de l'axe imaginaire et entourant les pôles de la fonction de Green, situés sur l'axe réel négatif. La valeur moyenne de l'opérateur devient :

$$\langle O \rangle = \oint_c \frac{dz}{2\pi i} \text{Tr}[OG(z)] \quad (1.71)$$

Cependant, la fonction de Green se comporte comme $1/z$ quand $z \rightarrow \infty$. Ainsi, elle n'est pas bien définie quand le rayon du demi-cercle $R \rightarrow \infty$. En pratique, on fait la transformation :

$$G_{\beta\alpha}(z) \rightarrow G_{\beta\alpha}(z) - \frac{\delta_{\beta\alpha}}{z - \gamma} \quad (1.72)$$

où $\gamma > 0$. Le terme ajouté à la fonction de Green ne contribue pas aux résultats car le pôle supplémentaire est en-dehors du contour d'intégration. Néanmoins, il aide à annuler la contribution du demi-cercle, à l'intégrale, quand son rayon diverge. Par conséquent, on peut limiter l'intégration sur l'axe imaginaire. En effectuant le changement de variable $z = iz'$, pour l'axe imaginaire positif,

et $z = -iz'$ pour sa partie négative, avec la relation $G_{\beta\alpha}^*(z) = G_{\beta\alpha}(z^*)$, on obtient finalement :

$$\langle O \rangle = \sum_{\mathbf{k} \in \text{ZB}} \int_0^{+\infty} \frac{dz'}{\pi} \text{Tr}[O(\mathbf{k}) \text{Re}\{G(\mathbf{k}, z) - \frac{1}{z - \gamma}\}] \quad (1.73)$$

où ZB désigne la première zone de Brillouin. Cette dernière équation est celle utilisée dans les calculs numériques. On peut utiliser deux techniques d'intégration : l'intégration des fréquences exactes et l'intégration numérique des fréquences. Dans la première technique, on effectue l'intégration analytique sur les fréquences avant la somme sur les vecteurs d'onde. Dans la deuxième technique, on calcule la somme sur les vecteurs d'onde en fixant la fréquence et ensuite on effectue l'intégrale sur les fréquences. En pratique, c'est cette dernière technique qui est utilisée, car elle est plus rapide.

1.5 Les supraconducteurs fortement corrélés

On passe en revue, dans cette section, la supraconductivité et la théorie BCS. On discutera ensuite des supraconducteurs à haute température critique et des supraconducteurs organiques.

1.5.1 La supraconductivité

La supraconductivité constitue l'un des phénomènes physiques où la mécanique quantique se manifeste à une échelle macroscopique. Elle a été observée en 1911 par Kamerlingh Onnes et Gilles Holst alors qu'ils effectuaient des mesures sur la résistivité électrique du mercure. Ils ont découvert qu'en dessous d'une température critique, autour de 4.2 K, la résistivité électrique du mercure chutait brutalement et devenait tellement petite qu'elle n'était plus mesurable, équivalente à une conductivité infinie. Des mesures de la résistivité sur des matériaux comme le zinc, le plomb, l'aluminium etc, ont révélé le même comportement, avec des températures critiques différentes de celle du mercure.

L'état supraconducteur expulse les champs magnétiques : c'est l'effet Meissner-Ochsenfeld [24] comme illustré à la figure 1.4. L'effet Meissner-Ochsenfeld est la propriété caractéristique principale d'un supraconducteur qui peut se comprendre seulement par une résistance électrique nulle. En effet, si un matériau supraconducteur est refroidi en présence d'un champ magnétique, le champ est expulsé au moment de la transition, contrairement à un matériau non supraconducteur qui maintiendrait l'intensité du champ magnétique. Toutefois, l'état supraconducteur disparaît par application d'un champ magnétique intense.

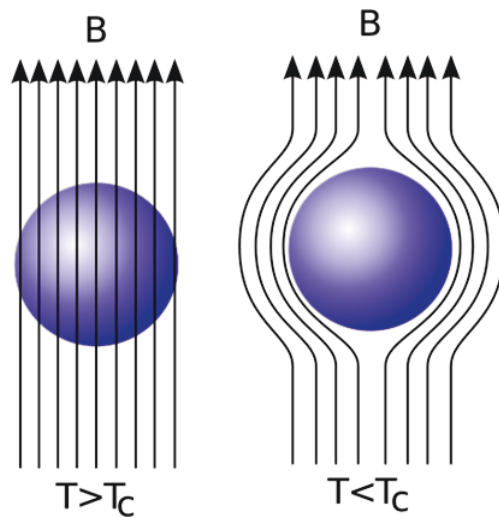


FIGURE 1.4 L'effet Meissner-Ochsenfeld. En dessous de la température critique, $T < T_c$, les lignes de flux magnétiques appliquées sont expulsées en dehors du volume, contrairement au cas $T > T_c$ où elles traversent le matériau. Figure tirée de Wikipédia.

D'un point de vue théorique, c'est seulement en 1957 que Bardeen, Cooper et Schrieffer ont réussi à mettre en place une théorie, dite de BCS [25], pour expliquer le mécanisme microscopique de la supraconductivité. La théorie BCS explique quantitativement les observations expérimentales et prédit les caractéristiques des supraconducteurs. Pour cette théorie, la supraconductivité est une conséquence de l'interaction électron-phonon qui engendre une attraction effective entre des électrons d'impulsions \mathbf{p} et $-\mathbf{p}$ et de spins opposés. Les électrons forment ainsi des états liés appelés paires de Cooper. La condensation de ces dernières conduit à un état quantique plus stable que l'état normal. Cependant, la découverte des supraconducteurs à haute température critique, ainsi que les supraconducteurs organiques ont beaucoup modifié les conceptions jusque là établies sur le mécanisme d'appariement. Dans ce qui suit, on discute de ces matériaux.

1.5.2 Les supraconducteurs à haute température critique

La supraconductivité à haute température a été découverte en 1986 par Bednorz et Müller [26] dans certains composés à base d'oxydes de cuivre. Ces matériaux ont généralement en commun des plans bidimensionnels formés par des atomes de cuivre et d'oxygène. Ces plans sont séparés par des couches plus isolantes comportant des atomes de terre rares comme le montre la figure 1.5. Ils sont constitués de plusieurs espèces chimiques, ce qui intensifie les difficultés d'identification et de compréhension des propriétés physiques universelles de la supraconductivité

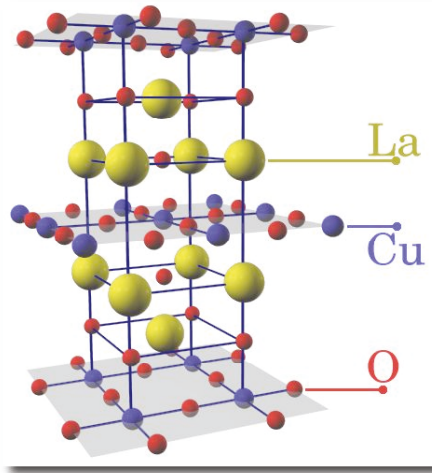


FIGURE 1.5 Structure cristallographique du composé La_2CuO_4 montrant les atomes de Cuivre, de Lanthane et d'oxygène. La supraconductivité est induite dans ce matériau par substitution des atomes de lanthane par des atomes de strontium, ce qui conduit au composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. On distingue les atomes de cuivres et d'oxygène qui forment des plans bidimensionnels de CuO où les oxygènes sont localisés entre les cuivre.

et de l'antiferromagnétisme. Néanmoins, des études théoriques et expérimentales ont montré que le paramètre d'ordre supraconducteur est de symétrie $d_{x^2-y^2}$ [27, 28]. La fonction du gap dans un supraconducteur à haute température critique de symétrie $d_{x^2-y^2}$ a la forme suivante en fonction du vecteur d'onde \mathbf{k} :

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 [\cos(k_x) - \cos(k_y)] \quad (1.74)$$

Le mécanisme conduisant à la supraconductivité et à la haute température critique dans ces composés reste toujours un sujet de recherche intense. Néanmoins, il est fort probable que l'antiferromagnétisme joue un rôle déterminant dans l'apparition de la supraconductivité. Notre hypothèse de travail est que ce mécanisme est en fonction dans un modèle aussi simple que le modèle de Hubbard à une bande, et que ce modèle comporte une phase supraconductrice qui reproduit, dans ses grandes lignes, ce qui est observé dans les matériaux supraconducteurs fortement corrélés.

Un diagramme de phase générique des cuprates à haute température critique est représenté à la figure 1.6. Le paramètre de contrôle est le dopage en porteurs de charges (électrons ou trous) À dopage nul, les cuprates sont antiferromagnétiques (région verte de la figure 1.6). Lorsque le système est dopé, la phase antiferromagnétique disparaît rapidement pour laisser place à une phase

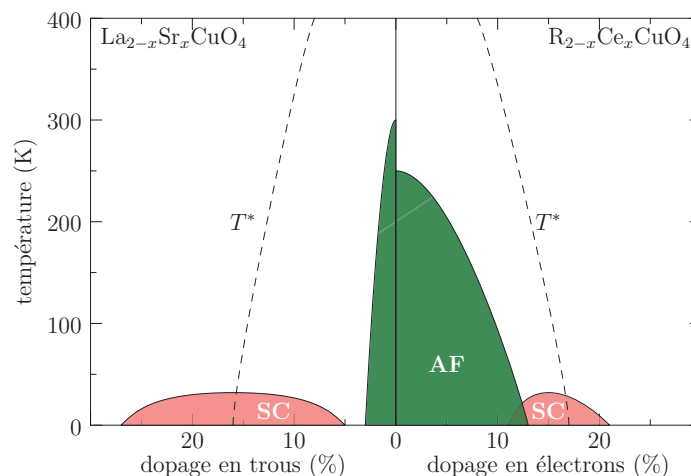


FIGURE 1.6 Diagramme de phase schématique, température versus dopage, des supraconducteurs à haute température critique $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (dopage en trous) et $\text{R}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (dopage en électrons). La supraconductivité est représentée par la couleur rose et l'antiferromagnétisme par la couleur verte. T^* est la température critique du pseudogap.

supraconductrice. La température critique supraconductrice est maximum au dopage dit optimum, correspondant au sommet d'un dôme supraconducteur. Le régime surdopé, au-dessus du dopage optimum, est caractérisé par des propriétés plus conventionnelles, où les cuprates se comportent comme des métaux faiblement corrélés. Dans le régime sous-dopé, on trouve à température finie la phase pseudogap qui alimente de nombreux débats depuis les débuts de la supraconductivité à haute température critique. Le pseudogap décrit un état où la surface de Fermi du matériau possède un gap partiel. Cette phase énigmatique fut identifiée par de nombreuses techniques [29, 30]. En plus il est important de noter que les observations faites dans cette phase défient nombres des théories modernes de la physique de la matière condensée.

La gamme de dopage dans les supraconducteurs à haute température critique diffère selon qu'ils sont dopés aux trous ou aux électrons, comme d'ailleurs le domaine d'existence de l'antiferromagnétisme. Ainsi, dans ces matériaux, la symétrie particule-trou n'est pas respectée. Compte tenu des fortes interactions magnétiques dans ces matériaux, un mécanisme basé sur la description de l'état antiferromagnétique par un état de la liaison de valence résonnante (RVB) [31] a été suggéré par Anderson. Ce mécanisme est basé sur la préférence énergétique du système à ne briser qu'un singulet au lieu de deux lors de l'introduction de deux trous dans un pavage de dimères à courte portée. Nous verrons que, dans le cas des échelles de spin dopées en trous, ce mécanisme est largement justifié puisque l'isolant de Mott dans ces systèmes quasi-unidimensionnels est un état de la liaison de valence résonnante, à la différence du réseau carré dans les cuprates.

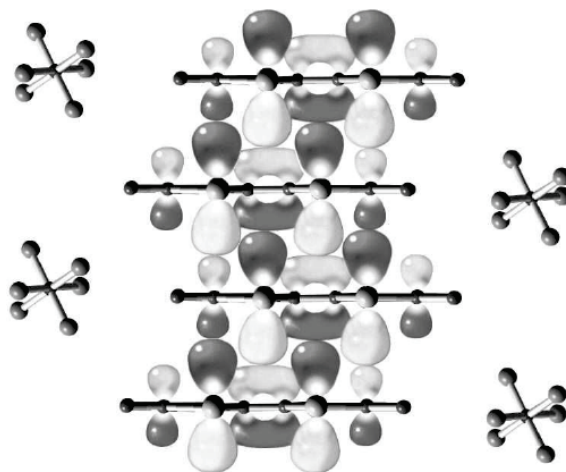


FIGURE 1.7 la structure de la famille des composés de type $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ où X est l'ion négatif. Les molécules sont rangées dans une direction et les orbitales π se recouvrent perpendiculairement au plan des molécules. D'après Bourbonnais et al. [32].

1.5.3 Les supraconducteurs organiques

La découverte des supraconducteurs organiques et de leurs propriétés marquantes [33, 34, 32] ont suscité un intérêt aussi bien dans le domaine théorique qu'expérimental. Ces composés sont formés de molécules planes empilées dans une direction unique et séparées par des ions de charges opposées. La direction d'empilement permet une conductivité maximale due aux orbitales π perpendiculaires aux plans des molécules. La figure 1.7 montre la structure de la famille des composés de type $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ ou $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ où X est l'ion de charge négative. Le diagramme de phases générique de ces composés, présenté à la figure 1.8, permet d'observer une variété de phases. Le caractère unidimensionnel, conjugué aux interactions mènent à la phase de Luttinger (LL). Une forte pression est nécessaire pour faire entrer le système dans la phase de liquide de Fermi (FL). Cependant, à basse pression, ces composés sont des isolants de Mott avec une instabilité de spin-Peierls ou antiferromagnétique, comme le montre la figure 1.8. L'instabilité de Peierls est une déformation du réseau par le système pour gagner de l'énergie électronique, en raison d'un couplage entre phonons et électrons. Dans le cas de la charge, on parle de transition de Peierls et, pour le spin, de transition de spin-Peierls.

Lorsque la pression est élevée, le système entre dans une phase supraconductrice. À la figure 1.9, on montre la mesure de la résistivité en fonction de la température du composé $(\text{TMTSF})_2(\text{PF})_6$ pour des valeurs différentes de la pression [35]. La chute de la résistivité indique l'apparition de la supraconductivité causée par l'application de la pression. La température critique forme un dôme en fonction de la pression (voir la figure 1.10). Comme dans les cuprates, le mécanisme conduisant à la

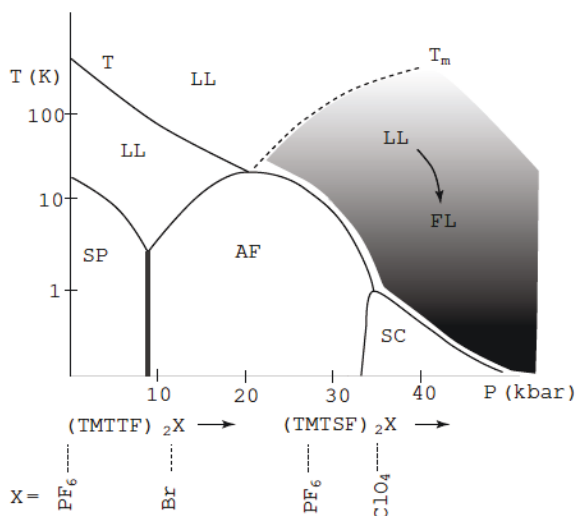


FIGURE 1.8 Diagramme de phase générique des composés typiques $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ et $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ en fonction de la pression ou de l'anion X. Différentes phases telles que le liquide de Luttinger, l'antiferromagnétisme, le liquide de Fermi et la supraconductivité peuvent apparaître en fonction de la pression. D'après Bourbonnais et al. [32].

supraconductivité et la nature du paramètre d'ordre restent des sujets de recherche intenses [33]. Cependant il est fort probable que les fluctuations de spins joueraient un rôle important [36, 37].

1.6 Les échelles de spins

Dans cette section nous aborderons la physique des composés à échelles de spins. On commencera par une étude théorique des échelles de spins et des matériaux isolants ayant la structure en échelle, ainsi que leurs propriétés électroniques. On va ensuite accorder plus d'importances aux matériaux en échelles de spins dopées en trous où un accent particulier sera mis sur leurs propriétés supraconductrices.

1.6.1 Les matériaux isolants en échelles de spins

La découverte des matériaux en échelles de spins [38] a débuté avec la famille des composés de formule chimique générale $\text{Sr}_n\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n+1}$. Les composés SrCu_2O_3 et $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ comportent des échelles à deux et trois montants respectivement, comme le montre la figure 1.11, alors que le matériau Sr_2CuO contient des chaînes de spin $\frac{1}{2}$. Ces géométries s'expliquent par la structure des plans CuO dans ces composés qui comportent des lignes de cisaillement, imposant ainsi un angle droit à la liaison Cu – O – Cu. Dans ces conditions, en plus du caractère d'isolant de Mott, le

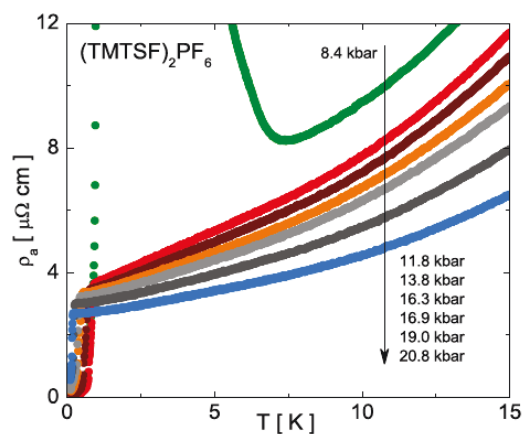


FIGURE 1.9 La mesure de la résistivité ρ_a du composé $(\text{TMTSF})_2(\text{PF})_6$ en fonction de la température pour des valeurs différentes de la pression. Figure tirée de l'article [35].

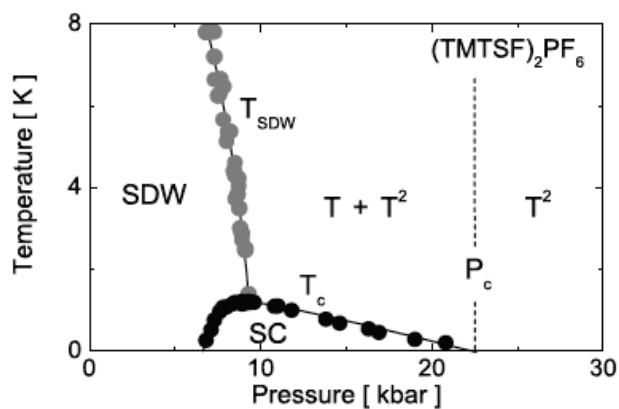


FIGURE 1.10 Diagramme de phase : la température critique en fonction de la pression critique montrant les différentes phases du composé $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$. Tirée de [35].

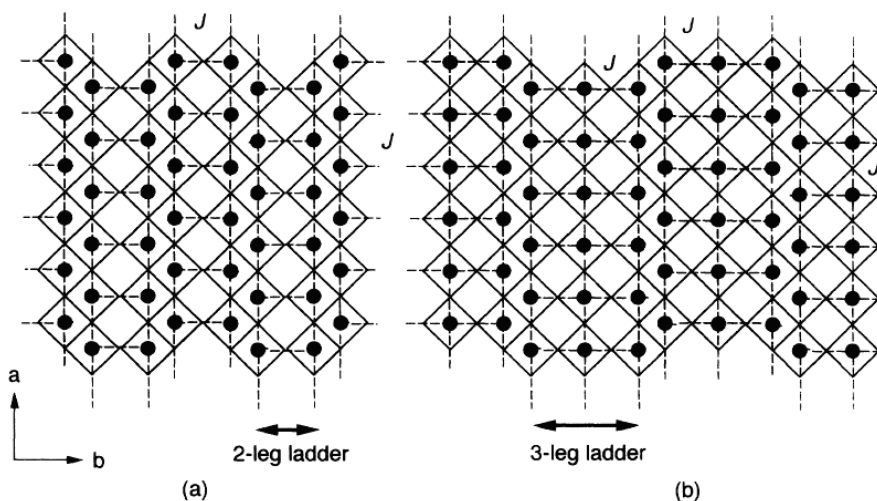


FIGURE I.11 Structure schématique des échelles Cu_2O_3 (a) et Cu_3O_5 (b) des composés SrCu_2O_3 et $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ respectivement. Les cercles indiquent les atomes de Cu^{2+} et les atomes d'oxygène sont localisés aux coins de chacun des carrés. D'après M. Azuma et al [39].

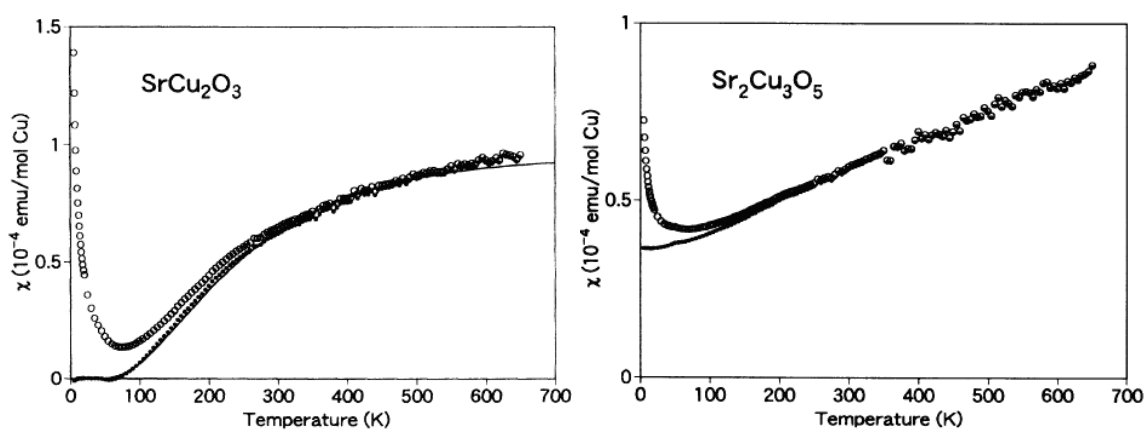


FIGURE I.12 La susceptibilité magnétique expérimentale en fonction de la température des composés SrCu_2O_3 et $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ respectivement à gauche et à droite. Les cercles représentent les données expérimentales tandis que les points sont celles après une soustraction des contributions de type loi de Curie des impuretés. La ligne continue est l'équation $\chi(T) \propto T^{-1/2} \exp(-\Delta_s/k_B T)$ [39]. Dans le cas de deux montants (SrCu_2O_3), on a un gap de spin contrairement au cas de trois montants ($\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$).

couplage magnétique entre les atomes de cuivre est moins important, comparé au cas des liaisons Cu – O – Cu alignées et souvent ferromagnétiques. On assiste donc à un couplage faible entre les échelles. Une étude expérimentale a révélé un gap de spin pour les échelles à deux montants, contrairement à celles avec trois montants (voir figure 1.12). En effet, la présence d'un gap de spin Δ_s dans le système est indiquée par une suppression exponentielle de la susceptibilité. Cette dernière suit une loi du type Arrhenius [40] :

$$\chi(T) \propto \frac{1}{\sqrt{T}} e^{(-\Delta_s/k_B T)} \quad (1.75)$$

Il est important de noter, cependant, que la susceptibilité est finie à température nulle lorsque le composé n'admet pas de gap de spin. Le gap de spin Δ_s extrait à partir de l'équation (1.75) vaut ~ 400 K. Cependant en Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) [41, 42], cette valeur est beaucoup plus grande et est de l'ordre de ~ 600 K. L'existence de gap de spin dans les échelles d'un nombre pair de montants et son absence dans le cas d'un nombre impair de montants peuvent être justifiées par le modèle de Heisenberg dont le hamiltonien est donné par :

$$H_{\text{échelle}} = \sum_i J_{\parallel} (\mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{1,i+1} + \mathbf{S}_{2,i} \cdot \mathbf{S}_{2,i+1}) + J_{\perp} \sum_i \mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{2,i} \quad (1.76)$$

où $\mathbf{S}_{1,i}$ et $\mathbf{S}_{2,i}$ sont des opérateurs de spin 1/2 localisé au site i appartenant respectivement à la première et à la deuxième chaîne de l'échelle, J_{\parallel} est l'interaction d'échange de Heisenberg le long des montants et J_{\perp} le long des barreaux. Pour justifier le gap de spin avec ce modèle, on considère une interaction le long des barreaux J_{\perp} beaucoup plus grande que celle le long des montants J_{\parallel} . Dans cette limite, l'état fondamental est formé d'un produit direct de singulets très forts sur les barreaux. Une excitation de spin est équivalente alors à la formation d'un triplet sur un barreau, coûtant ainsi une énergie J_{\perp} . Par conséquent, on forme des dimères fortement liés sur les barreaux. Cependant si J_{\parallel} est non nul, le triplet formé va disperser le long des montants selon la relation de dispersion approximative d'un système à une dimension :

$$E(k) = J_{\perp} + J_{\parallel} \cos(k) \quad (1.77)$$

Le gap de spin est calculé au minimum en $k = \pi$:

$$E(k = \pi) \quad \text{conduisant à} \quad \Delta_s = J_{\perp} - J_{\parallel} \quad (1.78)$$

de sorte que lorsque $J_{\perp} \neq 0$, le gap de spin reste fini.

Au contraire, dans un système constitué d'un nombre impair de montants, on peut toujours former des singulets sur chaque barreau, mais il restera un spin libre au sein du barreau. Ces derniers formeront approximativement une chaîne de spin 1/2 non gappée.

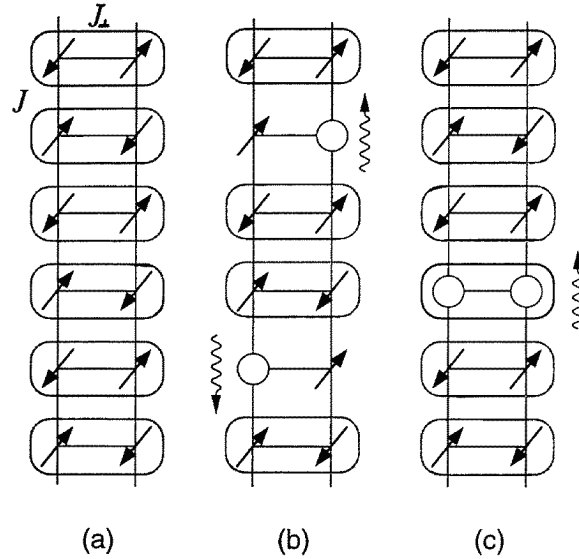


FIGURE 1.13 Représentation schématique de l'appariement des trous dans les échelles de spin dopées dans la limite $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$. (a) échelle non dopée ou isolant de Mott. (b) substitution de deux spins éloigné par deux trous brisant ainsi deux singulets ce qui coûte relativement une énergie $2J_{\perp}$. (c) substitution de deux spins sur le même montant coûtant seulement une énergie J_{\perp} au lieu de $2J_{\perp}$. On a donc une tendance d'appariement des trous dans les échelles dopées. Les flèches indiquent la dispersion des paires. D'après Hiroi [43].

1.6.2 Les échelles dopées aux trous

Le but du dopage des échelles de spins, inspiré par Dagotto et al [44, 45, 46, 47], était la réalisation du mécanisme de RVB dont l'objectif principal consistait à reproduire la supraconductivité proposée par Anderson dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique (voir la sous section 1.5.2).

En effet, en considérant le modèle t - J , décrit à la sous-section 1.1.4, dans la limite où le couplage sur les barreaux est très grand devant celui des montants, $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$, l'énergie devient minimum lorsqu'il y a un appariement de trous sur les même barreaux. Cet appariement coûterait une énergie J_{\perp} contrairement à la brisure de deux singulets correspondant à une énergie $2J_{\perp}$ (voir la figure 1.13). Ainsi l'énergie d'appariement peut être contrôlée par l'énergie magnétique J_{\perp} tout comme le gap de spin Δ_s . Dans le modèle t - J et de Hubbard, la corrélation entre appariement et gap de spin est bien vérifiée analytiquement et numériquement. Comme dans le cas des cuprates à haute température critique, le paramètre d'ordre supraconducteur des échelles dopées en trous a remarquablement une symétrie de type d [48]. Néanmoins, il est nécessaire de préciser que, dans les échelles de spins, seule une des directions est infinie, de sorte qu'on parle de type d seulement par analogie aux changement de signe d'un orbitale de symétrie d sur une plaquette élémentaire.

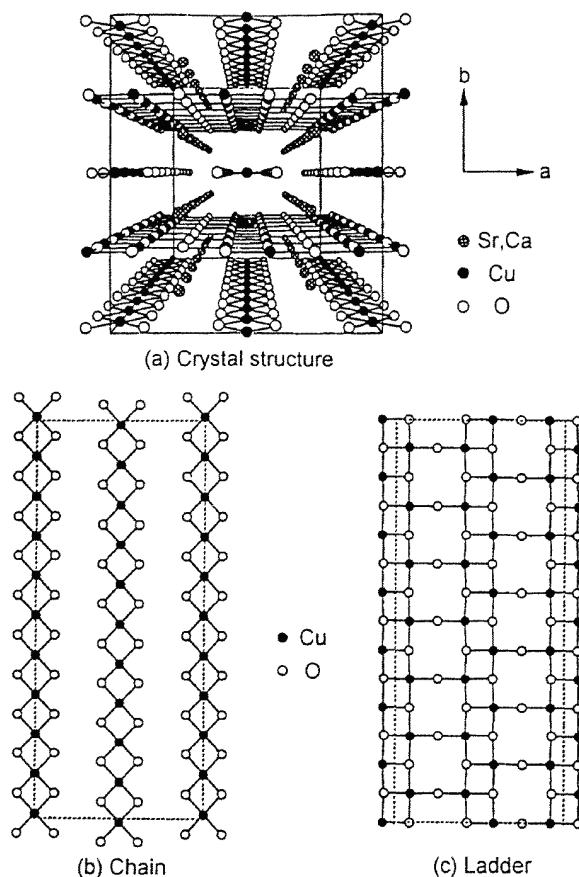


FIGURE 1.14 (a) Structure du composé $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$. Elle comporte des plans avec des chaînes de spins CuO_2 (b) et des échelles Cu_2O_3 (c) [52].

Le changement de l'énergie en présence des trous dans les échelles montre la sensibilité de ces composés au dopage. On peut ainsi changer considérablement les propriétés des échelles de spins en dopant en trous les plans de CuO . Par substitution des atomes de lanthane par des atomes de strontium, on voit que la résistivité du composé $\text{LaCuO}_{2.5}$, initialement un isolant de Mott avec un gap de spin de l'ordre de 400 K, subit une forte chute lorsque le dopage est porté à $x \sim 0.2$. Des études théoriques [49, 50] ont prédit un état supraconducteur de symétrie d en présence d'une interaction inter-échelles faible. Toutefois, des résultats expérimentaux soutiennent que $\text{LaCuO}_{2.5}$ n'est pas un supraconducteur lorsqu'il est dopé en trous [44]. En fait l'absence de la supraconductivité dans ce composé s'explique par les effets de désordre provenant de la substitution des atomes de lanthane par les atomes de strontium, un phénomène bien connu dans la théorie BCS avec les supraconducteurs non conventionnels [51].

En dehors de $\text{LaCuO}_{2.5}$, la supraconductivité a été trouvée dans le composé $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ synthétisé à partir de $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, en remplaçant les atomes de strontium par des atomes de calcium.

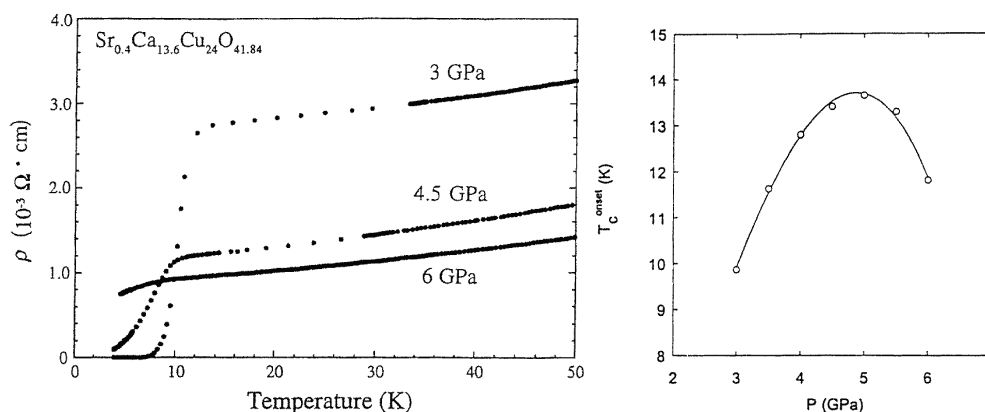


FIGURE 1.15 À gauche : mesure de la résistivité en fonction de la température pour des valeurs différentes de la pression [53]. Le dopage est porté à 13.6%. On note une chute de la résistivité à la température $T_c \simeq 10$ K lorsque la pression atteint 3 GPa . À droit : la température critique en fonction de la pression. Un dôme se forme à la pression optimale $P \simeq 5$ GPa correspondant à une température critique $T_c = 14$ K [54].

Il constitue le premier supraconducteur à base de cuivre découvert n'ayant pas une structure bidimensionnelle. Le $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ est un système quasi-unidimensionnel et appartient à la classe des métaux de transition où les électrons sont fortement corrélés. Sa structure comporte des plans de chaînes de CuO_2 et des plans d'échelles de Cu_2O_3 séparés par des chaînes de La et de Sr, comme le montre la figure 1.14. La conséquence de la réciprocité entre les degrés de liberté de spin et de charge fait que les chaînes et les échelles dans ces composés sont extrêmement sensibles aux paramètres extérieurs comme la pression, le dopage et la température. En effet, un transfert de charge s'établit entre les chaînes et les échelles. Une réécriture de la composition chimique sous la forme $(\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{O}_3)_7(\text{CuO}_2)_{10}$ montre que la structure cristallographique permet d'identifier une incommensurabilité des paramètres de la maille selon les chaînes et les échelles. Ceci a pour conséquence la distorsion des liaisons dans les sous-systèmes (chaînes et échelles) conduisant à une disposition en zigzag comme le montre la figure 1.14.

La supraconductivité dans les composés $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ apparaît à une pression très élevée entre 3 et 6 GPa et à une concentration en atomes de Ca très élevée $x \simeq 13.6$. Cependant, que le matériau est intrinsèquement dopé, c'est-à-dire, contient des trous même en absence de substitution dû à un transfert de charge qui s'établit entre les chaînes et les échelles. La température critique optimale $T_c \simeq 14$ K est faible comparée à celle des supraconducteurs à haute température critique (voir la figure 1.15). Comme dans les supraconducteurs à haute température critique, la température critique forme un dôme en fonction de la pression comme le montre la figure 1.15. L'étude de la conductivité optique à la pression ambiante permet de voir que les trous, initialement localisés sur les chaînes, se déplacent vers les échelles au fur et à mesure que la pression est appliquée et que la concentration en atomes de Ca augmente [55].

Le paramètre d'ordre supraconducteur dans le composé $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ a suscité beaucoup de questions. Les expériences sous champ magnétique semblent conduire à des résultats prometteurs. La mesure du champ critique sous pression montre que, malgré la température critique faible, la supraconductivité survit aux champs forts [56]. On note une différence considérable entre le champ critique perpendiculaire au plan des échelles et celui dans le plan de ces dernières [57]. Ces résultats permettent de conclure que la supraconductivité n'est pas uniforme selon qu'on se déplace dans la direction parallèle ou perpendiculaire des échelles. Nous verrons que nos résultats numériques sont conformes avec cette anisotropie.

En définitive, les études expérimentales sur les échelles de spins offrent des propriétés intéressantes en fonctions des paramètres de l'expérience comme la pression, la température et la concentration en atome de Ca. Elles ont permis de confirmer des prédictions théoriques tel que le gap de spin et la supraconductivité. Le composé supraconducteur $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ joue un rôle important dans la compréhension des questions plus générales sur les systèmes fortement corrélés tant sur le plan expérimental que théorique. Cependant la plupart des questions importantes comme la symétrie de l'appariement dans la phase supraconductrice ne font pas l'objet d'un consensus. C'est ainsi que nous proposons dans ce document une étude numérique de la supraconductivité à partir d'un modèle théorique, dit de treillis, décrivant le matériau $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$. Nous verrons que le paramètre d'ordre supraconducteur est de type d comme dans les échelles. Cependant, la supraconductivité est chirale, c'est-à-dire qu'elle brise l'invariance par inversion du temps même en absence de champ magnétique. Un autre projet étudié dans ce document est la supraconductivité sur le réseau du graphène. Dans ce qui suit, on passe en revue les possibilités de supraconductivité du graphène.

1.7 Possibilité de supraconductivité dans le graphène

Le graphène est un matériau qui présente plusieurs propriétés remarquables : caractère relativiste des électrons au niveau de Fermi, bipolarité, anomalie de l'effet Hall quantique [58] etc. Dans cette liste, la supraconductivité est absente et reste un sujet de recherche intense. En effet, le graphène à l'état supraconducteur serait utilisable dans la fabrication de transistors supraconducteurs à l'échelle du nanomètre, de refroidisseurs à l'état solide [59, 60, 61] etc.

Depuis sa découverte, plusieurs études ont envisagé la possibilité de supraconductivité dans le graphène. Néanmoins, ces études restent en majorité théoriques, compte tenu des difficultés de réalisation de l'expérience sur une couche unique de graphène. En déposant des atomes de calcium

sur une couche de graphène, Profeta et al. [62] ont montré, par la théorie de la densité fonctionnelle, qu'on peut induire la supraconductivité en augmentant le couplage électron-phonon :

$$\lambda = \frac{N(0)D}{M\omega_{ph}^2} \quad (1.79)$$

où $N(0)$ est la densité d'état au niveau de Fermi, D le potentiel de déformation, M la masse atomique et ω_{ph} la fréquence des phonons. Ils ont montré que λ peut atteindre 0.68 cm^{-1} . La température critique s'obtient en utilisant la formule de McMillan [63] :

$$T_c = 20.6 \exp\left(-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - 0.14(1 + 0.62\lambda)}\right) \quad (1.80)$$

Cette équation conduit à une température critique de 11.5 K. Cependant, un mécanisme basé sur les interactions électron-électron peut être aussi à l'origine de la supraconductivité. Dans ce sens, la méthode de groupe de renormalisation conduit à la possibilité d'un singulet de symétrie $d + id$ [64]. Néanmoins, des études par la méthode de Monte-Carlo prévoient un triplet $p + ip$ [65]. L'étude du modèle RVB, décrivant le graphite, indique aussi la possibilité de supraconductivité dans ce système [66]. Du point de vue expérimental, la supraconductivité a été découverte dans des matériaux comme le C_6Yb et le C_6Ca , qui sont formés de plusieurs couches de graphène [67].

1.8 Modèle de Hubbard sur le réseau du graphène

Dans ce document, deux des trois projets portent sur des systèmes avec la structure en nid d'abeille. Ainsi, dans la suite, nous allons introduire théoriquement ce réseau. On verra la structure cristallographique et la bande électronique.

1.8.1 Structure cristallographique et bande électronique.

Le réseau en nid d'abeille, ou réseau du graphène, est un réseau de Bravais triangulaire en deux dimensions, assorti d'une maille élémentaire comportant deux points comme illustré à la figure 1.16. Les vecteurs \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 et \mathbf{e}_3 , représentés en rouge dans la figure, relient les sites premiers voisins, et dans la base cartésienne, sont données par :

$$\mathbf{e}_1 = a(1, 0) \quad \mathbf{e}_2 = \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3}) \quad \mathbf{e}_3 = \frac{a}{2}(-1, -\sqrt{3}) \quad (1.81)$$

où a est le pas du réseau. On obtient ainsi les coordonnées des autres sites du réseau par une combinaison linéaire de ces vecteurs. Le réseau peut être généré par les deux vecteurs de base \mathbf{a}_1 et

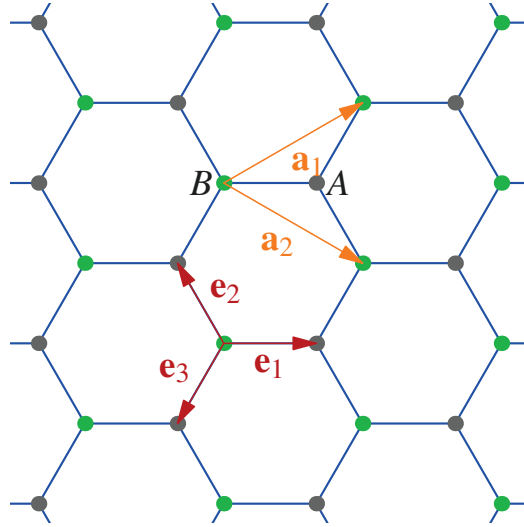


FIGURE 1.16 Réseau en nid d'abeille avec les deux sous réseaux A et B en couleur différente. Les vecteurs \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 , \mathbf{e}_3 sont les vecteurs de premiers voisins. Les deux vecteurs de base du réseau sont notés par \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2

\mathbf{a}_2 , représentés en orange dans la figure 1.16. Dans la base cartésienne, on peut écrire :

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 3 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (1.82)$$

Les deux différents sites du motif primitif que comporte le réseau sont dénotés A et B , respectivement représentés en points noirs et verts à la figure 1.16. On associe au réseau en nid d'abeille un réseau réciproque, généré par les vecteurs de base :

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{3'} \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{3'} - \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (1.83)$$

qui forment entre eux un angle de 120° . La première zone de Brillouin de ce réseau réciproque est un hexagone, comme illustré à la figure 1.17. Elle comporte des points de haute symétrie Γ , \mathbf{M} , \mathbf{K} et \mathbf{K}' . Les différents points \mathbf{K} et \mathbf{K}' situés aux coins de l'hexagone (voir figure 1.17) sont généralement appelés les points de Dirac. Dans l'espace réciproque, leurs coordonnées sont données par :

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{3'} \frac{1}{3\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{3'} - \frac{1}{3\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (1.84)$$

Dans l'espace direct, les sites A et B ne peuvent pas être joints par les vecteurs de translation du réseau \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 . La même situation se présente pour les points \mathbf{K} et \mathbf{K}' de la première zone de Brillouin, c'est-à-dire qu'il est impossible de passer du point \mathbf{K} au point \mathbf{K}' en se servant des vecteurs de base du réseau réciproque \mathbf{b}_1 et \mathbf{b}_2 . En conclusion, les vecteurs d'onde associés à ces

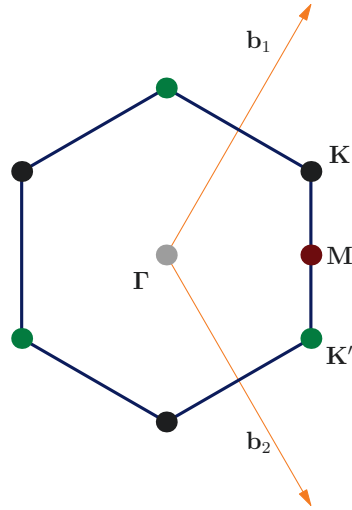


FIGURE 1.17 Zone de Brillouin du réseau en nid d'abeille. Les points Γ , M , K et K' sont des points de haute symétrie. \mathbf{b}_1 et \mathbf{b}_2 sont les vecteurs de base dans l'espace réciproque.

points correspondent à des situations physiques différentes : trois des sommets de l'hexagone sont K , trois autres sont K' et $K = -K'$.

En deuxième quantification, le hamiltonien décrivant le saut des électrons dans un réseau en nid d'abeille prend la forme :

$$H = -t \sum_{\mathbf{r} \in A, \sigma, j} \left(c_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r} + \mathbf{e}_j, \sigma} + \text{c.h.} \right) \quad (1.85)$$

où $c_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger}$ et $c_{\mathbf{r}, \sigma}$ sont respectivement les opérateurs de création et de destruction d'un électron de spin σ localisé au site \mathbf{r} . La constante t est l'intégrale de saut entre plus proches voisins. En appliquant la transformation de Fourier :

$$c_{\mathbf{r}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (1.86)$$

où N_m est le nombre total de mailles élémentaires, le hamiltonien (1.85) devient :

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \gamma(\mathbf{k}) \\ \gamma^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (1.87)$$

où la fonction $\gamma(\mathbf{k})$ est donnée par :

$$\gamma(\mathbf{k}) = -t \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_j} \quad (1.88)$$

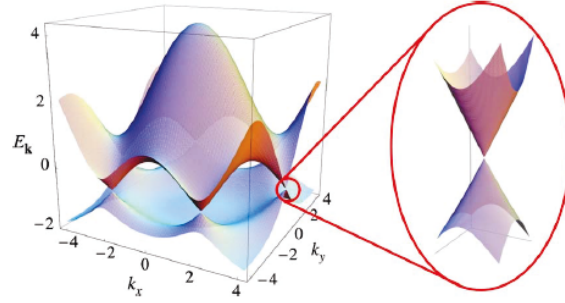


FIGURE 1.18 La relation de dispersion électronique, $E(\mathbf{k})$, du réseau en nid d'abeille en fonction du vecteur d'onde \mathbf{k} . À gauche, le spectre et à droite, un zoom au point de Dirac. Les deux bandes sont dégénérées aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}' [68].

Le calcul de la relation de dispersion revient maintenant à diagonaliser une matrice 2×2 . On obtient deux valeurs propres $E_{\pm}(\mathbf{k})$ associées au vecteur d'onde \mathbf{k} :

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm|\gamma(\mathbf{k})| \quad (1.89)$$

On obtient alors deux bandes symétriques représentées sur la figure 1.18. La bande supérieure est la bande de conduction et la bande inférieure la bande de valence. L'énergie s'annule aux six coins de la première zone de Brillouin. Les deux bandes sont donc dégénérées en ces points particuliers (voir la figure 1.18 à droite). Le nombre d'états disponibles dans ces deux bandes est égal au nombre de mailles élémentaires dans le cristal multiplié par deux puisque l'électron possède un spin $\pm 1/2$. Dans ce réseau, la surface de Fermi se réduit à six points au demi-remplissage, dont deux seulement, \mathbf{K} et \mathbf{K}' , sont des points inéquivalents du réseau réciproque.

En présence des interactions de Coulomb, le hamiltonien de Hubbard du réseau en nid d'abeille s'écrit :

$$H = -t \sum_{\mathbf{r} \in A, \sigma, j} \left(c_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r} + \mathbf{e}_j, \sigma} + \text{H.c} \right) - \mu \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} + U \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}, \uparrow} n_{\mathbf{r}, \downarrow} + V \sum_{\mathbf{r} \in A, j} n_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r} + \mathbf{e}_j} \quad (1.90)$$

où μ est le potentiel chimique, il permet d'ajuster le nombre de particules dans le système dans l'étude de la supraconductivité et U et V sont respectivement ceux définis dans les expressions (1.17) et (1.28).

RI	symbole	opérateurs
A_1	s	$\hat{\Delta}_s = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} + S_{2,\mathbf{r}} + S_{3,\mathbf{r}})$
B_1	f	$\hat{\Delta}_f = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} + T_{2,\mathbf{r}} + T_{3,\mathbf{r}})$
E_1	d	$\hat{\Delta}_{d,1} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} - S_{2,\mathbf{r}})$ $\hat{\Delta}_{d,2} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} - S_{3,\mathbf{r}})$
E_2	p	$\hat{\Delta}_{p,1} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} - T_{2,\mathbf{r}})$ $\hat{\Delta}_{p,2} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} - T_{3,\mathbf{r}})$
représentations chirales		
E_1	$d + id$	$\hat{\Delta}_{d+id} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} + e^{2\pi i/3} S_{2,\mathbf{r}} + e^{4\pi i/3} S_{3,\mathbf{r}})$
	$d - id$	$\hat{\Delta}_{d-id} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} + e^{-2\pi i/3} S_{2,\mathbf{r}} + e^{-4\pi i/3} S_{3,\mathbf{r}})$
E_2	$p + ip$	$\hat{\Delta}_{p+ip} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} + e^{2\pi i/3} T_{2,\mathbf{r}} + e^{4\pi i/3} T_{3,\mathbf{r}})$
	$p - ip$	$\hat{\Delta}_{p-ip} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} + e^{-2\pi i/3} T_{2,\mathbf{r}} + e^{-4\pi i/3} T_{3,\mathbf{r}})$

TABLE 1.1 Les représentations irréductibles (RI) du groupe ponctuel D_{6h} associées aux opérateurs d'appariement définis aux premiers voisins [69].

1.8.2 Représentations irréductibles et paramètres d'ordre supraconducteur

Cette sous-section est consacrée à l'analyse des représentations irréductibles du groupe ponctuel du réseau en nid d'abeille, ainsi que des paramètres d'ordre supraconducteurs possibles. Ces représentations irréductibles définissent en quelque sorte les différentes symétries possibles du paramètre d'ordre supraconducteur.

Dans l'appariement des paires de Cooper, l'un des électrons est confiné à la surface de Fermi centrée en \mathbf{K} et l'autre électron, à celle centrée en \mathbf{K}' . Par conséquent, une analyse du point de symétrie du cristal doit inclure celui du réseau en entier qui, pour le réseau en nid d'abeille, est le groupe ponctuel D_{6h} où la direction $(0z)$ est exclue. Nous nous limiterons ici aux appariements entre spins dont le nombre quantique magnétique total est nul, c'est-à-dire les deux spins qui forment la paire de Cooper ont des orientations opposées.

Les différentes représentations irréductibles et les types de symétries correspondants sont résumées dans le tableau 1.1. Les opérateurs d'appariement de singulet $S_{i,\mathbf{r}}$ et de triplet $T_{i,\mathbf{r}}$ sont donnés par :

RI	symbole	fonctions
A_1	s	$f_s(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3}$
B_1	f	$f_f(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3}$
E_1	d	$f_{d,1}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}$ $f_{d,2}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3}$
E_2	p	$f_{p,1}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2}$ $f_{p,2}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3}$
représentations chirales		
E_1	$d + id$	$f_{d+id}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2+2\pi i/3} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3+4\pi i/3}$
	$d - id$	$f_{d-id}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2-2\pi i/3} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3-4\pi i/3}$
E_2	$p + ip$	$f_{p+ip}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2+2\pi i/3} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3+4\pi i/3}$
	$p - ip$	$f_{p-ip}(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2-2\pi i/3} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_3-4\pi i/3}$

TABLE 1.2 Les représentations irréductibles (RI) du groupe ponctuel D_{6h} et les fonctions associées. Les vecteurs $\mathbf{r}_1 = \mathbf{e}_1$, $\mathbf{r}_2 = \mathbf{e}_2$, $\mathbf{r}_3 = \mathbf{e}_3$ sont les vecteurs de premiers voisins.

$$\begin{aligned}
S_{i,\mathbf{r}} &= c_{\mathbf{r},\uparrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\downarrow} - c_{\mathbf{r},\downarrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\uparrow} \\
T_{i,\mathbf{r}} &= c_{\mathbf{r},\uparrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\downarrow} + c_{\mathbf{r},\downarrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\uparrow}
\end{aligned}
\tag{1.91}$$

Les représentations irréductibles A_1 et B_1 conduisent respectivement à un singulet de type s étendu et un triplet de type f , qui ont des composantes sur les directions \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 et \mathbf{e}_3 . Cependant, les représentations irréductibles E_1 et E_2 sont de dimension deux, et une de leurs composantes donnent respectivement un singulet d et un triplet p définis seulement sur deux des trois liens d'un hexagone. Ces représentation en deux dimensions permettent d'avoir des représentations complexes $d + id$ et $p + ip$. Le tableau 1.2 donne les fonctions de base des différentes représentations irréductibles.

L'un des trois projets étudiés dans ce document porte sur les phases du modèle de Kitaev-Hubbard. Dans ce qui suit, nous allons motiver ce modèle et décrire les nouvelles phases de liquides de spins.

1.9 Frustration et liquides de spins algébriques : modèle de Kitaev-Hubbard

Les isolants sont des systèmes où les électrons restent localisés au voisinage des sites atomiques mais demeurent actifs via leur spin et l'interaction d'échange. Cette dernière se manifeste généralement entre les électrons de sites voisins. Heisenberg a décrit ces systèmes par un hamiltonien de spin effectif de la forme :

$$H_{\text{échange}} = \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.92)$$

où \mathbf{S}_i est l'opérateur de spin 1/2 au site i et J_{ij} l'interaction d'échange entre les sites i et j . Un J_{ij} négatif pousse le système vers un ordre ferromagnétique et, dans le cas contraire, vers un ordre antiferromagnétique. Dans certains systèmes, comme le modèle de Heisenberg antiferromagnétique sur le réseau de Kagomé [70, 71, 72], la frustration peut mener à des états non ordonnés qui forment en général des états RVB : on parle d'une phase de liquide de spin.

Les phases de liquide de spins, en général, sont essentiellement dues aux fluctuations quantiques qui s'opposent à l'établissement de l'ordre magnétique à longue portée, même à température nulle. Dans ces phases, les excitations de spin 1/2, appelées spinons, sont non confinées. On peut distinguer plusieurs types de liquide de spins selon qu'il existe ou non un gap d'énergie. Des calculs théoriques ont montré que, dans un liquide de spins gappé, les corrélations spin-spin décroissent exponentiellement avec la distance, ceci même à température nulle.

Cependant, dans un liquide de spins sans gap d'excitations, on peut démontrer que les corrélations décroissent selon une loi de puissance à $T = 0$ [73] : on parle alors de liquide de spins algébrique. Cette phase présente une susceptibilité magnétique linéaire en température et une chaleur spécifique en T^2 qui dépend du champ magnétique appliqué [74, 75, 76].

Le modèle de Kitaev-Hubbard est le premier modèle de fermions en interactions dans lequel la phase de liquide de spins algébrique a été réalisée [77]. Ce modèle est défini sur le réseau du graphène. Un terme de saut t' , dépendant du spin, joue le rôle de la frustration et est en grande partie responsable de l'apparition de la phase de liquide de spin algébrique. Ce modèle est physiquement réalisable dans des réseaux optiques d'atomes froids. Au demi-remplissage et dans la limite de couplage fort, ce modèle est une interpolation entre le modèle de Heisenberg antiferromagnétique et le modèle de Kitaev utilisé en information quantique. Ainsi, dans une certaine limite, il pourrait supporter des calculs quantiques topologiques.

Chapitre 2

Méthodologie

L'étude de la transition métal-isolant (ou transition de Mott) [78] et la découverte des supraconducteurs à haute température critique [26] ont suscité beaucoup de recherches sur les systèmes d'électrons fortement corrélés. La nature des interactions électron-électron est souvent complexe et il n'est pas toujours facile de construire des modèles microscopiques capables de décrire de façon réaliste ces interactions. Toutefois, il existe de nombreuses situations où ces modèles microscopiques, tels que le modèle de Hubbard, le modèle t - J , etc. peuvent être justifiés. Il suffit alors d'en faire l'étude pour déterminer les propriétés du système. Cependant, la résolution analytique du hamiltonien de ces modèles est limitée seulement aux systèmes très simples. Par conséquent, nous avons toujours recours aux méthodes numériques pour résoudre le hamiltonien du modèle. Parmi ces méthodes numériques, on peut citer la méthode de Monte-Carlo, la méthode de Monte-Carlo à temps continu et les méthodes d'amas quantiques où des approximations basées sur la théorie des perturbations sont nécessaires. Ce chapitre est consacré à la description des méthodes d'amas quantiques, utilisées dans ce document pour solutionner approximativement le modèle de Hubbard. Cependant, pour introduire ces méthodes, on discutera d'abord des méthodes directes.

Les méthodes numériques directes se basent principalement sur deux moteurs : la diagonalisation exacte (ED) [79, 80, 81, 82, 83] et les simulations Monte-Carlo [84, 85, 86, 87, 87, 88, 89]. Comme la dimension de l'espace de Hilbert augmente d'une manière exponentielle avec la taille du système, les systèmes étudiés avec la diagonalisation exacte (ED) sont limités à un petit nombre de sites, généralement inférieur à vingt. Cette contrainte provoque des effets de taille finie d'autant plus nuisibles lorsqu'on s'intéresse aux fluctuations de basse énergie ou de grande longueur d'onde. La diagonalisation exacte peut être utilisée avec des fréquences complexes ou réelles. De plus, il n'y a pas de problème de signe. Contrairement à la méthode de diagonalisation exacte, les simulations Monte-Carlo permettent de traiter des systèmes de plus grandes tailles, mais au prix d'une erreur statistique. Le calcul des diverses quantités doit se faire par échantillonnage statistique à l'aide de

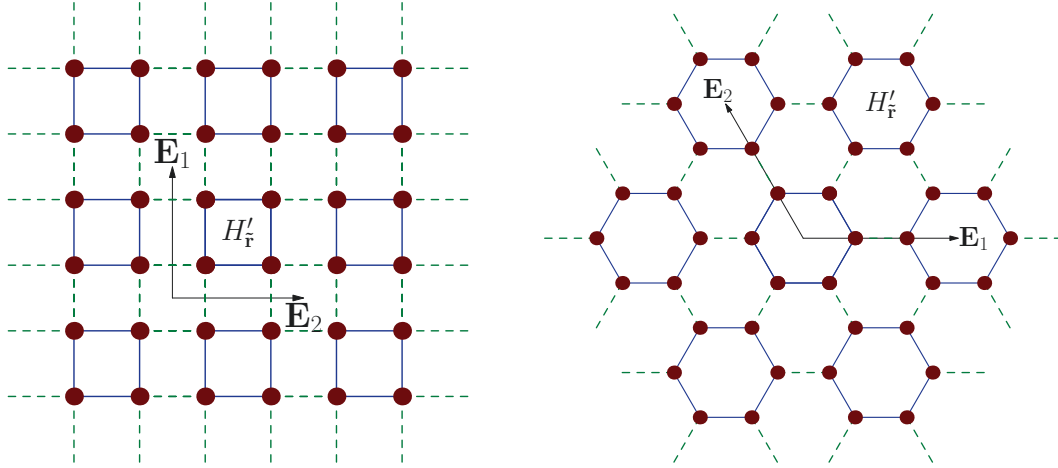


FIGURE 2.1 Des amas de quatre et de six sites intégrés respectivement dans un réseau carré (à gauche) et hexagonal (à droite). \mathbf{E}_1 et \mathbf{E}_2 sont les vecteurs de base du super-réseau définissant les amas. $H'_\tilde{\mathbf{r}}$ est le hamiltonien d'un amas à la position $\tilde{\mathbf{r}}$

l'algorithme de Métropolis. Dans cette méthode de Monte-Carlo, en plus du problème de signe, l'obtention du poids spectral en fonction de la fréquence doit se faire par prolongement analytique [90, 91].

Les méthodes d'amas quantiques sont proches des méthodes numériques directes, mais considèrent plutôt des amas quantiques avec un nombre fini de sites. Ainsi comme les méthodes directes, les effets de corrélation à courte portée sont pris en compte. Cependant les brisures de symétrie peuvent apparaître au niveau de l'amas. Les méthodes d'amas quantiques sont : l'approximation de l'amas variationnel (VCA)[92, 93, 94, 95], le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) [96, 97, 98, 99] et l'approximation de l'impureté dynamique sur amas (CDIA). Avant de décrire ces méthodes, on présente d'abord la théorie des perturbations inter amas (CPT)[100, 101, 101, 102, 103] et la diagonalisation exacte.

2.1 La théorie des perturbations inter amas

La théorie des perturbations inter amas (CPT) est une technique numérique pour calculer principalement la fonction de Green approchée d'un modèle de Hubbard. Elle est exacte dans les limites de couplage faible et de couplage fort et fournit une approximation de la fonction spectrale à tous les vecteurs d'onde. Elle relie directement la théorie et l'expérience, car elle fait des prédictions sur le poids spectral observable en ARPES. C'est aussi un prérequis de la VCA et de la CDMFT. La théorie des perturbations inter amas débute par une subdivision du réseau original en plusieurs

amas identiques comme démontre la Fig 2.1 où \mathbf{E}_1 et \mathbf{E}_2 sont les vecteurs de base du super-réseau. Le hamiltonien H du système s'écrit alors de la forme :

$$H = H' + V \quad (2.1)$$

Dans cette équation, H' est le hamiltonien total des amas, et est défini par :

$$H' = \sum_{\mathbf{r}} H'_{\mathbf{r}} \quad (2.2)$$

où $H'_{\mathbf{r}}$ est le hamiltonien d'un amas se trouvant à la position \mathbf{r} . Le deuxième terme V de l'équation (2.1) représente la matrice inter amas

L'idée de base de la théorie des perturbations inter amas consiste donc à choisir des amas assez petits pour pouvoir diagonaliser exactement leur hamiltonien $H_{\mathbf{r}}$ et obtenir ainsi la fonction de Green exacte à une particule correspondante. Le terme inter amas, V doit être traité par la théorie des perturbations. D'après la théorie des perturbations de couplage fort [18, 19, 104, 105, 106], la fonction de Green du réseau $\mathbf{G}(\omega)$ s'exprime en fonction de la fonction de Green exacte de l'amas $\mathbf{G}'(\omega)$ et du terme inter amas. Sous forme matricielle, on écrit :

$$\mathbf{G}^{-1}(\omega) = \mathbf{G}'^{-1}(\omega) - \mathbf{V} \quad (2.3)$$

$\mathbf{G}'(\omega)$ est une matrice diagonale par bloc, c'est-à-dire qu'elle ne comporte pas d'éléments de matrice entre des amas différents :

$$\mathbf{G}'_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(\omega) \propto \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \quad (2.4)$$

L'invariance par translation du super-réseau permet d'écrire les éléments de matrice de \mathbf{V} et \mathbf{G} en fonction d'un vecteur d'onde $\tilde{\mathbf{q}}$ de la zone de Brillouin du super-réseau Γ . Par exemple, pour \mathbf{G} , on peut écrire :

$$\mathbf{G}_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(\omega) = \sum_{\tilde{\mathbf{q}}} G_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}(\tilde{\mathbf{q}}, \omega) e^{i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (2.5)$$

Dans cette représentation, l'équation (2.3) donne la fonction de Green de la théorie des perturbations inter amas CPT :

$$\mathbf{G}_{\text{CPT}}^{-1}(\tilde{\mathbf{q}}, \omega) = \mathbf{G}'^{-1}(\omega) - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{q}}) \quad (2.6)$$

Les matrices de l'équation (2.6) sont des matrices de $L \times L$ où L est le nombre de site de l'amas.

2.1.1 Fonction de Green CPT périodique

La fonction de Green (2.6) est utilisée pour le calcul des valeurs moyennes. Cependant, une fonction de Green périodique est nécessaire pour l'évaluation du poids spectral. Dans ce qui suit, on montre comment on obtient la fonction de Green CPT périodique. La fonction de Green $\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{q}}, \omega)$ de l'équation (2.6) est dans une représentation mixte, c'est-à-dire elle contient des indices dans l'espace direct pour l'amas et le vecteur $\tilde{\mathbf{q}} \in \Gamma$. Ainsi, il est préférable de travailler dans la représentation des vecteurs d'onde. Il est important de noter que la théorie des perturbations inter amas brise directement la symétrie par translation du réseau original. Cependant, au niveau du super-réseau, Γ , cette symétrie est évidemment conservée. Par conséquent, la fonction de Green, de l'équation (2.3), doit dépendre de deux vecteurs d'onde \mathbf{k} et \mathbf{k}' différents et appartenant à la zone de Brillouin. La transformée de Fourier de la fonction \mathbf{G} s'écrit :

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{L}{N_r} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}'}} G_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}(\omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R})} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\tilde{\mathbf{r}'} + \mathbf{R}')} \quad (2.7)$$

où \mathbf{R} et \mathbf{R}' sont les positions des sites de l'amas, N_r le nombre de sites du super-réseau. En utilisant l'équation (2.5), l'expression (2.7) devient :

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{L}{N_r^2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}'}} \sum_{\tilde{\mathbf{q}}} G_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{q}}, \omega) e^{i\tilde{\mathbf{q}} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}'})} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R})} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\tilde{\mathbf{r}'} + \mathbf{R}')} \quad (2.8)$$

L'évaluation de la somme sur les positions des amas donne :

$$\frac{L^2}{N_r^2} \sum_{\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{\mathbf{r}'}} e^{i\tilde{\mathbf{r}} \cdot (\tilde{\mathbf{q}} - \mathbf{k})} e^{i\tilde{\mathbf{r}'} \cdot (\tilde{\mathbf{q}} - \mathbf{k}')} = \Delta_{\Gamma}(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{q}}) \Delta_{\Gamma}(\mathbf{k}' - \tilde{\mathbf{q}}) \quad (2.9)$$

où $\Delta_{\Gamma}(\mathbf{k})$ est la fonction de Laue :

$$\Delta_{\Gamma}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{K} \in \Gamma^*} \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{K}} \quad (2.10)$$

En utilisant cette équation, on réécrit l'équation (2.8) sous la forme :

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\tilde{\mathbf{q}}} G_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{q}}, \omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}'} \Delta_{\Gamma}(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{q}}) \Delta_{\Gamma}(\mathbf{k}' - \tilde{\mathbf{q}}) \quad (2.11)$$

On décompose les vecteurs d'onde \mathbf{k} et \mathbf{k}' d'une façon unique en écrivant (voir Fig : 2.2) :

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}} \quad \text{et} \quad \mathbf{k}' = \mathbf{K}' + \tilde{\mathbf{k}}' \quad (2.12)$$

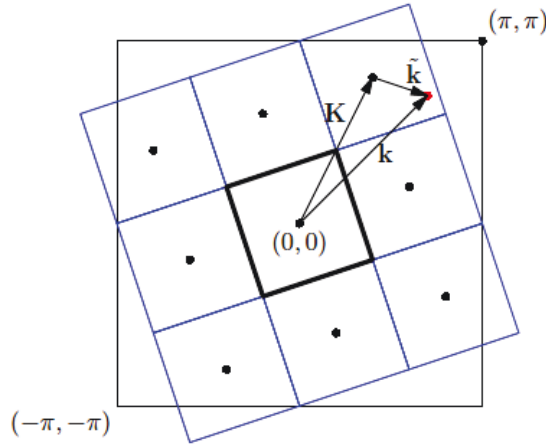


FIGURE 2.2 Décomposition $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$ où \mathbf{K} appartient au super-réseau Γ et $\tilde{\mathbf{k}}$ au super-réseau réciproque Γ^* . [107]

où $\mathbf{K}, \mathbf{K}' \in \Gamma$ et $\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}' \in \Gamma^*$. Dans la définition de l'équation (2.5), compte tenu de l'invariance par translation du vecteur $\tilde{\mathbf{q}}$ par un élément du super-réseau réciproque, tel que $\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}$, nous avons :

$$\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}', \omega) = \mathbf{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) \quad \text{de la même façon} \quad \mathbf{V}(\mathbf{k}) = \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (2.13)$$

À partir des équations (2.11), (2.12) et (2.13), on a :

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} G_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) e^{-i\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{R}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}' \cdot \mathbf{R}'} \Delta_{\Gamma}(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}') \quad (2.14)$$

La décomposition unique des vecteurs de l'équation (2.12) a pour conséquence l'égalité :

$$\Delta_{\Gamma}(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}') = \sum_{s=1}^L \delta_{\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}' + \mathbf{q}_s} \quad (2.15)$$

Ainsi l'expression (2.14) devient :

$$\mathbf{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{s=1}^L \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q}_s) G_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}'} \quad (2.16)$$

Le vecteur \mathbf{q}_s appartient à la fois au réseau réciproque Γ^* et à la zone de Brillouin du réseau original. En pratique, on retient seulement les éléments diagonaux de l'équation (2.15). On peut montrer que si $\mathbf{q}_s \neq 0$ le poids spectral comporte aussi bien des valeurs négatives que positives, cependant la somme de leur contribution est nulle. En se servant de l'équation (2.13), on obtient la

fonction de Green périodique :

$$\mathbf{G}_{\text{per}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} G_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \quad (2.17)$$

En pratique, on s'intéressera plutôt au poids spectral $A(\omega, \mathbf{k})$, déduit de la fonction de Green de l'équation (2.17). Il s'exprime de la manière suivante :

$$\mathbf{A}(\omega, \mathbf{k}) = -2 \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} \mathbf{G}_{\text{per}}(\mathbf{k}, \omega + i\eta) \quad (2.18)$$

où η est un paramètre infinitésimal positif.

L'un des succès de la CPT est l'accord avec les observations ARPES dans les cuprates. En effet, la fonction spectrale obtenue avec la CPT au niveau de Fermi décrit en grandes parties les résultats obtenus avec ARPES. On montre à la figure 2.3 un exemple d'accord entre les résultats numériques et expérimentaux, aussi bien du côté dopé aux trous (à droite) qu'aux électrons (à gauche).

La théorie des perturbations inter amas étudiée dans la sous-section précédente est limitée si nous nous intéressons aux systèmes où une symétrie est brisée spontanément. Le traitement de ces derniers demande un principe variationnel absent dans la CPT. Dans les sous-sections suivantes, nous allons nous intéresser à d'autres méthodes numériques liées à la CPT et qui incluent ce principe variationnel. Cependant avant de discuter ces méthodes, nous allons montrer comment $\mathbf{G}'(\omega)$ s'obtient numériquement par la diagonalisation exacte.

2.2 La diagonalisation exacte

Bien que les méthodes d'amas quantiques ne soient pas spécifiques à un solveur donné, nous discuterons dans cette section de la diagonalisation exacte que nous avons utilisée. Dans ce document, nous nous sommes intéressés, à la supraconductivité à température nulle, ce qui justifie notre choix porté sur la diagonalisation exacte. C'est un outil puissant qui permet de calculer l'état fondamental $|F\rangle$ et la fonction de Green de l'amas. Ces derniers doivent être calculés d'une manière itérative en utilisant l'algorithme de Lanczos [111] ou l'algorithme de Lanczos de bande [112]. L'idée de base de la diagonalisation exacte consiste à représenter le hamiltonien H de l'équation (1.18) dans un sous-espace de petite dimension qui contient $|F\rangle$.

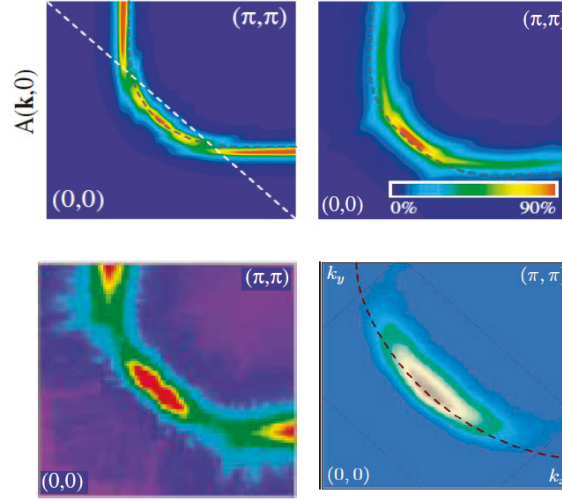


FIGURE 2.3 En haut : fonction spectrale $A(\mathbf{k}, \omega)$ au niveau de Fermi du modèle de Hubbard sur un réseau carré calculée par la CPT pour un amas de douze sites [108]. À droite : côté dopé aux trous à $U = 8t$, $x = 0.17$. À gauche : côté dopé aux électrons à $U = 4t$, $x = 0.17$ où x est le dopage. Les amplitudes de saut aux premiers, deuxièmes et troisièmes voisins sont respectivement 1, -0.3 et 0.2. En bas : Surface de Fermi mesurée par ARPES. À gauche : pour $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ à $x = 0.15$ [109]. À droite : pour $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ à $x = 0.12$ [110].

2.2.1 Codage des états

La première étape de la diagonalisation exacte consiste à définir un schéma permettant de coder les états de base quantiques dans lesquels le nombre d'occupation est représenté par $n_\mu = 0$ ou $n_\mu = 1$ pour une orbitale μ . En fonction des opérateurs de création, ces états de base ont la forme :

$$(c_{1\uparrow}^\dagger)^{n_{1\uparrow}} (c_{2\uparrow}^\dagger)^{n_{2\uparrow}} \dots (c_{L\uparrow}^\dagger)^{n_{L\uparrow}} (c_{1\downarrow}^\dagger)^{n_{1\downarrow}} (c_{2\downarrow}^\dagger)^{n_{2\downarrow}} \dots (c_{L\downarrow}^\dagger)^{n_{L\downarrow}} |0\rangle \quad (2.19)$$

où $|0\rangle$ est un état vide. L'occupation n_μ forme ainsi une représentation binaire à 32-bits d'entiers b si le nombre des orbitales μ est inférieur ou égal à 32. En général, b est décomposé en deux parties, pour les spins up et down, sous la forme :

$$b = b_\uparrow + 2^L b_\downarrow \quad (2.20)$$

avec un nombre total d'états de 4^L . Cependant, en raison de la forme diagonale par bloc du hamiltonien de Hubbard, ces états ne sont pas tous nécessaires. Les relations de commutation

$$[N_\uparrow, H] = 0 \quad \text{et} \quad [N_\downarrow, H] = 0 \quad (2.21)$$

entraînent la conservation des nombres d'électrons de spin up (N_\uparrow) et de spin down (N_\downarrow). Donc, la diagonalisation exacte peut se restreindre à des secteurs de l'espace de Hilbert de dimension d où N_\uparrow et N_\downarrow sont fixes. La dimension de l'espace dans ce cas de figure est donnée par :

$$d = d(N_\uparrow)d(N_\downarrow) \quad (2.22)$$

où la dimension $d(N_\sigma)$ est donnée par :

$$d(N_\sigma) = \frac{L!}{N_\sigma!(L - N_\sigma)!} \quad (2.23)$$

soit le nombre de possibilités que nous avons pour distribuer N_σ électrons sur L sites. Au demi-remplissage et dans un secteur de spin total nul,

$$N_\sigma = N_{-\sigma} = \frac{L}{2} \quad (2.24)$$

et l'équation (2.22) devient :

$$d = \left(\frac{L!}{((L/2)!)^2} \right)^2 \quad (2.25)$$

En appliquant l'approximation de Stirling, on montre que $d \sim 4^L/L$ et conséquemment, l'espace de Hilbert du système croît d'une manière exponentielle avec le nombre de sites confirmant ainsi la limitation de la méthode à un nombre restreint de sites.

2.2.2 Construction et diagonalisation du hamiltonien

La deuxième étape est la construction et la diagonalisation du hamiltonien de Hubbard de l'équation (1.18). Nous l'écrivons sous la forme :

$$H = H_{0\uparrow} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_{0\downarrow} + H_1 \quad (2.26)$$

où $H_{0\uparrow}$ et $H_{0\downarrow}$ sont respectivement les opérateurs de l'énergie cinétique des électrons de spins up et down, $\mathbb{1}$ la matrice identité et H_1 l'interaction de Coulomb. $H_{0\uparrow}$ et $H_{0\downarrow}$ représentent le premier terme du hamiltonien (1.18). De la même façon, H_1 représente le deuxième terme. Pour calculer les éléments de matrice du hamiltonien H , c'est-à-dire, de $H_{0\sigma}$ et H_1 , on procède de la manière suivante :

La matrice H_1 est diagonale dans la base du nombre d'occupation. L'élément de matrice associé à l'état $(b_\uparrow, b_\downarrow)$ est simplement le nombre de bits qui sont simultanément 1 dans les entiers b_\uparrow et b_\downarrow . Il existe aussi des éléments diagonaux, provenant du potentiel chimique.

La matrice $H_{0\sigma}$ est une matrice creuse. Le calcul de ses éléments de matrice demande une certaine attention à cause de la nature du signe. En effet, deux états de base sont liés à la matrice $H_{0\sigma}$, si leurs représentations binaires sont différentes aux positions i et j . En supposant $i < j$, l'élément de matrice sera de la forme :

$$(-1)^{M_{ij}} t_{ij} \quad (2.27)$$

La constante M_{ij} , déterminant le signe de l'élément de matrice, est donnée par :

$$M_{ij} = \sum_{l=i+1}^{j-1} n_l \quad (2.28)$$

où n_l est le nombre d'occupation.

Après avoir établi un schéma de codage pour les états de base quantiques et avoir obtenu les éléments de matrice de H , on doit passer à sa diagonalisation en se servant de l'algorithme de Lanczos que nous allons décrire dans ce qui suit.

2.2.3 Algorithme de Lanczos : état fondamental

D'une manière générale, la méthode de Lanczos sert à déterminer les valeurs propres extrêmes d'une matrice trop grande pour être diagonalisée complètement. L'idée de base de la méthode consiste à projeter le hamiltonien de l'équation (2.26) sur un espace de Krylov [113, 114]. Le sous-espace de Krylov \mathcal{K} est généré par l'action de H, H^2, \dots, H^q (pour q itérations) sur un vecteur $|\phi_0\rangle$:

$$\mathcal{K} = \text{span} \left(|\phi_0\rangle, H|\phi_0\rangle, H^2|\phi_0\rangle, \dots, H^q|\phi_0\rangle \right) \quad (2.29)$$

Les vecteurs générés dans l'équation (2.29) ne sont pas mutuellement orthogonaux. Cependant, une séquence de vecteurs orthogonaux peut être obtenue par la relation de récurrence suivante :

$$|\phi_{n+1}\rangle = H|\phi_n\rangle - a_n|\phi_n\rangle - b_n^2|\phi_{n-1}\rangle \quad (2.30)$$

où les coefficients a_n et b_n^2 sont donnés par :

$$a_n = \frac{\langle \phi_n | H | \phi_n \rangle}{\langle \phi_n | \phi_n \rangle} \quad \text{et} \quad b_n^2 = \frac{\langle \phi_{n-1} | H | \phi_{n-1} \rangle}{\langle \phi_{n-1} | \phi_{n-1} \rangle} \quad (2.31)$$

avec les conditions initiales $b_0 = 0$ et $|\phi_{-1}\rangle = 0$. Dans la base des états normalisés :

$$|n\rangle = \frac{|\phi_n\rangle}{\sqrt{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}} \quad (2.32)$$

Le hamiltonien T , obtenu par projection, sous forme matricielle, est [115] :

$$T = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_q \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

L'énergie E_0 de l'état fondamental $|F\rangle$ du hamiltonien (2.33) est, à une précision déterminée par le nombre d'itération q , la valeur propre la plus basse de T .

2.2.4 Algorithme de Lanczos pour la fonction de Green de l'amas.

Nous avons vu précédemment comment on obtient l'état fondamental $|F\rangle$ par la méthode de Lanczos. Cependant on a aussi besoin de la fonction de Green $G'_{\mu\nu}(\omega)$ où on suppose que ω est une fréquence complexe. Elle se décompose en une partie $G'_{\mu\nu,e}(\omega)$ pour les électrons et une composante $G'_{\mu\nu,h}(\omega)$ pour les trous :

$$G'_{\mu\nu}(\omega) = G'_{\mu\nu,e}(\omega) + G'_{\mu\nu,h}(\omega) \quad (2.34)$$

où, pour les électrons :

$$G'_{\mu\nu,e}(\omega) = \langle F | c_\mu \frac{1}{\omega - H + E_0} c_\nu^\dagger | F \rangle \quad (2.35)$$

et pour les trous :

$$G'_{\mu\nu,h}(\omega) = \langle F | c_\nu^\dagger \frac{1}{\omega + H - E_0} c_\mu | F \rangle \quad (2.36)$$

L'algorithme de Lanczos basé sur une représentation en fraction continue de $G'_{\mu\nu,h}(z)$ permet d'évaluer numériquement l'équation (2.34). Nous cherchons à estimer l'action de $(z - H)^{-1}$ sur un

état $|\phi_\mu\rangle = c_\mu|F\rangle$ où $z = \omega - E_0$. En utilisant la série de Taylor :

$$(z - H)^{-1} |\phi_\mu\rangle = \left(\frac{1}{z} + \frac{1}{z^2}H + \frac{1}{z^3}H^2 + \dots \right) |\phi_\mu\rangle \quad (2.37)$$

On voit que l'espace de Krylov construit sur $|\phi_\mu\rangle$ offre une bonne représentation de :

$$\frac{1}{z - H} |\phi_\mu\rangle \quad (2.38)$$

À partir des équations (2.29) et (2.33), et lorsque $\mu = \nu$, l'expression

$$G'_{\mu\mu}(z) = \langle \phi_\mu | \frac{1}{z - H} | \phi_\mu \rangle \quad (2.39)$$

conduit à la représentation en fraction continue [115] :

$$G'_{\mu\mu}(z) = \frac{\langle \phi_\mu | \phi_\mu \rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - a_2 - \dots}}} \quad (2.40)$$

En pratique, on calcule la fraction continue (2.40) en commençant par l'étage du bas.

Dans le cas où $\mu \neq \nu$ on procède de la manière suivante. On définit

$$G'_{\mu\nu}(z) = \langle F | (c_\mu + c_\nu) \frac{1}{z - H} (c_\mu + c_\nu)^\dagger | F \rangle \quad (2.41)$$

qui, en utilisant la symétrie $G'_{\mu\nu}(z) = G'_{\nu\mu}(z)$, conduit à :

$$G'_{\mu\nu}(z) = \frac{1}{2} \left(G'_{\mu\nu}^+(z) - G'_{\nu\nu}(z) - G'_{\mu\mu}(z) \right) \quad (2.42)$$

où les $G'_{\nu\nu}(z)$ se calculent de la même façon que l'équation (2.40).

2.2.5 Algorithme de Lanczos de bande pour la fonction de Green de l'amas.

Une méthode alternative pour calculer la fonction de Green de l'amas est l'algorithme de Lanczos de bande. C'est une généralisation de l'algorithme de Lanczos où le sous-espace de Krylov

est g n r  par plus d'un  tat. Pour un syst me de L  tats, ce sous-espace, \mathcal{K}' , s' crit sous la forme :

$$\mathcal{K}' = \text{span} \left\{ |\phi_1\rangle \cdots |\phi_L\rangle, H^2|\phi_1\rangle \cdots H^2|\phi_L\rangle, \dots, H^q|\phi_1\rangle \cdots H^q|\phi_L\rangle \right\} \quad (2.43)$$

On construit une base de Lanczos $\{|n\rangle\}$ en agissant avec H , successivement sur un  tat $|\phi_i\rangle$ de \mathcal{K}' , et en normalisant par rapport aux vecteurs de base pr c dents. Cependant, des fuites de normalisation sont possibles. Il devient donc important de contr ler le nombre d'it rations q par la convergence de l' tat fondamental du sous-espace.

Comme dans la pr c dente m thode de Lanczos, la structure de la matrice (2.33) reste valable, mais avec $2L$ diagonales autour de la premi re diagonale. Ainsi, le sous-espace de Krylov, \mathcal{K}' , permet d'obtenir une repr sentation de Lehmann de la fonction de Green de l'amas de la mani re suivante. En ins rant la relation de fermeture dans l'espace de Krylov :

$$\sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| = \mathbb{1} \quad (2.44)$$

dans l'expression (2.34), on obtient :

$$G'_{v\mu}(\omega) = \sum_m \langle F|c_\mu|\phi_m\rangle \frac{1}{\omega - E_m + E_0} \langle \phi_m|c_v^\dagger|F\rangle + \sum_n \langle F|c_v^\dagger|\phi_n\rangle \frac{1}{\omega + E_n - E_0} \langle \phi_n|c_\mu|F\rangle \quad (2.45)$$

o  $|\phi_m\rangle$ et $|\phi_n\rangle$ sont des  tats propres du hamiltonien correspondant respectivement aux valeurs propres E_m et E_n . La somme m et n porte respectivement sur un syst me de $N + 1$ et de $N - 1$  lectrons. Dans la suite, on adoptera la notation suivante :

$$Q_{\mu m}^{(e)} = \langle F|c_\mu|\phi_m\rangle \quad Q_{\mu n}^{(h)} = \langle F|c_\mu^\dagger|\phi_n\rangle \quad (2.46)$$

qui sont respectivement des matrices de $2L \times N^{(e)}$ et $2L \times N^{(h)}$ o  $N^{(e)}$ est le nombre d' tats $|\phi_m\rangle$ et $N^{(h)}$ le nombre d' tats $|\phi_n\rangle$. De la m me fa on, on d finit :

$$\omega_m^{(e)} = E_m - E_0 \quad \omega_n^{(h)} = -E_n + E_0 \quad (2.47)$$

En utilisant ces notations, l'expression (2.45) devient :

$$G'_{v\mu}(\omega) = \sum_m \frac{Q_{\mu m}^{(e)} Q_{vm}^{(e)*}}{\omega - \omega_m^{(e)}} + \sum_n \frac{Q_{\mu n}^{(h)} Q_{vn}^{(h)*}}{\omega - \omega_n^{(h)}} \quad (2.48)$$

Nous pouvons joindre verticalement les matrices $\mathbf{Q}^{(e)}$ et $\mathbf{Q}^{(h)}$ en une seule matrice de dimension $2L \times N$ o  $N = N^{(e)} + N^{(h)}$ et notons par ω_r la r union des ensembles $\{\omega_n^{(e)}\}$ et $\{\omega_n^{(h)}\}$. Ainsi,

$$\Phi = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \text{[Diagram 3]} + \dots$$

FIGURE 2.4 La définition classique de la fonctionnelle de Luttinger Ward. Les lignes représentent la fonction de Green G et les pointillés, l'interaction de Coulomb U [118]

on peut simplifier l'écriture de la fonction de Green de l'équation (2.48) :

$$G'_{\nu\mu}(\omega) = \sum_r \frac{Q_{\mu r} Q_{\nu r}^*}{\omega - \omega_r} \quad (2.49)$$

Cette dernière équation constitue la représentation de Lehmann de la fonction de Green de l'amas. La méthode de Lanczos de bande est plus exigeant en mémoire, car $2L + 1$ vecteurs doivent être stockés contre trois vecteurs, pour la méthode de Lanczos simple. En pratique, le nombre d'états dans le sous-espace de Krylov \mathcal{K}' , à la convergence, est de quelques centaines, dépendant de la taille du système. Néanmoins, elle demeure la plus rapide, car toutes les paires (μ, ν) sont évaluées en même temps. En plus, comme montre l'expression (2.49), l'algorithme de Lanczos de bande donne une représentation de Lehmann de la fonction de Green de l'amas. Elle constitue l'algorithme que nous avons utilisé dans ce document.

2.3 L'approche de la fonctionnelle de Potthoff

Dans la sous-section 2.1, nous avons vu que la théorie des perturbations inter amas permettait de calculer la fonction de Green approchée du réseau par le biais de la fonction de Green exacte de l'amas et de la matrice de saut inter amas. Du point de vue numérique, on évalue la fonction de Green de l'amas par la diagonalisation exacte décrite dans la section 2.2. La fonction spectrale $A(\mathbf{k}, \omega)$ du réseau, observable expérimentalement et correspondant à la partie imaginaire de la fonction de Green du réseau, est ainsi déduite. Cependant, la CPT à elle seule n'est pas en mesure de décrire les systèmes où la symétrie est brisée, car elle ne traite qu'un sous-ensemble fini du système original. Or une brisure spontanée de la symétrie ne peut se produire que dans un système infini, c'est-à-dire dans la limite thermodynamique.

Dans cette section, nous allons résumer l'approche de la self-énergie fonctionnelle (SFA) introduite en 2003 par Michael Potthoff [116, 95, 117]. Nous verrons essentiellement que, combinée avec d'autres méthodes numériques, l'approche de la self-énergie fonctionnelle permet de traiter avec beaucoup de succès les systèmes avec des symétries brisées.

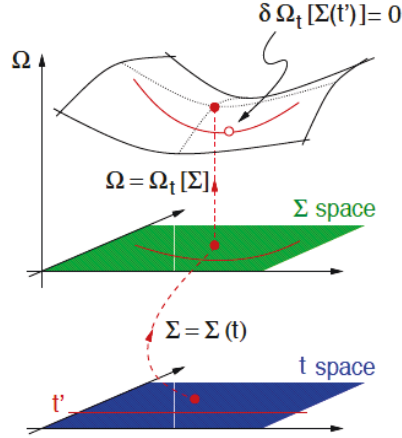


FIGURE 2.5 Illustration schématique dans l'approximation de la self-énergie fonctionnelle. Ω est une fonction de $\Sigma(t)$ où t est un terme de saut à un corps du hamiltonien et l'interaction U fixée. Lorsque Σ correspond à la bonne self-énergie du système, Ω devient stationnaire (points rouges). Cependant, elle n'est pas accessible sur tout l'espace Σ , mais dans un domaine restreint où Σ dépend de t' du système de référence (amas par exemple). Ce dernier a la même interaction U que le système original. Ω peut être évalué exactement pour le système de référence conduisant à une self-énergie et un grand potentiel approché du vrai système. [119]

D'une manière plus générale, les méthodes numériques qui traitent les systèmes d'électrons fortement corrélés sont généralement basées sur la fonction de Green via le formalisme de Luttinger et Ward [120] et de Baym et Kadanoff [121]. Le grand potentiel Ω du système est exprimé en fonction de la fonction de Green $G(\mathbf{k}, \omega)$. En principe nous avons une approche variationnelle exacte, mais malheureusement la fonctionnelle $\Omega[G(\mathbf{k}, \omega)]$ n'est pas connue d'une manière explicite. Elle est donnée, par définition, sous la forme [119] :

$$\Omega[\mathbf{G}] = \Phi[\mathbf{G}] + \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}) - \text{Tr}\{(\mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{G}^{-1})\mathbf{G}\} \quad (2.50)$$

où pour un opérateur \mathbf{A} , $\text{Tr}\mathbf{A} = T \sum_{\omega, \alpha} A_{\alpha\alpha}(i\omega)$ et les $A_{\alpha\alpha}$ sont les éléments de matrice diagonaux. La fonctionnelle de Luttinger Ward $\Phi[\mathbf{G}]$ doit être obtenue à partir d'une somme infinie de diagrammes irréductibles à deux particules, comme illustré à la figure 2.4. Pour cette raison, nous sommes toujours amenés à recourir à des approximations pour calculer numériquement la fonctionnelle $\Omega[G(\mathbf{k}, \omega)]$. Potthoff distingue trois types d'approximation :

(i) l'approximation de type I : on a un principe variationnel, mais on applique une approximation à l'équation d'Euler, c'est-à-dire à :

$$\frac{\delta\Omega[G(\mathbf{k}, \omega)]}{\delta G} = 0; \quad (2.51)$$

(ii) l'approximation de type II : on applique une approximation à $\Omega[G]$, par exemple en tronquant la

série de la figure 2.4, tout en conservant l'équation d'Euler (2.51);

(iii) l'approximation de type III : ici on tronque l'espace des fonctions de Green, G (ou des fonctions de la self-énergie Σ), c'est-à-dire l'espace variationnel est tronqué. Cependant, on calcule la fonctionnelle $\Omega[G]$ exactement et on applique aussi l'équation d'Euler, $\delta\Omega[G]/\delta G$, exactement.

Nous adopterons dans ce document l'approximation de type III, ou l'approche de la fonctionnelle de Potthoff. On cherchera à exprimer la fonctionnelle $\Omega[G]$ en fonction de la self-énergie Σ , mais restreinte à l'espace des self-énergies physiques d'un amas.

La fonctionnelle $\Phi[\mathbf{G}]$ a plusieurs propriétés [119]. Cependant, on retiendra dans ce document, la plus importante pour nous : la dérivée par rapport à \mathbf{G} de la fonctionnelle de Luttinger-Ward $\Phi[\mathbf{G}]$ correspond exactement à la self-énergie $\Sigma[\mathbf{G}]$:

$$\Sigma = \Sigma[\mathbf{G}] = \frac{\delta\Phi[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} \quad (2.52)$$

On déduit facilement cette propriété à partir des diagrammes irréductibles de $\Phi[\mathbf{G}]$ où la dérivée par rapport à \mathbf{G} nous donne ceux de la self-énergie. Lorsque \mathbf{G} correspond à la vraie fonction de Green du système, la fonctionnelle $\Omega[\mathbf{G}]$ devient stationnaire en ce point, c'est-à-dire :

$$\frac{\delta\Omega[\mathbf{G}]}{\delta\mathbf{G}} = 0 \quad (2.53)$$

ce qui correspond à l'équation de Dyson :

$$\mathbf{G}^{-1} = \mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma \quad (2.54)$$

Nous supposons que la fonctionnelle $\Sigma[\mathbf{G}]$ de l'équation (2.52) est inversible, nous pouvons écrire donc :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}[\Sigma] \quad (2.55)$$

Toutefois, cette hypothèse peut être fautive lors d'une transition de phase. Ainsi nous pouvons bâtir une nouvelle fonctionnelle, $F[\Sigma]$, dépendant de la self-énergie, qui est la transformée de Legendre de la fonctionnelle de Luttinger-Ward :

$$F[\Sigma] = \Phi[\mathbf{G}[\Sigma]] - \text{Tr}(\Sigma\mathbf{G}[\Sigma]) \quad (2.56)$$

De la même façon que la fonctionnelle $\Phi[\mathbf{G}]$, $F[\Sigma]$ n'est pas connue explicitement. En se servant de l'équation (2.52), nous pouvons montrer que :

$$G[\Sigma] = -\frac{\delta F[\Sigma]}{\delta\Sigma} \quad (2.57)$$

On définit maintenant la fonctionnelle de Potthoff $\Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma]$ ayant comme variable la self-énergie Σ :

$$\Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma] = F[\Sigma] + \text{Tr} \ln[-(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma)^{-1}] \quad (2.58)$$

L'indice \mathbf{t} , indique la dépendance de Ω en \mathbf{t} , provenant de la fonction de Green libre \mathbf{G}_0 :

$$\mathbf{G}_0^{-1} = i\omega - \mathbf{t} \quad (2.59)$$

Lorsque la self-énergie correspond à celle du système, nous obtenons :

$$\frac{\delta \Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma]}{\delta \Sigma} = \Sigma - \mathbf{G}^{-1} - \mathbf{G}_{0\mathbf{t}}^{-1} = 0 \quad (2.60)$$

Ainsi à cette valeur de Σ , $\Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma]$ est stationnaire.

Cependant elle n'est pas accessible pour toutes les self-énergies Σ , mais dans un domaine restreint $\Sigma(\mathbf{t}', \mathbf{U})$, comme le démontre la figure 2.5. La quantité \mathbf{t}' est la matrice de saut d'un système de référence. Ce dernier a les mêmes interactions \mathbf{U} que le système original. Néanmoins, leurs matrices de saut sont différentes, c'est-à-dire, $\mathbf{t} \neq \mathbf{t}'$. Dans ce document, le système de référence est l'ensemble des amas. De la même façon que l'équation (2.58), nous pouvons écrire la fonctionnelle de Potthoff pour l'amas sous la forme :

$$\Omega_{\mathbf{t}'}[\Sigma] = F[\Sigma] + \text{Tr} \ln[-(\mathbf{G}'_0^{-1} - \Sigma)^{-1}] \quad (2.61)$$

avec la fonction de Green \mathbf{G}'_0^{-1} donnée par :

$$\mathbf{G}'_0^{-1} = i\omega - \mathbf{t}' \quad (2.62)$$

La fonctionnelle $\Phi[\mathbf{G}]$ est universelle, c'est-à-dire qu'elle ne change pas pour deux systèmes qui ne diffèrent que par leur matrice de saut. Par conséquent, sa transformée de Legendre, $F[\Sigma]$ est aussi universelle. Ainsi, elle est identique dans les expressions des fonctionnelles de Potthoff $\Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma]$ et $\Omega_{\mathbf{t}'}[\Sigma]$, respectivement, pour le système original et l'amas. En combinant les équations (2.58) et (2.61), on obtient la fonctionnelle de Potthoff utilisée dans les calculs numériques [116] :

$$\Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma] = \Omega_{\mathbf{t}'}[\Sigma] + \text{Tr} \ln\{-[\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma(\mathbf{t}')]^{-1}\} - \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}') \quad (2.63)$$

2.4 Approximation de l'amas variationnel

L'approximation de l'amas variationnel (VCA) peut-être vue, comme une extension de la théorie des perturbations inter amas où certains paramètres du hamiltonien de l'amas sont fixés suivant le principe variationnel de la self-énergie fonctionnelle décrite précédemment. Le but de la VCA est de traiter les systèmes susceptibles d'avoir des brisures de symétrie spontanées. En effet, la théorie des perturbations inter amas n'est pas en mesure de traiter ces systèmes. L'inconvénient vient du fait que, la CPT n'est pas accompagnée d'un principe variationnel permettant de fixer la valeur du champ de Weiss. En principe, on doit adopter la méthode VCA, ayant un principe variationnel, pour fixer les valeurs des champs de Weiss. Dans ce qui suit, on s'intéresse d'abord à la notion de champ de Weiss.

2.4.1 Champ de Weiss

Pour étudier la possibilité de brisure de symétrie d'un système avec les méthodes d'amas quantique, on ajoute au hamiltonien de l'amas des opérateurs susceptibles de briser cette symétrie. Ces opérateurs ont des coefficients qu'on appelle des champs de Weiss. Par exemple, le hamiltonien antiferromagnétique dans le cas du réseau en nid d'abeille est de la forme :

$$H_{AF} = h_{AF} \left\{ \sum_{i \in A} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \sum_{i \in B} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \right\} . \quad (2.64)$$

où le champ de Weiss antiferromagnétique est le coefficient h_{AF} . À la figure 2.6, on montre la fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss h_{AF} , pour un amas hexagonal de six sites et un amas de dix sites à $U = 6$ et au demi-remplissage. Les points noirs indiquent la valeur du champ de Weiss optimal où la fonctionnelle de Potthoff admet un minimum. On voit que, lorsque la taille de l'amas augmente, le champ de Weiss optimal diminue. En effet, dans les méthodes d'amas quantiques, le champ de Weiss permet seulement de briser une symétrie spontanée qui ne peut apparaître que dans un amas infini. Par conséquent, plus la taille de l'amas augmente, plus il devient plus facile de briser la symétrie, et plus la valeur du champ de Weiss optimal diminue. En principe, on doit s'attendre à un champ de Weiss optimal nul dans la limite de taille infinie. Il est important de noter que le champ de Weiss des méthodes d'amas quantiques est différent du champ de Weiss dans les méthodes ordinaires. En effet, dans les méthodes d'amas quantiques, le champ de Weiss et le paramètre d'ordre sont différents, contrairement à la théorie du champ moyen ordinaire.

L'étude de la supraconductivité, quant à elle, se fait en ajoutant, au hamiltonien de l'amas, des champs de Weiss anormaux qui sont susceptibles de créer ou de détruire des paires de Cooper.

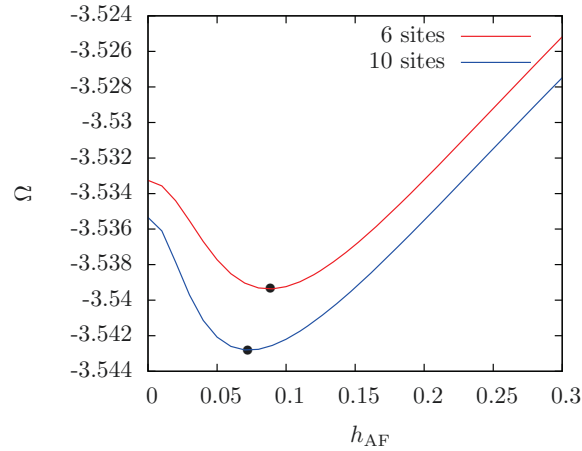


FIGURE 2.6 La fonctionnelle de Potthoff en fonction du champ de Weiss antiferromagnétique h_{AF} du réseau en nid d'abeille au demi-remplissage. En rouge, pour un amas hexagonal de six sites et en bleu, un amas de dix sites (deux hexagones), $U/t = 6$. On voit bien que le champ de Weiss optimal, indiqué par le point noir, diminue quand la taille du système augmente.

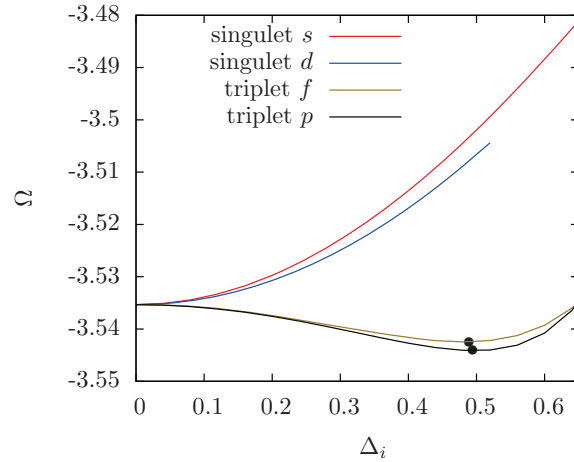


FIGURE 2.7 La fonctionnelle de Potthoff Ω en fonction des champs de Weiss supraconducteurs du réseau en nid d'abeille au demi-remplissage ($\mu = \frac{U}{2}$). Le champ de Weiss Δ_i pour $i = s, d, p$ ou f et $U = 6t$. On a utilisé un amas hexagonal de six sites. La supraconductivité de type triplet existe au demi-remplissage, car Ω admet un minimum, indiqué par les points noirs, à un champ de Weiss optimal non nul, contrairement aux types singulets.

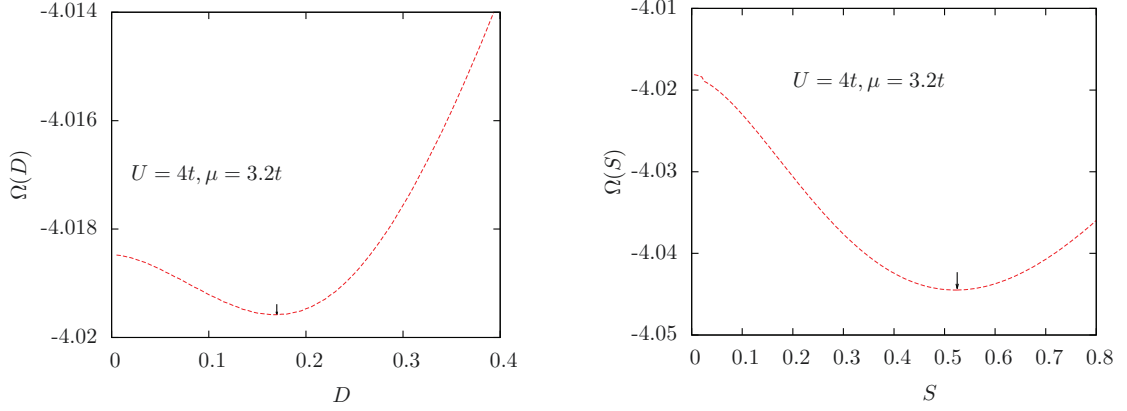


FIGURE 2.8 Fonctionnelle de Potthoff en fonction des champs de Weiss supraconducteurs, de type singulet, du réseau en nid d'abeille. Un amas hexagonal de six sites a été utilisé avec $U = 4t$ et le potentiel chimique, $\mu = 3.2t$. La fonctionnelle Ω admet un minimum, contrairement à la figure 2.7, au demi-remplissage.

Dans le cas du réseau en nid d'abeille, les opérateurs anormaux, de type singulet ou triplet, sont définis de la forme :

$$\begin{aligned}\hat{\Delta}_{\text{singulet}} &= \sum_{\mathbf{r}} (\Delta_1 S_{1,\mathbf{r}} + \Delta_2 S_{2,\mathbf{r}} + \Delta_3 S_{3,\mathbf{r}}) \\ \hat{\Delta}_{\text{triplet}} &= \sum_{\mathbf{r}} (\Delta_1 T_{1,\mathbf{r}} + \Delta_2 T_{2,\mathbf{r}} + \Delta_3 T_{3,\mathbf{r}})\end{aligned}\tag{2.65}$$

où $S_{i,\mathbf{r}}$ et $T_{i,\mathbf{r}}$ sont respectivement les opérateurs de singulet et de triplet, définis à l'équation (1.91). Les champs de Weiss supraconducteurs sont les coefficients Δ_i qui, selon leurs définitions, peuvent conduire à une symétrie singulet s , d et $d + id$ où triplet p , f et $p + ip$. La figure 2.7 décrit la fonctionnelle de Potthoff Ω en fonction du champ de Weiss Δ_i (par exemple, $i = s$ correspond à la symétrie s) du réseau en nid d'abeille au demi-remplissage. Les solutions obtenues avec les symétries de type singulet correspondent à un champ de Weiss nul et s'identifient donc, à la solution normale. Par contre, à $U = 4t$ et $\mu = 3.2t$, la figure 2.8 indique un minimum de Ω . Donc la supraconductivité de type singulet, dans ce réseau, peut exister seulement lorsque le système est dopé, contrairement à la symétrie triplet.

Physiquement, le minimum de la fonctionnelle de Potthoff Ω est une signature de possibilité d'émergence de l'ordre défini par le champ de Weiss. Cependant, les différentes valeurs du champ de Weiss doivent être déterminées d'une manière itérative dans l'approximation de l'amas variationnel en utilisant le principe variationnel de la self-énergie fonctionnelle. Dans ce qui suit, on s'intéresse à l'approximation de l'amas variationnel.

2.4.2 VCA et procédure

Basée sur la self-énergie fonctionnelle, le système de référence de la VCA, est un ensemble d'amas répétés d'une manière identique sur le réseau original. En VCA, la self-énergie du système est approchée par la self-énergie de l'amas. La valeur de cette dernière doit être déterminée en ajoutant des champs de Weiss au hamiltonien de l'amas. On fixe les paramètres de ces champs de Weiss en calculant la fonctionnelle de Potthoff de l'équation (2.50). Contrairement aux méthodes de champ moyen ordinaire, la VCA tient compte correctement les effets de corrélations à courte portée. L'avantage de la VCA, comparée à la théorie des perturbations inter amas, est sa capacité à décrire les ordres à longue portée lorsqu'un champ de Weiss adapté à la brisure de la symétrie est ajouté au hamiltonien de l'amas. D'un point de vue microscopique, la coexistence de plusieurs phases peut être étudiée en utilisant un ou plusieurs champs de Weiss pour chacune des symétries possibles.

La procédure dans l'approximation de l'amas variationnel est la suivante :

- (i) on ajoute au hamiltonien de l'amas, un champ de Weiss adapté à la symétrie qu'on souhaite briser. Ce choix doit être guidé par les possibilités de brisure de symétries du système à étudier ;
- (ii) ensuite, on détermine la fonction de Green exacte de l'amas avec l'algorithme de Lanczos ou avec l'algorithme de Lanczos de bande.
- (iii) La dernière étape de la VCA, consiste à optimiser, dans l'espace des paramètres variationnels, la fonctionnelle de Potthoff. Ensuite on calcule les propriétés du système telles que les paramètres d'ordre à ce point optimal.

L'approximation de l'amas variationnel est limitée à un nombre restreint de paramètres variationnels. Un plus grand nombre de ces paramètres variationnels peut être traité par la méthode du champ moyen dynamique sur amas, que nous allons décrire à la section suivante.

2.5 Le champ moyen dynamique sur amas

Le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) [122] est une extension de la théorie du champ moyen dynamique. L'idée de base consiste à modéliser les effets de l'environnement sur l'amas par un ensemble de degrés de liberté auxiliaires couplés. Ces degrés de liberté forment un environnement effectif dans lequel baigne l'amas, et sont par conséquent appelés orbitales de bain. On montre à la figure 2.9, l'exemple d'un amas de quatre sites avec ses six orbitales de bain, d'un réseau en nid d'abeille. Les cercles noirs représentent les sites et les petits carrés rouges, les orbitales de bain. Ces derniers sont utilisés pour modéliser les effets de l'environnement. Les lignes noires représentent les termes de saut $t_{\mu\nu}$ entre les sites μ et ν de l'amas, et les pointillés, les termes de saut $\theta_{\mu\alpha}$ entre les sites de l'amas et les orbitales de bain. Dans la CDMFT, l'amas joue le rôle de l'impureté dans le

modèle d'impureté d'Anderson [123]. Ainsi le hamiltonien du système amas-environnement est de la forme :

$$H' = \sum_{\mu\nu} t_{\mu\nu} c_{\mu}^{\dagger} c_{\nu} + U \sum_{\mathbf{R}} n_{\mathbf{R}\uparrow} n_{\mathbf{R}\downarrow} + \sum_{\mu\alpha} \theta_{\mu\alpha} (c_{\mu}^{\dagger} a_{\alpha} + H.c) + \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} \quad (2.66)$$

Dans cette expression, l'opérateur c_{μ}^{\dagger} crée un électron de l'orbitale $\mu = (\mathbf{R}, \sigma)$ de l'amas alors que, c_{μ} le détruit. De la même façon, a_{α}^{\dagger} crée et a_{α} détruit un électron dans l'orbitale de bain α . Les ε_{α} sont les énergies de ces orbitales de bain. En faisant la trace sur ces orbitales de bain, la fonction de Green, \mathbf{G}' , du hamiltonien (2.66) prend la forme :

$$\mathbf{G}'^{-1}(\omega) = \omega - \mathbf{t}' - \mathbf{\Gamma}(\omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) \quad (2.67)$$

où la matrice d'hybridation $\mathbf{\Gamma}$ décrit l'effet des orbitales de bain sur la fonction de Green de l'électron. Ses éléments de matrice $\Gamma_{\mu\nu}$, sont définis par les énergies des orbitales de bain et des termes d'hybridation $\theta_{\mu\alpha}$:

$$\Gamma_{\mu\nu}(\omega) = \sum_{\alpha} \frac{\theta_{\mu\alpha} \theta_{\nu\alpha}^*}{\omega - \varepsilon_{\alpha}} \quad (2.68)$$

Les énergies des orbitales de bain, ainsi que les termes d'hybridation doivent être déterminés par la condition d'auto cohérence :

$$\overline{\mathbf{G}}(\omega) = \mathbf{G}'(\omega) \quad (2.69)$$

où $\overline{\mathbf{G}}$ est la moyenne, sur le super-réseau, de la fonction de Green, c'est-à-dire la transformée de Fourier donnant la fonction de Green locale :

$$\overline{\mathbf{G}}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{G}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.70)$$

où $\mathbf{G}(\mathbf{k}, \omega)$ est défini par l'équation de Dyson :

$$\mathbf{G}^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{G}_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) \quad (2.71)$$

Dans cette expression, la self-énergie du système $\mathbf{\Sigma}$ est remplacée par la self-énergie de l'amas. En principe, si $\mathbf{\Gamma}$ représente bien l'environnement de l'amas, l'équation (2.70) satisfait l'égalité :

$$\overline{\mathbf{G}}(\omega) = \mathbf{G}(\omega) \quad (2.72)$$

Toutefois, la condition d'auto cohérence (2.69) ne peut être satisfaite avec un nombre fini de paramètres de bain. Par conséquent, on applique la condition de minimisation en calculant la

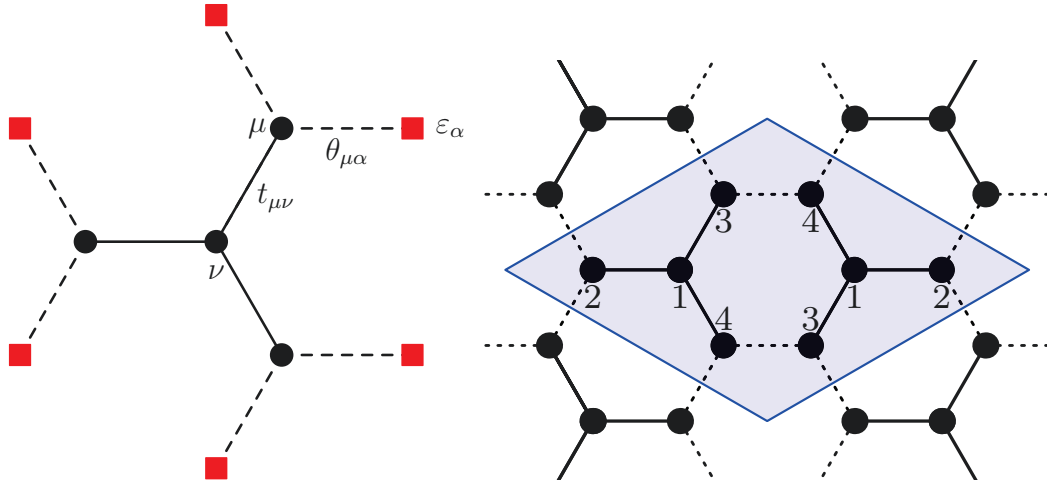


FIGURE 2.9 À gauche : Illustration d'un amas du réseau en nid d'abeille avec ses huit orbitales de bain. Les cercles noirs sont les sites de l'amas, et les carrés rouges, les orbitales de bain. $t_{\mu\nu}$ est l'amplitude de saut entre les sites μ et ν de l'amas, et $\theta_{\mu\alpha}$, l'amplitude de saut entre le site μ de l'amas et l'orbitale de bain α . L'énergie de l'orbitale de bain α est dénoté par ε_α . Cet amas doit être accompagné de son image inversée pour former un dallage du réseau comme le montre la zone colorée de la figure à droite.

fonction de distance :

$$d = \sum_{i\omega_n} W(i\omega_n) |\mathbf{G}'^{-1}(i\omega_n) - \overline{\mathbf{G}}^{-1}(i\omega_n)|^2 \quad (2.73)$$

où la somme doit être effectuée sur les fréquences de Matsubara ω_n , et les poids $W(i\omega_n)$ sont utilisés pour donner l'importance aux basses fréquences. À ce point, changer les valeurs des paramètres de bain ne correspond pas à une nouvelle solution du hamiltonien (2.66). Néanmoins, la fonction d'hybridation est souvent recalculée. On représente, à la figure 2.10, l'algorithme de la CDMFT, qui comprend les étapes suivantes :

- (i) on débute par des valeurs d'essai des paramètres de bain qui définissent la fonction d'hybridation (2.68);
- (ii) on calcule la fonction de Green de l'amas de l'expression (2.67);
- (iii) on calcule la projection $\overline{\mathbf{G}}$;
- (iv) on minimise la fonction de distance de l'expression (2.73) et on met à jour les paramètres de bain
- (v) Enfin, si les paramètres de bain convergent, on sort de la boucle sinon on retourne à l'étape (ii).

Le champ moyen dynamique sur amas est particulièrement utile dans l'étude des changements de phases, par exemple la transition de Mott. Il peut être utilisé dans la détermination du paramètre d'ordre supraconducteur, si des termes d'appariement sont définis sur le bain ou encore entre les sites de l'amas et ceux du bain.

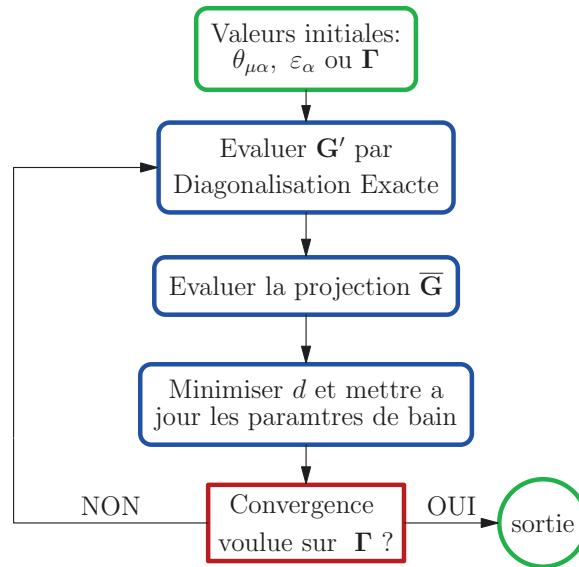


FIGURE 2.10 L'algorithme de la CDMFT qui décrit les différentes étapes de la méthode.

2.6 Approximation de l'impureté dynamique sur amas

L'approximation de l'impureté dynamique sur amas est une méthode qui combine à la fois l'approximation de l'amas variationnel et le champ moyen dynamique sur amas. Elle comporte ainsi des champs de Weiss définis sur l'amas comme en VCA et des orbitales de bain représentant les effets de l'environnement comme en CDMFT. Cependant, les valeurs des paramètres variationnels sont obtenues en optimisant la fonctionnelle de Potthoff de l'équation (2.63) comme en VCA, et non en appliquant la condition d'auto cohérence (2.69) d'où sa précision plus grande que celle du champ moyen dynamique sur amas dans la détermination des changements de phases, en particulier des changements de phase discontinus. De plus, la CDIA permet de déterminer l'énergie du système, utile lorsqu'on souhaite obtenir la solution favorable s'il y a plusieurs possibilités de brisure de symétrie dans le système. Elle permet aussi d'obtenir les hystérésis qui apparaissent dans les transitions de phases. Cependant, numériquement, la convergence des paramètres variationnels est souvent difficile.

2.7 Limites des méthodes d'amas quantiques.

La puissance des méthodes d'amas quantiques réside dans leur capacité à inclure les corrélations spatiales à courte portée, mais aussi des corrélations dynamiques. Cependant, comme la plupart des méthodes numériques, elles ont des limites :

- (i) Elles ne tiennent pas en compte des corrélations à longue portée, qui peuvent être dues aux fluctuations à deux corps. Par conséquent, elles ne sont pas sensibles aux déstabilisations des ordres dues aux excitations collectives. En particulier elles ne contiennent pas la physique du théorème de Mermin-Wagner.
- (ii) Les ordres détectables par ces méthodes sont prévus à *a priori* comme dans le cas de la théorie du champ moyen. Ici les paramètres de bain et les champs de Weiss doivent permettre la brisure des symétries recherchées pouvant émerger dans le système à étudier.
- (iii) Les ordres étudiés avec les méthodes d'amas quantiques doivent avoir une périodicité courte, c'est-à-dire seuls les ordres commensurables sont pris en compte.
- (iv) Toutes les excitations dues à deux corps sont confinées dans l'amas et par conséquent souffrent des effets de taille.

Chapitre 3

Phases du modèle de Kitaev-Hubbard

Ce premier projet porte sur le modèle de Kitaev-Hubbard. Comme le nom l'indique, c'est une variante du célèbre modèle de Hubbard, mais défini sur le réseau du graphène. En plus du terme de saut t le modèle comporte aussi un autre terme de saut t' dépendant du spin. D'un point de vue physique, ce dernier terme de saut joue un rôle analogue à celui d'une interaction spin-orbite. Au demi-remplissage, c'est-à-dire lorsque la densité d'électrons est égale à un électron par site, et dans la limite où l'interaction est beaucoup plus importante que les termes de saut ($U \gg t, t'$) le modèle de Kitaev-Hubbard devient une interpolation entre le modèle de Heisenberg pour l'antiferromagnétisme et le modèle de Kitaev [124] utilisé dans l'information quantique. Ce dernier est un modèle idéalisé, contrairement au modèle de Kitaev-Hubbard plus proche des systèmes physiques réalisables en pratique, démontrant ainsi son intérêt. En effet, le modèle de Kitaev-Hubbard est pratiquement réalisable dans des réseaux optiques d'atomes froids [125]. Dans une certaine limite des paramètres ($t' \sim t, U \gg t$), le modèle peut supporter des calculs quantiques topologiques.

Le modèle de Kitaev-Hubbard est d'autant plus intéressant dans la limite de couplage intermédiaire, où il présente des fluctuations de charge et où plusieurs phases importantes émergent, dont l'antiferromagnétisme, le liquide de spins algébrique et deux phases semi-métalliques. Ces dernières sont délimitées par une transition topologique dans le diagramme de phase (voir les résultats de l'article). De plus, l'étude du modèle quart-rempli révèle la présence d'un isolant topologique [126]

Pour étudier ce modèle de Kitaev-Hubbard au demi-remplissage, nous avons utilisé l'approximation de l'impureté dynamique sur amas (CDIA). Les résultats principaux sont regroupés dans un diagramme de phase dans le plan (U, t') . Ainsi, nous avons montré comment les différentes phases du modèle se rencontrent en un même point du plan (U, t') . Cependant la phase la plus

importante dans le modèle reste la phase de liquide de spins algébrique, en raison de sa nouveauté et de ses applications potentielles.

Du point de vue théorique, les phases de liquide de spins jouent un rôle important dans la compréhension de la physique des supraconducteurs à haute température critique [127]. Du point de vue expérimental, des mesures par ^1H NMR indiquent la possibilité d'une phase de liquide de spins dans l'isolant de Mott $k - (\text{BEDT-TTF})_2\text{Cu}_2(\text{CN})_3$, un composé organique [128].

À part le liquide de spins et l'antiferromagnétisme, le modèle de Kitaev-Hubbard présente aussi une transition topologique de Lifshitz [129, 130, 131] dans la phase semi-métallique. Cette transition peut être caractérisée par le nombre de points de Dirac à la surface de Fermi.

Topological phases of the Kitaev-Hubbard Model at half-filling

J. P. L. Faye and D. Sénéchal

Département de physique and RQMP, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K2R1

S. R. Hassan

The Institute of Mathematical Sciences, C.I.T. Campus, Chennai 600 113, India

(Dated: June 4, 2015)

The Kitaev-Hubbard model of interacting fermions is defined on the honeycomb lattice and, at strong coupling, interpolates between the Heisenberg model and the Kitaev model. It is basically a Hubbard model with ordinary hopping t and spin-dependent hopping t' . We study this model in the weak to intermediate coupling regime, at half-filling, using the Cellular Dynamical Impurity Approximation (CDIA), an approach related to Dynamical Mean Field Theory but based on Potthoff's variational principle. We identify four phases in the (U, t') plane: two semi-metallic phases with different numbers of Dirac points, an antiferromagnetic insulator, and an algebraic spin liquid. The last two are separated by a first-order transition. These four phases all meet at a single point and could be realized in cold atom systems.

I. INTRODUCTION

Mott insulators are systems that should be metals within band theory, but are in fact insulators because of electron-electron interactions.[1, 2] However, the Mott phase is often hidden behind a magnetically ordered phase at low temperature.[3] Spin liquids are non-magnetic Mott-insulators, without broken lattice symmetry, stabilized purely by quantum effects.[4] In addition to a spectral gap, they are characterized by spin correlations that decay either exponentially, or as a power law, in the case of algebraic spin liquids.[5, 6] Experimentally, a spin liquid ground state has been suggested in the organic material κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃,[7] in other systems like YMnO₃[8] and, more recently, in materials with a kagome lattice structure.[9, 10] Theoretically, spin liquid phases were found, for instance, in the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg model on the kagome lattice,[11–13] and in the intermediate-coupling Hubbard model on a triangular lattice.[14]

Tikhonov *et al.*[15] have shown that an algebraic spin liquid is realized when a special type of perturbation is added to the Kitaev spin model.[16] It can be shown that the stability of the spin liquid phase, in that system, is due to time-reversal symmetry. The existence of an algebraic spin liquid in a model of interacting fermions, the Kitaev-Hubbard model, was shown by Hassan *et al.*[17] The phase diagram of this model was investigated using the variational cluster approximation (VCA) which allowed the authors to identify a semi-metallic phase, a Néel phase and an algebraic spin liquid phase.

In this work, we refine the analysis of Ref. 17 by using the cluster dynamical impurity approximation (CDIA). This method is more accurate in its treatment of the Mott transition, which appears clearly as a discontinuous transition with hysteresis. We also reveal a topological transition within the semi-metallic region, between a phase with eight distinct Dirac points, and another phase with only two Dirac points; this is a Lifshitz transition, that carries into the interacting region. These four phases (the algebraic spin liquid, the antiferromagnet, and the two semi-metallic phases) meet at a single point in the phase diagram.

The paper is organized as follows. We review the model and describe its non-interacting solution in Section II. In Section III, we review the methods used in the interacting case (the CDIA), before presenting and discussing our results in Section IV.

II. THE NON-INTERACTING LIMIT

We will mostly follow the notation of Ref. 18. The Kitaev-Hubbard model, defined on the honeycomb lattice, has the following Hamiltonian:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} \left\{ c_i^\dagger \left(\frac{t + t' \sigma^\alpha}{2} \right) c_j + \text{H.c.} \right\} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1)$$

where $c_{i\sigma}$ annihilates a fermion of spin σ at site i (the spin index is implicit in the above), σ^α are the Pauli matrices ($\alpha = x, y, z$), U the Coulomb repulsion for two electrons of opposite spin on the same site, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ is the number of electrons of spin σ at site i , and $\langle i, j \rangle_\alpha$ denotes the nearest-neighbor pairs in the three hopping directions of the cluster system (see Fig. 4 below). Throughout this work we will express energies relative to t , i.e., we will set $t = 1$.

In the limit where $U \gg t, t'$, and at half-filling, the Hamiltonian (1), becomes equivalent to a combination of the Heisenberg and Kitaev[16] Hamiltonians:

$$H^{(2)} = \sum_{\langle ij \rangle \alpha} \left[\frac{(1-t'^2)}{U} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{2t'^2}{U} S_i^\alpha S_j^\alpha \right] \quad (2)$$

Time reversal is applied by changing the sign of the Pauli matrices ($\sigma^\alpha \rightarrow -\sigma^\alpha$). The Hamiltonian (1) breaks time-reversal symmetry explicitly when $t' \neq 0$, but is invariant under parity (as defined by the exchange of sublattices A and B on the honeycomb lattice).

In the non-interacting limit ($U = 0$), the Hamiltonian (1), after Fourier transform, can be expressed in terms of the destruction operators $c_{\mathbf{k},A}$ and $c_{\mathbf{k},B}$ on the A and B sublattices

(the spin index is, again, implicit):

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},A}^\dagger & c_{\mathbf{k},B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Xi(\mathbf{k}) \\ \Xi^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},A} \\ c_{\mathbf{k},B} \end{pmatrix} \quad (3)$$

where $\Xi(\mathbf{k}) = P_3 + P_1 e^{ik_2} + P_2 e^{-ik_1}$ is a 2×2 matrix acting in spin space, with the projectors $P_\alpha = \frac{1}{2}(1 + t' \sigma^\alpha)$ and $k_{1(2)} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{1(2)}$. The vectors $\mathbf{e}_{1(2)}$ are a Bravais basis of the honeycomb lattice: $\mathbf{e}_{1(2)} = (\pm \frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$.

For a given \mathbf{k} , the four eigenvalues of H_0 are $\pm \varepsilon_\pm(\mathbf{k})$ with $\varepsilon_\pm^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\xi(\mathbf{k}) \pm t' |\mathbf{B}(\mathbf{k})|]$. We have defined

$$\xi(\mathbf{k}) = \frac{3}{2}(1 + t'^2) + \cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3 \quad (4)$$

and the vector \mathbf{B} with components

$$\begin{aligned} B_1(\mathbf{k}) &= 1 - t' \sin k_1 + \cos k_2 + \cos k_3 \\ B_2(\mathbf{k}) &= 1 + \cos k_1 - t' \sin k_2 + \cos k_3 \\ B_3(\mathbf{k}) &= 1 + \cos k_1 + \cos k_2 - t' \sin k_3 \end{aligned} \quad (5)$$

with $k_3 = -k_1 - k_2$. The four-component eigenvector associated with eigenvalue $p\varepsilon_{p'}(\mathbf{k})$ ($p' = \pm$ and $p = \pm$) will be denoted $\Phi^{pp'}$.

A. Dirac points

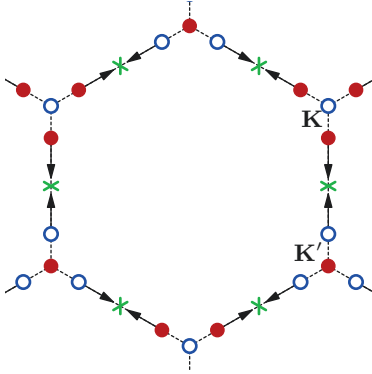


FIG. 1. Position and chirality of the Dirac points at $U = 0$: open (blue) and filled (red) circles are the center of positive and negative circulations of $\nabla\chi$, respectively. As t' increases from zero, the new Dirac points drift in the direction indicated by the arrows, until they annihilate at the points marked by crosses, at the critical value t'_c , while the graphene Dirac points stay fixed. The hexagon is the Brillouin zone.

At $t' = 0$ (the graphene limit), the Fermi surface consists of two distinct Dirac points $\mathbf{K} = (2\pi/3, 2\pi/3\sqrt{3})$ and $\mathbf{K}' = (2\pi/3, -2\pi/3\sqrt{3})$ that are the focal points of Dirac cones at positive and negative energies. As soon as $t' > 0$, a total of six new distinct Dirac points appear, along the lines that join \mathbf{K} and \mathbf{K}' , i.e., on the Brillouin zone boundary (Fig. 1). These Dirac points form the Fermi surface at half-filling.

The positions of the Dirac points can be found by solving the equation $\varepsilon_-(k_x = \frac{2\pi}{3}, k_y) = 0$ for k_y . In terms of $\Lambda = \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y)$, this is a quadratic equation:

$$4[\Lambda^2(1 - t'^2) + \Lambda] + 1 + t'^2 = 0 \quad (6)$$

whose solutions are

$$\Lambda_1 = -\frac{1}{2} \quad \text{and} \quad \Lambda_2 = -\frac{1 + t'^2}{2(1 - t'^2)} \quad (7)$$

Λ_1 corresponds to the graphene Dirac point at the zone corner, whereas Λ_2 is an additional Dirac point for a given t' ; the other six Dirac points can be deduced from Eq. (7) by lattice symmetries. The limiting case $\Lambda_2 = -1$, for $t' < 1$, corresponds to a critical spin-dependent hopping $t'_c = 1/\sqrt{3}$. At that value of t' the six additional Dirac points merge pairwise and disappear at the midpoints between zone corners, as illustrated on Fig. 1. This merging is discussed in more detail below.

Note that the Dirac points are protected by parity. Adding a parity-non-conserving term, such as a staggered magnetization M , would change the Hamiltonian (3) into

$$\sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},A}^\dagger & c_{\mathbf{k},B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M & \Xi(\mathbf{k}) \\ \Xi^\dagger(\mathbf{k}) & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},A} \\ c_{\mathbf{k},B} \end{pmatrix} \quad (8)$$

and the corresponding energies would become $\varepsilon_\pm^2(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\xi(\mathbf{k}) + M^2 \pm t' |\mathbf{B}(\mathbf{k})|]$, which never vanishes. Thus all Dirac points disappear if $M \neq 0$.

B. The Pancharatnam-Berry curvature

The Dirac points are singular points of the Pancharatnam-Berry (PB) curvature. The latter is given by

$$R^{pp'}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon^{\mu\nu}}{4\pi i} \partial_\mu \Phi^{pp'}(\mathbf{k})^\dagger \partial_\nu \Phi^{pp'}(\mathbf{k}) \quad (9)$$

where $\mu, \nu = 1, 2$ are two orthogonal directions in the Brillouin zone, $\varepsilon^{\mu\nu}$ is the two-dimensional Levi-Civita tensor, and the eigenstates of the Hamiltonian (3) are

$$\Phi^{pp'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi^{p'}(\mathbf{k}) \\ p e^{i\chi(\mathbf{k})} \psi^{p'}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (10)$$

with

$$\psi^\pm(\mathbf{k}) = C(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} B_3(\mathbf{k}) \mp |\mathbf{B}(\mathbf{k})| \\ -B_1(\mathbf{k}) + iB_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (11)$$

and $C(\mathbf{k})$ is a normalization factor. The expression for the phase $\chi(\mathbf{k})$ is known analytically for all values of t' but is too complex to reproduce here.

It can be shown that

$$R^{pp'}(\mathbf{k}) = p' \frac{1}{2} [b(\mathbf{k}) + b(-\mathbf{k})] + \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \chi(\mathbf{k}) \quad (12)$$

where

$$b(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon^{\mu\nu}}{8\pi} \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{k}) \cdot \partial_\mu \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{k}) \times \partial_\nu \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{k}) \quad (13)$$

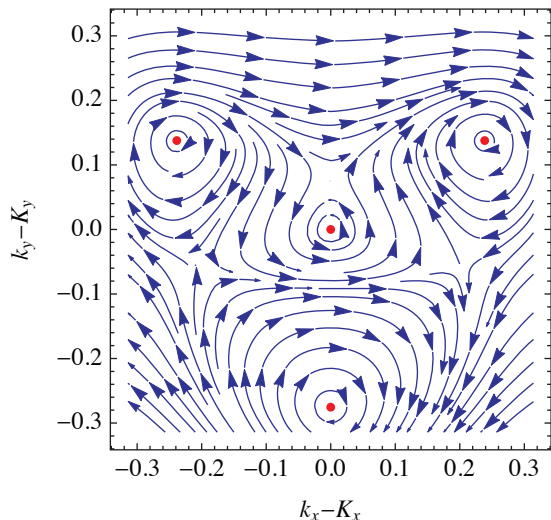


FIG. 2. Circulation of $\nabla\chi(\mathbf{k})$ around the Dirac point \mathbf{K} and the new, satellite Dirac points, at $t' = 0.4$.

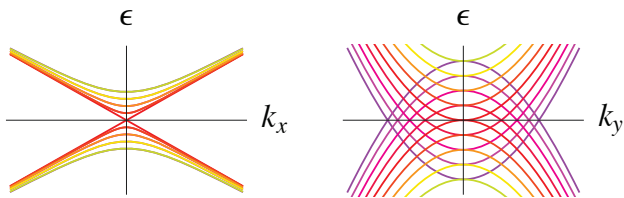


FIG. 3. (color online). Profile of the dispersion around $\frac{1}{2}\mathbf{G} = (\mathbf{K} + \mathbf{K}')/2$, one of the merging locations of the new Dirac points at $t' = t'_c$. The dispersion is shown along the x (left) and y (right) directions. The various curves correspond to an array of values of t' close to, and around t'_c . Precisely at t'_c , the dispersion is linear in k_x and quadratic in k_y . For $t' \neq t'_c$, the two Dirac points stand away from $\frac{1}{2}\mathbf{G}$.

The first term of (12) is everywhere regular, but the last term is singular where the phase χ is ill-defined, which occurs when two bands cross at a given wave vector, i.e., at Dirac points.

The integral of the PB curvature over occupied wave vectors is the Chern number. At half-filling, the two lowest-energy bands contribute 1 and -1 , respectively, to the Chern number, coming from the first term of (12). Each Dirac point will in addition contribute $\pm\frac{1}{2}$ to the Chern number, coming from the second term of (12), i.e., from the circulation of $\nabla\chi/4\pi$ around it. Figure 2 shows this circulation around the old and new Dirac points in the vicinity of \mathbf{K} . From that figure, it appears clearly that the graphene Dirac point \mathbf{K} will contribute $\frac{1}{2}$, whereas the new Dirac points have the opposite contribution; but this picture is reversed when looking at the Dirac points surrounding \mathbf{K}' . Thus the Dirac point contributions sum up to zero over the whole Brillouin zone, since they occur in pairs with opposite chiralities.

At half-filling, there is particle-hole symmetry and the explicit time-reversal breaking in the Hamiltonian does not induce any topology, because of zero total Chern number. We

can think of this as an accidental restoration of time-reversal symmetry.

Note that the $t' = 0$ line (the graphene limit) is singular in this respect. At $t' = 0$, the bottom two bands become degenerate, and likewise for the top two bands. Thus the graphene Dirac points \mathbf{K} and \mathbf{K}' arise for each of the two spin bands, and the two spins make exactly opposite contributions to the PB curvature. The latter is thus identically zero everywhere, whereas for $t' > 0$ the PB curvature is not zero, but its integral over the Brillouin zone (the Chern number) is.

C. Lifshitz transition

At the critical value t'_c , the new Dirac points with opposite chiralities annihilate pairwise, at wave vectors $\frac{1}{2}\mathbf{G}$ lying midway between zone corners. These merging wave vectors, indicated by green crosses on Fig. 1, are time-reversal invariant, since $-\frac{1}{2}\mathbf{G}$ is equivalent to $\frac{1}{2}\mathbf{G}$ because \mathbf{G} is a reciprocal lattice vector. This topological phase transition cannot be described by the total Chern number, which does not change here. It is a Lifshitz transition, akin to what has been described in Refs 19–21. Precisely at this transition, the dispersion around the merged Dirac points is linear in one direction and quadratic in the other, a behavior qualified as *semi-Dirac* in Ref. 20 and illustrated on Fig. 3. Experimentally, this transition could be probed by changes in the tunneling probability between the valence and conduction bands during Bloch-Zener oscillations.[19]

III. INTERACTIONS

A. The cluster dynamical impurity approximation

In the interacting case, the Hamiltonian (1) must be treated within some approximation method. In this work, we use the cluster dynamical impurity approximation (CDIA), [22, 23] closely related to the variational cluster approximation (VCA) and to the cellular dynamical mean field theory (CDMFT),[24] but more accurate in its rendering of the Mott transition. These methods can be understood in the framework of Potthoff's self-energy functional approach (SFA).[25, 26] In this approach, the physical self-energy of the system is obtained via a dynamical variational principle, expressed by the Euler equation

$$\frac{\delta\Omega[\Sigma]}{\delta\Sigma} = 0 \quad (14)$$

The self-energy functional $\Omega[\Sigma]$ is defined as follows:

$$\Omega[\Sigma] = F[\Sigma] + \text{Tr} \ln[-(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma)^{-1}] \quad (15)$$

where \mathbf{G}_0 is the Green function of the non-interacting part of Hamiltonian (1), and $F[\Sigma] = \Phi[G[\Sigma]] - \text{Tr}(\Sigma G[\Sigma])$ is the Legendre transform of the Luttinger-Ward functional $\Phi[\mathbf{G}]$, [27] defined as a functional of the Green function \mathbf{G} . We use a matrix notation for the Green function and self-energy

to emphasize that they are to be considered as matrices in the space of frequencies and degrees of freedom (e.g. sites and spin). The symbol Tr means a functional trace, i.e a sum over bands, wave vectors and frequency. At the stationary point of $\Omega[\Sigma]$, the value of the functional Ω coincides with the thermodynamic grand potential $E - \mu N$.

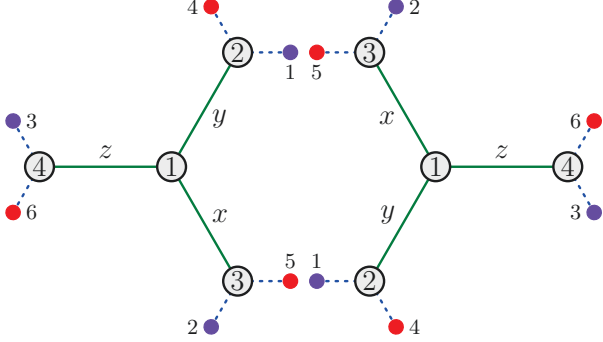


FIG. 4. (color online). The two-cluster system used in this work as a unit cell. Shaded numbered circles are lattice sites and small numbered circles represent the bath orbitals. The second cluster is a spatial inversion of the first.

Unfortunately, the Luttinger-Ward functional $\Phi[\mathbf{G}]$, and consequently its Legendre transform $F[\Sigma]$, is not known explicitly. This leads to some approximations, in the weak-coupling regime, where $\Phi[\mathbf{G}]$ is represented by a truncated sum of diagrams. The Hartree-Fock approximation is an example of such a truncation. The basic idea behind the SFA is that the functional $F[\Sigma]$ is an universal functional of the self-energy.[25, 28] This means that the functional form of $F[\Sigma]$ is the same for a reference Hamiltonian H' with the same interaction as H , but a different non interacting part. Typically, H' will be a small system, e.g., a cluster, whose solution is known numerically. Given the physical self-energy $\Sigma(h)$ for a family of reference Hamiltonians H' parametrized by h , the value of $F[\Sigma(h)]$ can be extracted from the known grand potential $\Omega'[\Sigma(h)]$ of these solutions, and thus the full Potthoff functional can be expressed as:

$$\Omega[\Sigma(h)] = \Omega'[\Sigma(h)] + \text{Tr} \ln[-(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma(h))^{-1}] - \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}'(h)) \quad (16)$$

where \mathbf{G}' is the known physical Green function of the reference system. This relation provides us with an exact value of the functional $\Omega[\Sigma(h)]$, albeit on a restricted space of self-energies $\Sigma(h')$ which are the physical self-energies of the reference Hamiltonian H' . If we introduce the notation $\mathbf{V}(\omega) = \mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{G}'^{-1}$, we can rewrite the above as

$$\Omega[\Sigma(h)] = \Omega'[\Sigma(h)] + \text{Tr} \ln[1 - \mathbf{V}(\omega)\mathbf{G}'(\omega)] \quad (17)$$

Generally, the reference Hamiltonian H' is based on a finite, periodically repeated cluster or set of clusters. This periodicity defines a superlattice, and a corresponding reduced Brillouin zone, smaller than the original lattice's Brillouin zone.

The reference Green function \mathbf{G}' is then momentum independent, and the matrix \mathbf{V} depends on a single momentum (i.e., is diagonal in momentum indices). Eq. (17) then reduces to the more explicit form

$$\Omega(h) = \Omega'(h) + \frac{1}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \ln \det[1 - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)\mathbf{G}'(\omega)] \quad (18)$$

where now the matrices are 'small', i.e., their order is the number of degrees of freedom in the repeated unit and N is the (potentially large) number of lattice sites.

In the VCA, variational fields are added within the clusters, in order to give room to possible broken symmetries. By contrast, CDMFT does not add extra terms to the cluster, but instead uses a set of non-interacting, fictitious orbitals (the bath) that are hybridized to the cluster and represent its immediate physical environment. In CDMFT, the Potthoff functional (16) is not calculated, and the solution is found instead by imposing a self-consistency relation between the cluster Green function \mathbf{G}' and the projection of the lattice Green function \mathbf{G} onto the cluster. In CDIA, a bath system is introduced, just like in CDMFT, but the solution is found by solving the Euler equation (14), like in VCA. This allows us to also introduce variational fields on the cluster if needed, and at the same time gives a better description of temporal fluctuations (because of the presence of a bath), which is important to correctly capture the Mott transition.

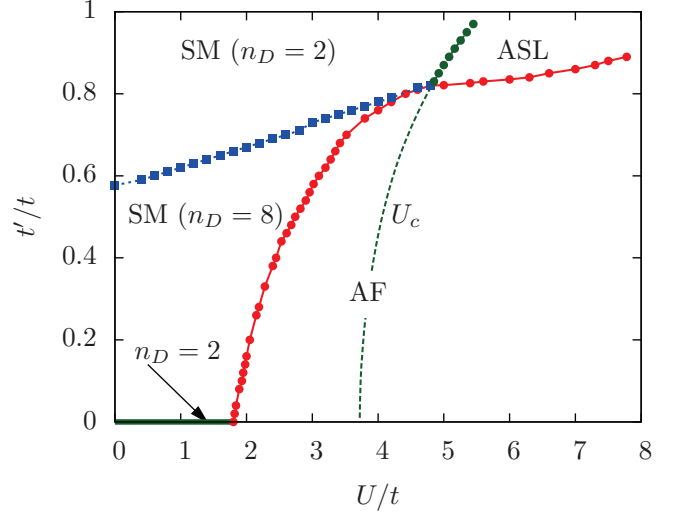


FIG. 5. (color online). Phase diagram of the half-filled Kitaev-Hubbard model (Eq. (1)) on the $U - t'$ plane ($t = 1$). n_D is to the number of Dirac points in the semi-metallic (SM) phase; the $t' = 0$ limit corresponds to graphene ($n_D = 2$), represented by a green line. The dashed line indicates the first-order Mott transition in the normal (non magnetic) state. The antiferromagnetic (AF) insulator phase is bounded by the red curve. The algebraic spin liquid (ALS) phase is the region of gapped spectrum and zero staggered magnetization.

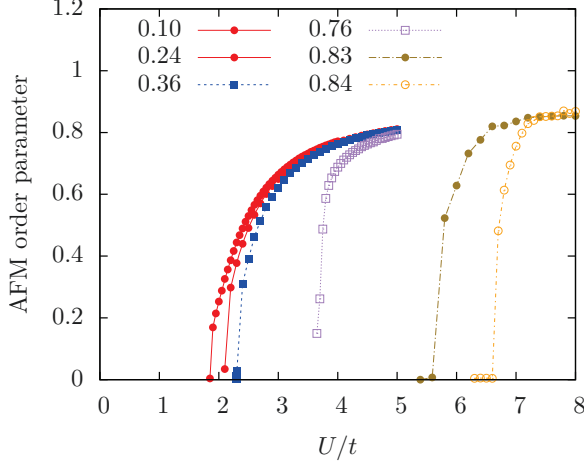


FIG. 6. (color online) The antiferromagnetic order parameter as a function of interaction U for different spin-dependent hopping t' . We observe a continuous transition for $0 < t' \leq 0.4$, a weakly discontinuous transition when $0.4 < t' < 0.83$ and a discontinuous transition for $t' \geq 0.83$.

B. Reference system

The reference system used in this work is based on a unit cell made of two four-site clusters, the second obtained from the first by a spatial inversion and a shift, as illustrated on Fig. 4. Together, these two clusters form an 8-site supercluster that tiles the honeycomb lattice. Each of these two clusters contains four spatial sites and 6 bath sites. The bath sites have no position per se, but can be thought of as representing the nearest sites of each cluster's environment, and are illustrated with this in mind on Fig. 4 (small colored circles). This is why they are hybridized with the cluster boundary sites only, not the central site.

The reference Hamiltonian has the following expression:

$$H' = \sum_{(i,j)\alpha} \left\{ c_i^\dagger \left(\frac{t + t' \sigma^\alpha}{2} \right) c_j + \text{H.c.} \right\} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{\mu,\sigma} \varepsilon_\mu a_{\mu\sigma}^\dagger a_{\mu\sigma} + \sum_{i,\mu} c_i^\dagger \left(\theta_{i\mu} + \vartheta_{i\mu} \sigma^{\alpha(i,\mu)} \right) a_\mu + \text{H.c.} \quad (19)$$

where $a_{\mu\sigma}$ annihilates an electron of spin σ at the bath orbital μ , ε_μ is the energy of the bath orbital μ , $\theta_{i\mu}$ is the hybridization between the bath orbital μ and site i , and $\vartheta_{i\mu}$ a corresponding spin-dependent hybridization. The Pauli matrix $\sigma^{\alpha(i,\mu)}$ appearing in the bath hybridization is determined by the corresponding orientation (x , y or z) of the hybridization link on Fig. 4. ε_μ , $\theta_{i\mu}$ and $\vartheta_{i\mu}$ will be treated like variational parameters, and the solution adopted will be such that $\Omega(\varepsilon, \theta)$ is stationary. Here the sum over i, j is restricted to the cluster. At a particle-hole symmetric point, such as the normal phase at $\mu = U/2$, only two of these bath parameters are independent, because of the symmetry of the cluster: $\theta_{i\mu} = \theta$, for all (i, μ) and $\varepsilon_\mu = \pm\varepsilon$, where the $+$ sign applies to $\mu = 1, 2, 3$

and the $-$ sign to $\mu = 4, 5, 6$. Particle-hole symmetry forces $\vartheta_{i\mu}$ to vanish; however, this will no longer be the case in the antiferromagnetic phase.

We probe the antiferromagnetic phase by adding to the cluster Hamiltonian H' the term:

$$H'_M = M \left[\sum_{i \in A} (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}) - \sum_{i \in B} (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}) \right] \quad (20)$$

where $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$, A and B stand for the two sublattices of the honeycomb lattice, and M , the antiferromagnetic Weiss field, is an additional variational parameter. The values of this Weiss field on the two clusters will be opposite. In addition, as mentioned above, a spin-dependent hybridization $\vartheta_{i\mu} = \vartheta$, for all (i, μ) , will be allowed, which makes a total of 4 independent variational parameters in that phase.

The matrix $\mathbf{V}(\mathbf{k}, \omega)$ of Eq. (18) contains all the information about the dispersion relation on the honeycomb lattice, including the hopping terms between the two clusters forming the repeated unit, as well as the hybridization functions associated with the baths connected to the two clusters. Because of the two clusters in the unit cell, all matrices (\mathbf{G}' , \mathbf{V} , etc.) have a block structure. The cluster Green function \mathbf{G}' is block diagonal, but \mathbf{V} isn't. However, all the frequency dependence of \mathbf{V} lies in the block-diagonal components, and all the momentum dependence lies in the block off-diagonal components (that is not a general statement, but true for the system under study).

C. Limitations of CDIA and cluster methods

The strength of CDIA, and of other cluster methods like VCA, CDMFT and DCA, resides in their inclusion of short-range spatial correlations and of dynamical correlations. However, they have the following limitations: (1) They do not take into account long range, two-particle fluctuations. Therefore they are insensitive to a possible destabilization of order by collective excitations, and in particular do not contain the physics behind the Mermin-Wagner theorem. (2) Like mean-field theory, they cannot find orderings that are not programmed into them. Specifically, the bath parameters or Weiss fields must allow for a given broken symmetry to occur in order for the corresponding order to possibly emerge. (3) The order probed must be commensurate with the repeated unit (unit cell) of the system; incommensurate order and order with large periods cannot be described in this framework. (4) Anything about two-particle excitations is confined to the cluster itself, and suffers from strong finite-size effects.

Thus CDIA will make statements about the Mott transition or static (e.g. magnetic) order, but not about the type of spin liquid associated with the Mott phase. For that, other techniques must be used, as done in Ref. 17. Even if we were to compute the dynamical spin susceptibility $\chi_{ij}(\omega)$, it would be confined to each cluster, and would show a sizeable spin gap due to finite-size effects alone, which would lead us to the (wrong) conclusion that the spin liquid associated with the Mott insulator is short-ranged instead of algebraic.

Both CDMFT and CDIA introduce bath orbitals to better capture quantum fluctuations in the time domain. An advantage of CDIA over CDMFT lies in the possibility of adding Weiss fields to the cluster in order to probe broken symmetry phases more easily. Other advantages, described for instance in Refs 3, 23, and 26, include a better description of the Mott transition (with a clear hysteresis between the metallic and insulating solutions). In addition, CDMFT with a finite bath has an ambiguity in its self-consistency procedure, which does not exist in CDIA, since the latter is based on an exact variational principle. However, for a given cluster and bath, CDIA is more demanding numerically, essentially because applying the variational principle requires a longer sequence of exact diagonalizations than the CDMFT self-consistent procedure, and convergence is more delicate.

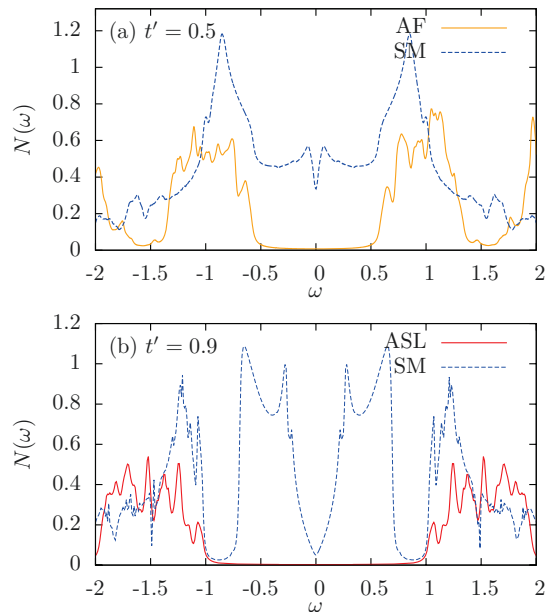


FIG. 7. (color online) Density of states $N(\omega)$ for different solutions on the phase diagram of Fig. 5. Top panel: $t' = 0.5$; bottom panel: $t' = 0.9$. Note that the two semi-metallic solutions, ($t' = 0.5t$, $U = t$) and ($t' = 0.9t$, $U = t$), should have a vanishing density of states at the Fermi level, but this is hidden here by the use of a Lorentzian broadening $\eta = 0.01t$. The semi-metal with eight Dirac points (top panel) has a narrower gap-like feature near the Fermi level, compared to the semi-metal with two Dirac points only (bottom panel).

IV. RESULTS AND DISCUSSION

We first used the CDIA to locate the Mott transition as U is increased from zero, for values of t' in the interval $[0, 1]$ (negative values of t' are equivalent to positive values, except for the chirality of Dirac points, which is reversed). We forbid the antiferromagnetic solution by setting the corresponding Weiss field to zero. The Mott transition is discontinuous, displays hysteresis, and occurs at a critical value U_c at which the grand potential Ω of the semi-metallic is the same as that

of the insulating solutions. This transition line is shown as a green (dashed) line on Fig. 5. When comparing with previous results on the Mott transition in graphene,[3] one must recall the factor of $\frac{1}{2}$ appearing in front of t in the Hamiltonian (1), which means that the scale of the U axis on Fig. 5 must be multiplied by 2.

The semi-metallic side of the Mott transition is made of two different phases, depending on the number of distinct Dirac points (2 or 8). This point was overlooked in Ref. 17. At $U = 0$, the transition between the two SM occurs at $t' = 1/\sqrt{3}$, as explained above. For $U > 0$, the transition is still visible by carefully looking at the spectral function computed from the CDIA solution and is indicated by the blue squares on Fig. 5. Along the Mott line, this transition occurs towards $t' \approx 0.82$. Note that the graphene limit ($t' = 0$, indicated by a green full line on the figure) is singular, since the additional Dirac points, as well as the Berry curvature, appear as soon as $t' \neq 0$.

We then relax the constraint on the AF Weiss field M to allow for long-range AF order and find the AF transition line shown as red squares on Fig. 5. For $t' < 0.82t$, the AF transition preempts the Mott transition and the spin liquid state does not exist. But since the spin-dependent hopping frustrates Néel order, the critical value U_{AF} recedes towards higher values as t' increases, revealing the underlying spin liquid phase when $t' \geq 0.82t$.

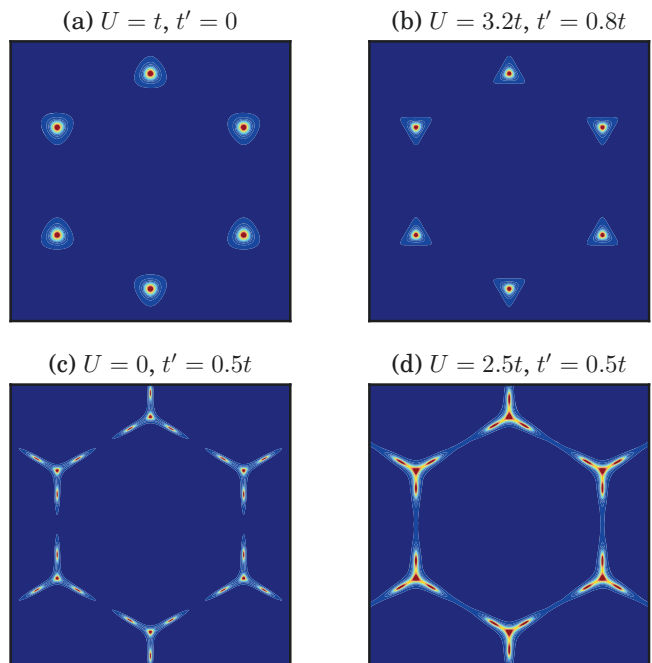


FIG. 8. (color online) Spectral function $A(\mathbf{k}, 0)$ at the Fermi level for different semi-metallic solutions in the phase diagram (Fig. 5). Top left: the graphene limit ($t' = 0$) at $U = t$, with two distinct Dirac points at \mathbf{K} and \mathbf{K}' . Top right: the same, in the semi-metallic solution bordering on the ASL. On the bottom panel, the presence of 6 additional distinct Dirac points is clearly visible at $t' = 0.5$, for both non-interacting ($U = 0$) and interacting ($U = 2.5t$) solutions. The Lorentzian broadening is $\eta = 0.04t$ for panel (a) and $\eta = 0.01t$ for the others.

Fig. 6 shows the behavior of the Néel order parameter as a function of U for different values of the spin-dependent hopping t' . For $t' \leq 0.4t$ the order parameter behaves as a square root (critical exponent of $\beta = 1/2$) around the critical Coulomb repulsion U_c . This mean-field behavior occurs because cluster methods do not capture long wavelength fluctuations needed to correctly predict critical exponents. When t' increases ($0.4t < t' < 0.82t$), the transition becomes more abrupt and the square root behavior disappears; we call this a weakly discontinuous transition. If $t' \geq 0.82t$, we observe clearly a jump of the order parameter which is a signature of a discontinuous phase transition between the AF and Mott (ASL) phases. The discontinuous character of the transition is also seen when looking at the bath parameters, which show a clear jump at the transition.

Along the boundary between the semi-metal and the AF phase, we observe that both the graphene Dirac points and the new Dirac points disappear at once. As soon as one enters the antiferromagnetic phase, the Weiss field M is nonzero. This parameter breaks parity, and it is precisely that symmetry that protects the graphene Dirac points. If the Weiss field M were part of a noninteracting Hamiltonian, then all Dirac point would disappear simultaneously, as shown around Eq. 8. Thus it is not unnatural for the two types of Dirac points to disappear together. Here the AF gap created at the Dirac points is a self-energy effect, but we should not be surprised that it affects all Dirac points simultaneously, in view of the $U = 0$ behavior when parity is broken. In addition, particle-hole symmetry is broken as soon as we enter the AFM phase. Although we are lucky enough to be positioned within the AFM gap by choosing $\mu = U/2$, the spectral function is no longer symmetric around the Fermi level.

It is remarkable that the intersection of the Néel curve with the Mott curve coincides with the topological transition between the two types of semi-metals, even though the numerical procedures to determine that point are different. Thus the four phases identified in this work meet at $(U, t') \approx (4.8, 0.82)$.

We will not argue here why the Mott phase found at $t' > 0.82$ is an algebraic spin liquid. The argument cannot be made using CDIA results, and can be found in Ref. 17 and the associated supplementary material. Note however that this phase appears at stronger Coulomb repulsion ($U/t > 4.8$) than in Ref. 17, because of our use of CDIA instead of the simpler Cluster Perturbation Theory.

Fig. 7 illustrates the density of states for AF insulator, ASL and SM regions of the phase diagram (see Fig. 5). The gap in the ASL and AF Mott insulator phase can be seen clearly at the Fermi level. For the same value $U = t$, the two semi-metallic phases have different low-energy structures, and each transits to a different phase upon increasing U .

In Fig. 8, we represent the spectral function $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$ at the Fermi level for different semi-metallic solutions of the

phase diagram (Fig. 5). The non-interacting case solved analytically at the beginning is correctly represented with the six additional Dirac points when $t' \leq t'_c$ as shown in Fig. 8 (c). Above this critical value and at $t' = 0$, the system is graphene-like with two Dirac points (Fig. 8 (a) and (b)). The features observed in (d) are similar to those of the noninteracting case (c), but broader.

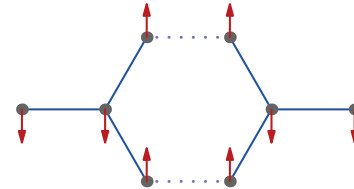


FIG. 9. (color online) Another possible magnetic order, with ordering wavevector $\mathbf{Q} = \mathbf{M}$, probed in this work but for which no solution was found in the range of U and t' covered.

In principle, other magnetic orders could exist, and compete with both the simple AF order studied here and the spin liquid. We have probed a stripe-like collinear magnetic order with ordering wavevector $\mathbf{Q} = \mathbf{M}$ (see Fig. 9), without finding any solution. Although this does not eliminate completely the possibility of competing order being present, it strengthens our point that the Mott phase exists when t' is close to 1 and U large enough.

V. CONCLUSION

We have investigated the phase diagram of the half-filled Kitaev-Hubbard model. The analytic solution in the non-interacting limit reveals a Lifshitz transition between two semi-metallic states, with two and eight Dirac points, respectively. The Chern number is the same for these two phases, and the transition between the two occurs as the new Dirac points annihilate pairwise, forming a semi-Dirac point precisely at the transition.[20] These two phases survive in the presence of interaction, as shown by an approximate solution of the interacting model using the Cluster Dynamical Impurity Approximation (CDIA). In principle, the transition between the two semi-metals could be observed in Bloch-Zener tunneling[19] in a cold-atoms realization of the model. Overall, the phase diagram contains four phases that meet at a single point. On the strong coupling side, these are an antiferromagnetic phase at low t' , and a spin liquid phase (shown to be an algebraic spin liquid in Ref. 17) at high t' . The transition from the antiferromagnet to the spin liquid is discontinuous, whereas the transition from the semi-metal to the antiferromagnet, which pre-empt a Mott transition, is continuous.

We gratefully acknowledge discussions with R. Shankar and M.S. Laad. Computational resources were provided by Compute Canada and Calcul Québec.

-
- [1] N. F. Mott, *Rev. Mod. Phys.*, **40**, 677 (1968).
- [2] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.*, **70**, 1039 (1998).
- [3] S. R. Hassan and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 096402 (2013).
- [4] P. Fazekas and P. Anderson, *Philosophical Magazine*, **30**, 423 (1974).
- [5] W. Rantner and X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 3871 (2001).
- [6] I. Affleck and J. B. Marston, *Phys. Rev. B*, **37**, 3774 (1988).
- [7] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, and G. Saito, *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 107001 (2003).
- [8] J. Park, J.-G. Park, G. S. Jeon, H.-Y. Choi, C. Lee, W. Jo, R. Bewley, K. A. McEwen, and T. G. Perring, *Phys. Rev. B*, **68**, 104426 (2003).
- [9] J. S. Helton, K. Matan, M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, Y. Yoshida, Y. Takano, A. Suslov, Y. Qiu, J.-H. Chung, D. G. Nocera, and Y. S. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 107204 (2007).
- [10] S.-H. Lee, H. Kikuchi, Y. Qiu, B. Lake, Q. Huang, K. Habicht, and K. Kiefer, *Nature materials*, **6**, 853 (2007).
- [11] M. Hermele, Y. Ran, P. A. Lee, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. B*, **77**, 224413 (2008).
- [12] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White, *Science*, **332**, 1173 (2011).
- [13] Y. Iqbal, F. Becca, S. Sorella, and D. Poilblanc, *Phys. Rev. B*, **87**, 060405 (2013).
- [14] P. Sahebsara and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 136402 (2008).
- [15] K. S. Tikhonov, M. V. Feigel'man, and A. Y. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 067203 (2011).
- [16] A. Kitaev, *Annals of Physics*, **321**, 2 (2006), ISSN 0003-4916, January Special Issue.
- [17] S. R. Hassan, P. V. Sriluckshmy, S. K. Goyal, R. Shankar, and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 037201 (2013).
- [18] S. R. Hassan, S. Goyal, R. Shankar, and D. Sénéchal, *Phys. Rev. B*, **88**, 045301 (2013).
- [19] L.-K. Lim, J.-N. Fuchs, and G. Montambaux, *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 175303 (2012).
- [20] R. de Gail, J.-N. Fuchs, M. Goerbig, F. Piéchon, and G. Montambaux, *Physica B: Condensed Matter*, **407**, 1948 (2012).
- [21] Y. Yamaji, T. Misawa, and M. Imada, *Journal of the Physical Society of Japan*, **75**, 094719 (2006).
- [22] M. Balzer, B. Kyung, D. Sénéchal, A. M. S. Tremblay, and M. Potthoff, *Europhys. Lett.*, **85**, 17002 (2009).
- [23] D. Sénéchal, *Phys. Rev. B*, **81**, 235125 (2010).
- [24] A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B*, **62**, R9283 (2000); G. Kotliar, S.Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 186401 (2001).
- [25] M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B*, **32**, 429 (2003).
- [26] For a recent review, see M. Potthoff, in *Theoretical methods for Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, edited by A. Avella and F. Mancini (Springer, 2012) Chap. 9.
- [27] J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.*, **118**, 1417 (1960).
- [28] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 206402 (2003).

3.1 Complément : hystérésis et valeurs critiques

La méthode permettant d'identifier la transition topologique dans la phase semi-métallique est décrite dans l'article. Dans cette section, nous détaillons comment la transition métal-isolant et la courbe délimitant l'antiferromagnétisme et les autres phases du diagramme est obtenue (cette explication ne figure pas dans l'article). Pour obtenir ces deux courbes, nous avons fait des simulations en augmentant l'interaction de Coulomb U et en diminuant U . La transition semi-métal-isolant est révélée par un changement brusque des paramètres variationnels du système. À la figure 3.1, on montre le comportement de l'énergie ε_1 d'une orbitale de bain dans la solution semi-métallique et isolante. Au passage d'une solution à l'autre, l'énergie de orbitale de bain présente un saut à la valeur critique de l'interaction de Coulomb. Cependant, dépendant du point de départ de notre simulation, on peut distinguer deux valeurs critiques différentes U_{c1} et U_{c2} de l'interaction de Coulomb. Ainsi, une hystérésis apparaît comme le montre la figure 3.1. Entre ces valeurs critiques, indiquées par les lignes verticales pointillées sur le graphique, on a des solutions mixtes.

Par définition, les énergies libres des deux phases se croisent à la valeur critique U_c , telle que $U_{c1} < U_c < U_{c2}$. En pratique, l'énergie libre est donnée par la fonctionnelle de Potthoff. Comme le montre la figure 3.2, les fonctionnelles de Potthoff en augmentant U et en diminuant U se croisent en un point critique U_c , pour une valeur fixée de t' . Cette valeur U_c est celle représentée dans le diagramme de phase de l'article pour différentes valeurs de t' .

Quand $U_{c1} < U < U_c$, la solution isolante est métastable, alors que si $U_c < U < U_{c2}$, la solution métallique est instable.

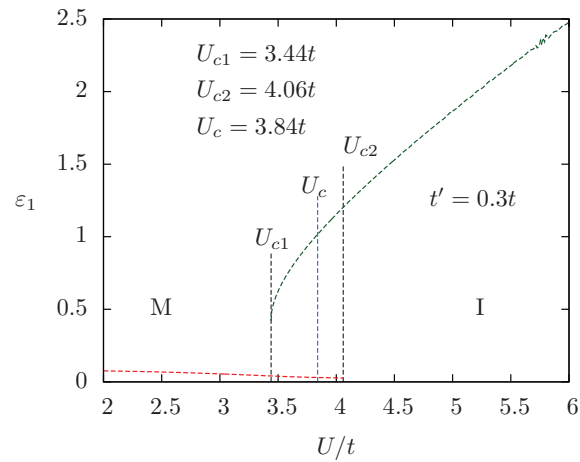


FIGURE 3.1 L'énergie ε_1 de l'orbitale de bain en fonction de l'interaction de Coulomb U à $t' = 0.3t$. La courbe rouge en pointillée correspond au cas où on augmente U et la courbe verte en pointillée, le cas contraire. On observe un saut de l'énergie de l'orbitale de bain au passage d'une solution semi-métallique M à une solution isolante I. On distingue trois valeurs critiques de l'interaction de Coulomb. U_{c1} et U_{c2} sont respectivement obtenus en augmentant et en diminuant U . la valeur critique U_c est celle déterminée par le croisement des fonctionnelles de Potthoff comme le montre la figure 3.2.

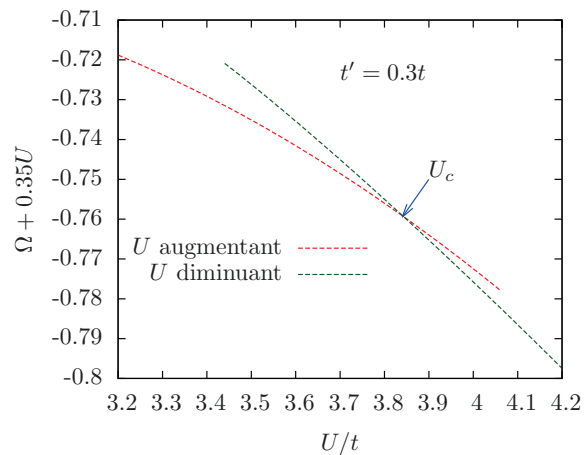


FIGURE 3.2 Fonctionnelles de Potthoff Ω obtenues en augmentant U et en diminuant U pour $t' = 0.3t$. Le croisement des fonctionnelles de Potthoff des deux solutions détermine la valeur critique U_c . Cette dernière est indiquée par une flèche sur le graphique.

Chapitre 4

Supraconductivité de symétrie d dans les échelles de spin faiblement couplées dopées en trous

Ce deuxième projet étudie la phase supraconductrice du modèle de Hubbard défini sur le réseau en treillis. Ce modèle constitue une description théorique simplifiée du matériau $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. Ce matériau appartient à la grande famille des cuprates, et fait partie des matériaux fortement corrélés. La structure cristallographique, comme décrite au chapitre 1, est constituée de plans de chaînes de CuO et de plans d'échelles de Cu_2O_3 . Les plans sont séparés par des atomes de strontium et de calcium. D'un point de vue expérimental, la supraconductivité du matériau dopé en trous a été observée sous pression. La résistivité subit une chute considérable lorsque le dopage en atomes de Ca est porté à $x = 13,6\%$ et que la pression atteint 3 GPa. Cependant, la température critique $T_c = 12$ K est faible comparée à celle des supraconducteurs à haute température critique. Néanmoins, le matériau présente des propriétés similaires aux cuprates et reste le seul supraconducteur à base d'oxyde de cuivre n'ayant pas une structure plane. Pour cette raison, l'étude du $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ constitue un moyen de comprendre la physique des phases supraconductrices d'une manière générale.

Notre utilisation des méthodes numériques telles que l'approximation de l'amas variationnel (VCA) et le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) permet de conclure que le réseau en treillis comporte bien une phase supraconductrice. La supraconductivité existe dans une gamme de densité électronique s'échelonnant entre le demi-remplissage et un dopage d'environ 20%. La symétrie du

paramètre d'ordre supraconducteur dans les échelles découplées est de type d , comme le confirment plusieurs études. Néanmoins, la symétrie du paramètre d'ordre dans les échelles faiblement couplées reste toujours un sujet de recherche. Notre étude par l'approximation de l'amas variationnel (VCA), indique que la supraconductivité est peut être chirale, c'est-à-dire complexe de type $d + id$. Cela signifie que le paramètre d'ordre supraconducteur brise la symétrie par inversion du temps. Ainsi, physiquement parlant, ce système porterait un courant spontané à la périphérie de l'échantillon même en l'absence de champ magnétique appliqué.

En plus de l'étude de la supraconductivité, nous nous sommes aussi intéressés à la physique de ce modèle au demi-remplissage, où le paramètre d'ordre supraconducteur est nul. Les résultats obtenus, tels que le diagramme de phase et la densité d'états, sont décrits à la section suivante, qui sert de complément à l'article.

d-wave superconductivity in coupled ladders

J. P. L. Faye,¹ S. R. Hassan,² P.V. Sriluckshmy,² G. Baskaran,^{2,3} and D. Sénéchal¹

¹*Département de physique and RQMP, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1*

²*The Institute of Mathematical Sciences, C.I.T. Campus, Chennai 600 113, India*

³*Perimeter Institute of Theoretical Physics, Waterloo, Ontario, Canada.*

(Dated: June 4, 2015)

We study the one-band Hubbard model on the trellis lattice, a two-dimensional frustrated lattice of coupled two-leg ladders, with hopping amplitude t within ladders and t' between ladders. For large U/t this is a model for the cuprate $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. We investigate the phase diagram as a function of doping for $U = 10t$ using two quantum cluster methods: The variational cluster approximation (VCA), with clusters of sizes 8 and 12, and Cellular dynamical mean field theory (CDMFT), both at zero temperature. Both methods predict a superconducting dome, ending at roughly 20% doping in VCA and 15% in CDMFT. In VCA, the superconducting order parameter is complex in a range of doping centered around 10%, corresponding to bulk chiral, T -violating superconductivity. However, the CDMFT solution is not chiral. We find evidence for a migration of the Cooper pairs from the inter-ladder region towards the plaquettes as doping is increased.

I. INTRODUCTION

Inspired by the discovery of high- T_c superconductivity, Dagotto *et al.* predicted a superconducting phase in a theoretical model consisting of weakly-coupled, quasi-one-dimensional ladders. This model exhibits a spin-gap and d -wave hole-pair formation away from half filling [1–3]. This prediction was realized in the copper oxide-based ladder material $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ with hole doping. At $x = 13.6$, the critical temperatures under pressures of 3 GPa and 4.5 GPa are $T_c = 12\text{K}$ and $T_c = 9\text{K}$, respectively [4]. At $x = 11.5$, a superconducting dome is seen as a function of pressure [5]. Recently, the critical temperature of the $x = 11$ compound $\text{Sr}_3\text{Ca}_{11}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ has been doubled, from 12K to 24K, by applying a weak uniaxial pressure of 0.06 GPa [6].

Many theoretical studies have been reported on the single-ladder Hubbard model, with and without doping, using a variety of methods: Exact diagonalizations [2, 7], density-matrix renormalization group [8], resonating-valence-bond (RVB) mean-field theory [9], bosonization [10] and quantum Monte Carlo (QMC) [11, 12]. A consistent result from those studies is the emergence of d -wave superconducting correlations in the double leg ladder upon doping. Coupled ladders described by the trellis lattice have been investigated using the Fluctuation Exchange (FLEX) method, confirming the possibility of d -wave superconductivity at half-filling [13].

In this paper, we report on a theoretical study of superconductivity in the one-band Hubbard model on the trellis lattice away from half-filling, at zero temperature. We use the Variational Cluster Approximation (VCA) [14] and Cellular Dynamical Mean-Field Theory (CDMFT) [15, 16] with an exact diagonalization solver. For the range of on-site repulsion studied, superconductivity does not occur at half-filling, but a superconducting dome appears upon doping. Moreover, the superconducting order parameter computed from VCA becomes complex in a range of doping centered around 10%, thus breaking time-reversal symmetry. The energy gain from the chiral nature of superconductivity is small, at best 6 to 7% of the condensation energy, and the chiral solution is not found with CDMFT.

This paper is organized as follows. In Sect. II the model is presented, as well as the structure of singlet superconductivity in the BCS approximation. In Sect. III the VCA technique is summarized and the results of its application are presented; this is the main part of the paper. In Sect. IV CDMFT is applied in order to confirm by an independent method the occurrence of superconductivity. We add a short discussion and conclude in Sect. V.

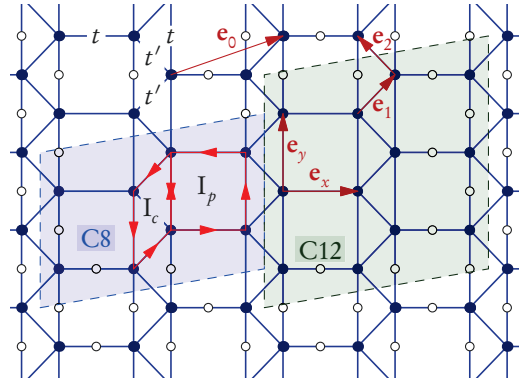


FIG. 1. (Color online) Model for the ladder cuprate $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ on the trellis lattice. The dots stand for copper atoms. The open circles represent oxygen atoms (not shown in the middle of the figure), which are not explicitly included in the model. The shaded areas are the clusters used in VCA, labeled C8 and C12. I_p and I_c are the supercurrent loops circulating around the plaquette and between the plaquettes, respectively.

II. MODEL AND MEAN-FIELD REPRESENTATION

The Hamiltonian of the one-band, repulsive Hubbard model on the trellis lattice is

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (1)$$

where $c_{i\sigma}$ annihilates an electron of spin σ at site i , $t_{ij} = t_{ji}$ is the hopping amplitude between sites i and j , and $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$

is the number operator at site i and U the on-site Coulomb repulsion. The density of electrons is controlled by the chemical potential μ . The only nonzero hopping terms are indicated by inter-site links on Fig. 1, with $t_{ij} = t$ on the ladder plaquettes, and $t_{ij} = t'$ between ladders. Model (1) has two bands: the unit cell contains two orbitals, separated by \mathbf{e}_x on the figure. The vectors \mathbf{e}_0 and \mathbf{e}_y on Fig. 1 define a basis for the lattice. For convenience, we define the Brillouin zone exactly like on the graphene lattice.

This model offers an approximate description of $\text{Sr}_3\text{Ca}_{11}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, wherein each site represents a copper atom. In the actual material, oxygen atoms are located midway between copper atoms on the links of each square plaquette. The relation between hole doping δ (the electron density is $n = 1 - \delta$) and Ca doping x in the material is not simple, as δ is also affected by pressure. Throughout this paper we set $t = 1$ and $t' = 0.15$; this ratio t'/t is taken from band structure calculations [17]. The value of U/t will be set to 10 in most VCA and CDMFT computations.

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_y) - \mu & \gamma_{\mathbf{k}} & \theta_{\mathbf{k}} & \eta_{\mathbf{k}} \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* & -2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_y) - \mu & \eta_{-\mathbf{k}} & \theta_{\mathbf{k}} \\ \theta_{\mathbf{k}}^* & \eta_{-\mathbf{k}}^* & 2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_y) + \mu & -\gamma_{\mathbf{k}} \\ \eta_{\mathbf{k}}^* & \theta_{\mathbf{k}}^* & -\gamma_{\mathbf{k}}^* & 2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_y) + \mu \end{pmatrix} \quad (4)$$

with $\gamma_{\mathbf{k}} = -e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_x} - t'e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_1} - t'e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_2}$. This is the most general form for singlet superconductivity. If we assume only nearest-neighbor pairing with amplitudes D_x , $-D_y$ and $D_{1,2}$ in the directions \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y and $\mathbf{e}_{1,2}$ respectively, the anomalous terms of that matrix are

$$\begin{aligned} \theta_{\mathbf{k}} &= -D_y \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_y) \\ \eta_{\mathbf{k}} &= D_x e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_x} + D_1 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_1} + D_2 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_2} \end{aligned} \quad (5)$$

The choice of sign for D_y reflects our anticipation of d -wave superconductivity on the plaquettes.

If the superconductor is time-reversal (T) invariant, the components of $H_{\mathbf{k}}$ satisfy the relation $H_{-\mathbf{k}} = H_{\mathbf{k}}^*$. This implies that the amplitudes $D_{x,y,1,2}$ defined above are all real. On the other hand, if any one of them is complex, the superconductor breaks time-reversal invariance.

Let us stress that we are not performing a true mean-field computation here: there is no factorization of the interaction, no self-consistent procedure, etc. Indeed, the Hubbard model, with its local repulsion, is not amenable to a self-consistent (BCS) mean-field computation of d -wave superconductivity. We are simply illustrating the form that superconductivity can take in this model, in order to compare with the complete variational or self-consistent computations reported in Sect. III.

B. Order parameter

The most general way to represent superconducting order is to plot the momentum-dependent order parameter $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$,

A. Superconductivity

What form can superconductivity take in such a model? To answer this question, let us first provide a description of the superconducting order-parameter at the mean-field level. It is then convenient to adopt a Nambu description, with the multiplet of destruction/creation operators

$$\mathcal{C}_{\mathbf{k}} = (c_{1\uparrow}(\mathbf{k}), c_{2\uparrow}(\mathbf{k}), c_{1\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}), c_{2\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k})) \quad (2)$$

where the first index of each operator is a sublattice index, distinguishing the left and right sites of each rung. This array of operators is used in a matrix description of the non-interacting, mean-field Hamiltonian

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{C}_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\mathbf{k}} \mathcal{C}_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

with the 4×4 Hermitian matrix

defined as the integral over frequency of the Gorkov function (the anomalous part of the Green function):

$$\Delta_{ab}(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F_{ab}(\mathbf{k}, i\omega) \quad (6)$$

Here (a, b) are sublattice indices taking two possible values, associated with the left and right legs of the ladder. The Gorkov function F_{ab} is the top-right block of the Nambu Green function $G_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)$ defined as follows at zero temperature:

$$\begin{aligned} G_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega) &= \langle \Omega | \mathcal{C}_{\mu}(\mathbf{k}) \frac{1}{\omega - H + E_0} \mathcal{C}_{\nu}^\dagger(\mathbf{k}) | \Omega \rangle \\ &+ \langle \Omega | \mathcal{C}_{\nu}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{1}{\omega + H - E_0} \mathcal{C}_{\mu}(\mathbf{k}) | \Omega \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

where ω is a complex-valued frequency, $|\Omega\rangle$ is the many-body ground state and E_0 the ground state energy. For a two-band model, $F_{ab} = G_{a,b+2}$. In the special case of the non-interacting BCS Hamiltonian (3), the Nambu Green function is

$$G_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega) = \left(\frac{1}{\omega - H_{\mathbf{k}}} \right)_{\mu\nu} \quad (8)$$

In order to connect with the more familiar one-band BCS theory, let us point out that in that case the matrix $H_{\mathbf{k}}$ has the simpler form

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu & \theta_{\mathbf{k}} \\ \theta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu \end{pmatrix} \quad (9)$$

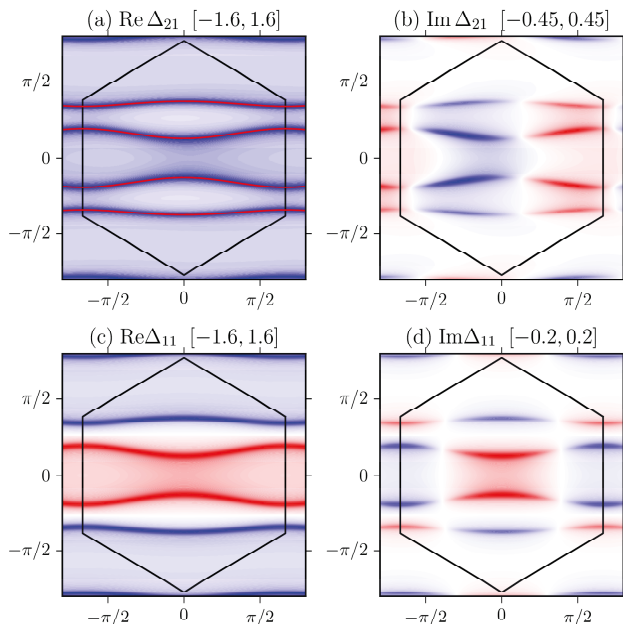


FIG. 2. (Color online) Superconducting order parameter $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$ for the BCS Hamiltonian (3), as a function of wave-vector, with parameters $D_x = 0.09$, $D_y = 0.03$ and $D_1 = D_2 = -0.01 + 0.008i$. Doping is set at 10%. The Brillouin zone is indicated. Panels (a) and (b) show the real and imaginary parts of the rung component (different sublattices), whereas panels (c) and (d) show the leg component (same sublattice). Red means negative, blue positive and the range is indicated on top of each panel. The normal state Fermi surface is shown in red on panel (a).

where $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ is the dispersion relation and $\theta_{\mathbf{k}}$ the gap function. The order parameter is then simply

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\theta_{\mathbf{k}}|^2}} \quad (10)$$

Figure 2 illustrates the superconducting order parameter $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$ in the particular case of model (3). This is later compared to a solution, obtained through VCA, that contains correlation effects. We have chosen superconducting amplitudes (D_x, D_y, D_1, D_2) that break time reversal slightly and match local order parameters of an actual VCA solution described later on. The fact that $\text{Im}\Delta_{12}(\mathbf{k}) \neq -\text{Im}\Delta_{12}(-\mathbf{k})$ and $\text{Im}\Delta_{11}(\mathbf{k}) \neq 0$ is a visual signature of time-reversal breaking.

III. THE VARIATIONAL CLUSTER APPROXIMATION

We use the Variational Cluster Approximation (VCA) [14] to investigate the zero-temperature phase diagram of model (1), more specifically the existence of d -wave superconductivity upon hole doping for several values of U . VCA – also called VCPT in its early days – has been used to study the emergence of d -wave superconductivity in a simple description of the high- T_c cuprates based on the Hubbard

model [18, 19]. It is based on Potthoff’s self-energy functional approach [20]. For a review, see Ref. [21].

A. Description of the method

In VCA, we must distinguish between the original Hamiltonian H , defined on the infinite lattice, and a reference Hamiltonian H' , defined on a small cluster of atoms. H' is a restriction of H to the cluster, except that a finite number of Weiss fields may be added to it, in order to probe certain broken symmetries. Any one-body term can also be added to H' . The electron self-energy $\Sigma(\omega)$ associated with H' is used as a variational self-energy, in order to construct the Potthoff self-energy functional:

$$\Omega[\Sigma(h)] = \Omega'[\Sigma(h)] + \text{Tr} \ln[-(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma(h))^{-1}] - \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}'(h)) \quad (11)$$

where \mathbf{G}' is the physical Green function of the cluster, \mathbf{G}_0 is the non interacting Green function of the original model and h denotes collectively the coefficients of all the adjustable one-body terms added to H' acting as variational parameters. The symbol Tr stands for a functional trace, i.e., a sum over all degrees of freedom (e.g. momenta or sites) and frequencies. Ω' is the ground state energy (chemical potential included) of the cluster which, along with the associated Green function \mathbf{G}' , is computed numerically, in our case via the exact diagonalization method at zero temperature.

Equation (11) provides us with an exact, non-perturbative value of the Potthoff functional $\Omega[\Sigma(h)]$, albeit on a restricted space of self-energies $\Sigma(h)$ which are the physical self-energies of the reference Hamiltonian H' . Expression (11) is computed numerically in order to look for stationary points of that functional, for instance via a Newton or quasi-Newton method. The resulting value of h defines the best possible self-energy $\Sigma(\omega)$ for that parameter set; the latter is then combined with \mathbf{G}_0 to form an approximate Green function \mathbf{G} for the original Hamiltonian H , from which any one-body quantity, for instance the order-parameters associated with broken symmetries, can be computed.

When confronted with competing solutions, i.e., different stationary points of $\Omega[\Sigma(h)]$ or points obtained via different sets of Weiss fields, the one with the lowest value of the Potthoff functional is selected, as Ω is an approximation of the exact free energy of the infinite system. VCA retains the correlated character of the model, since the local interaction is not factorized. The approximation may be controlled in principle by varying the size of the cluster and the number of variational parameters used.

In this work we use the clusters labeled C8 and C12 illustrated on Fig. 1. It is important to test more than one cluster, as there will be some variance in numerical results among different clusters and robust characteristics need to be identified. Larger clusters will generally lead to smaller values of the order parameter, because of in-cluster order parameter fluctuations.

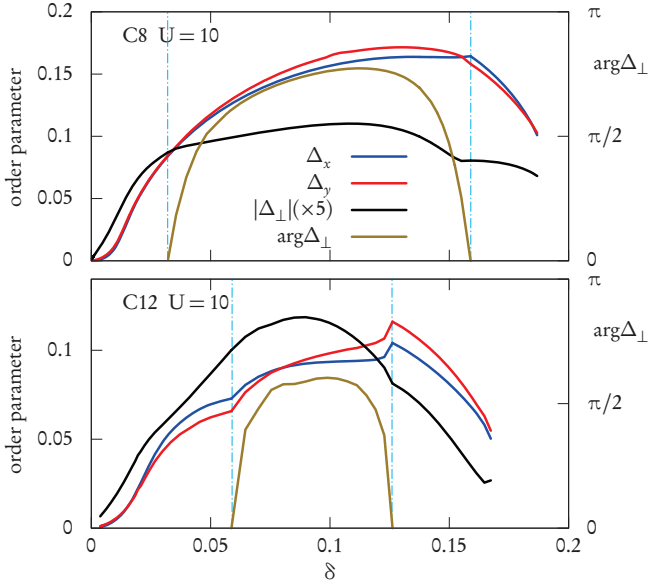


FIG. 3. (Color online) Pairing order parameters ($\Delta^x, \Delta^y, \Delta^\perp$) as a function of doping δ for the two clusters used in VCA, at $U = 10$. The complex phase of Δ^\perp can be read on the right axis. The T -breaking solution ($\arg\Delta_\perp \neq 0$) exists in a finite range of doping.

B. Superconductivity

In VCA the possible presence of d -wave superconductivity is probed by adding to the cluster Hamiltonian H' pairing operators. These may be expressed in terms of the singlet pairing operators $\hat{\Delta}_{ij} = c_{i\uparrow}c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow}c_{j\uparrow} = \hat{\Delta}_{ji}$ as follows:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_x &= \sum_{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \mathbf{e}_x} \hat{\Delta}_{ij} & \hat{\Delta}_y &= - \sum_{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \mathbf{e}_y} \hat{\Delta}_{ij} \\ \hat{\Delta}_1 &= \sum_{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \mathbf{e}_1} \hat{\Delta}_{ij} & \hat{\Delta}_2 &= \sum_{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \mathbf{e}_2} \hat{\Delta}_{ij} \end{aligned} \quad (12)$$

where the unit vectors $\mathbf{e}_{x,y,1,2}$ are defined on Fig. 1. $\hat{\Delta}_x$ is the sum of all pairing operators along rungs, $\hat{\Delta}_y$ is the sum of all pairing operators along legs, and $\hat{\Delta}_{1,2}$ are the sum of pairing operators between the ladders. In practice, the Nambu description (2) is used: A particle-hole transformation is applied to spin-down operators, giving the above pairing operators the appearance of hopping terms.

The Weiss Hamiltonian added to the cluster Hamiltonian H' takes the form

$$H'_{\text{sc}} = D_x \hat{\Delta}_x + D_y \hat{\Delta}_y + D_1 \hat{\Delta}_1 + D_2 \hat{\Delta}_2 + \text{H.c.} \quad (13)$$

where the coefficients (D_x, D_y, D_1, D_2), the so-called *Weiss fields*, are variational parameters, adjusted so as to make the Potthoff functional (11) stationary (in practice, minimum). The minus sign in front of $\hat{\Delta}_y$ in Eq. (12) means that we anticipate d -wave symmetry on the plaquette, i.e., we anticipate D_x and D_y to have the same sign, which is indeed what we find numerically.

In principle, the Weiss fields may be complex-valued, as H'_{sc} remains Hermitian anyway. However, we choose D_x to be

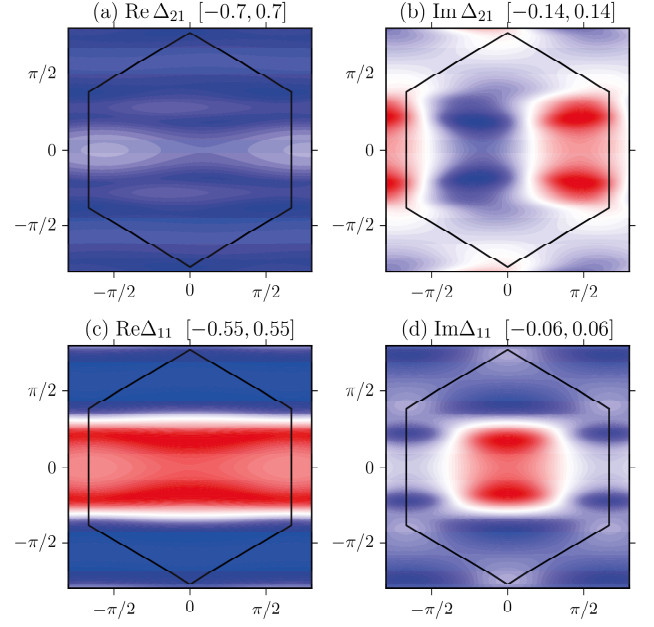


FIG. 4. (Color online) Superconducting order parameter $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$ computed from the VCA solution, as a function of wave-vector. $U = 10$ and doping is 10%. This is to be compared with the BCS order parameter of Fig. 2.

real so as to fix the overall phase. Then D_y, D_1 and D_2 can be complex. In practice, in order to limit the number of variational parameters, we assume that D_y is real and that $\text{Re}D_2 = \pm \text{Re}D_1$ and $\text{Im}D_2 = \pm \text{Im}D_1$. We found that the lowest minima of the Potthoff functional have $D_1 = D_2 \equiv D_\perp$, and in the rest of this paper we will accordingly define $\hat{\Delta}_\perp = \hat{\Delta}_1 + \hat{\Delta}_2$, for a total of 4 variational parameters: $D_x, D_y, \text{Re}D_\perp$ and $\text{Im}D_\perp$.

Figure 3 shows the order parameters $\Delta_\alpha = \langle \hat{\Delta}_\alpha \rangle + \langle \hat{\Delta}_\alpha^\dagger \rangle$, for $\alpha = x, y, \perp$, computed from the VCA Green function, as a function of hole doping, for $U = 10$ and the two clusters shown on Fig. 1. The inter-ladder order parameter Δ_\perp is complex over a range of doping: its modulus is plotted, along with its phase (right vertical axis). The superconducting dome has a maximum between 10% and 15% (depending on the cluster) and ends at about 20% doping. It falls to zero exactly at half-filling. The inter-ladder order parameter Δ_\perp is noticeably smaller than the ladder order parameters Δ_x and Δ_y , but this is roughly in line with the ratio $t'/t = 0.15$. The rung and leg order parameters (Δ_x and Δ_y) also have imaginary parts whenever Δ_\perp has one, but they are small and would not make visible contributions to $|\Delta_x|$ or $|\Delta_y|$ on the plots.

The order parameters shown on Fig. 3 are special convolutions of the general momentum-dependent order parameter $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$ with particular form factors associated with nearest-neighbor pairing. They have the advantage of simplicity, but are somewhat arbitrary. Unfortunately, the full order parameter $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$ cannot be plotted simply as a function of doping. However, Figure 4 shows $\Delta_{ab}(\mathbf{k})$ for the VCA solution at 10% doping. This is to be compared with Fig. 2, which shows the corresponding BCS order parameter, obtained by setting the

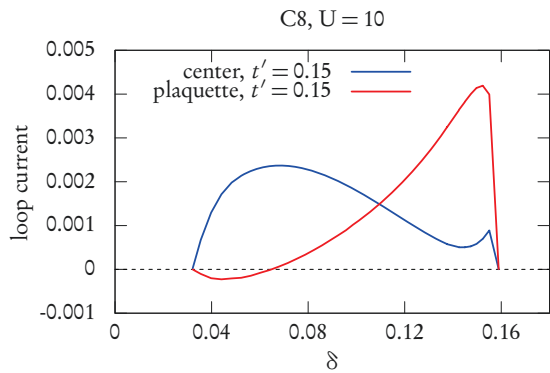


FIG. 5. (Color online) Loop supercurrents I_p and I_c circulating respectively around a plaquette and around the center parallelogram of the C8 cluster, as a function of doping, for $U = 10$. The loops are illustrated on Fig. 1

BCS fields to values that reproduce the same values of the link order parameters $\Delta_{x,y,\perp}$. We notice that the features of Fig. 4 are qualitatively the same as those of Fig. 2, although less sharp, because of strong correlation effects. The sharp lines of Fig. 2 have become broad maxima and minima, but the asymmetry of $\text{Im}\Delta_{21}$ stands out. Note that the scales (color range) differ from those of Fig. 2 by factors of two to three.

The T -breaking nature of the solutions found can also be assessed by computing chiral supercurrents. Figure 5 shows the supercurrents I_p and I_c circulating along the loops indicated on Fig. 1. These are defined as the expectation values of

$$\hat{I} = \frac{1}{i} \sum_{i \in \text{loop}, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} - \text{H.c.} \right) \quad (14)$$

where the sum is taken around the loop. The expectation values $\langle \hat{I}_{p,c} \rangle_{\text{clus}}$ in the cluster ground state vanishes if Δ_\perp is real, but is nonzero as soon as Δ_\perp develops an imaginary part. This demonstrates that, in the latter case, superconductivity is chiral: if $\text{Im}\Delta_\perp$ changes sign, the value of the Potthoff functional does not change – hence we again have a VCA solution – but the sign of the current changes. Note that these supercurrents are measured on the cluster itself, as ground state expectation values, without using the Green function, because the latter provides expectation values on the whole lattice and these current loops cancel each other when the loops are stacked on the lattice. They are computed only to underline the chiral character of the complex superconducting solutions. Note that the supercurrent loop located between the ladders dominates at small doping, whereas the opposite is true of the plaquette supercurrent. This leads us to believe that the Cooper pairs tend to locate between the ladders at small doping and move towards the plaquettes at larger doping.

The T -breaking solution has the lowest energy in a sequence of solutions that can be obtained in VCA by increasing the number of variational parameters, as illustrated on Fig. 6. We plot the value of the Potthoff functional at the solution, which is an approximation to the grand potential Ω , as a function of chemical potential μ , since Ω is by construction as a

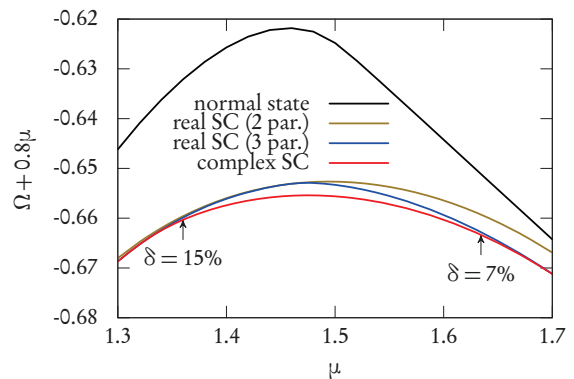


FIG. 6. (Color online) Value of the Potthoff functional at the solution as a function of chemical potential μ for $U = 10$ and different sets of variational parameters: the normal solution (no variational parameters), two T -preserving solutions, with (D_x, D_y) and $(D_x, D_y, \text{Re}D_\perp)$ used as variational parameters, and the T -violating solution with variational set $(D_x, R_y, \text{Re}D_\perp, \text{Im}D_\perp)$. The latter has the lowest value of Ω . Two values of doping are indicated for that solution. A multiple of μ is added in order to better separate the different curves.

function of μ , not density. In the top curve, no variational parameters were used, and this represents the normal solution. The second curve from the top is obtained by using the plaquette anomalous Weiss fields (D_x, D_y) as variational parameters. The third curve is obtained by adding the real part of the inter-ladder pairing D_\perp to the set. Finally, the lowest curve is obtained by adding both the real and imaginary parts of D_\perp to the set, and the corresponding solutions break time-reversal invariance. This illustrates the process by which the quality of VCA solutions is improved by adding variational parameters. Another solution, obtained by allowing D_y to take complex values, is not shown, as it is hardly distinguishable from the last one. We see that the energy advantage of the T -breaking solution is at best $0.0025t$, or roughly $\frac{1}{15}$ of the condensation energy (the difference between the normal state and superconducting state energies), and this only at the most favorable doping ($\delta \sim 12\%$). Thus, even though the VCA simulation predicts T -breaking superconductivity in this system in a range of doping, it must be kept in mind that this solution is very close in energy to other approximate solutions that do not break time-reversal symmetry. We have checked that, at optimal doping, increasing t' will increase the energy gain of the chiral solution over the purely real solution. Thus, the inter-ladder hopping t' helps stabilize the T -breaking solution.

Notice that the difference between the second and third curves on Fig. 6 increases with μ , i.e., towards smaller doping. This means that the importance of varying D_\perp is greater on the underdoped side of the dome, which confirms our interpretation that the Cooper pairs tend to locate between the ladders at small doping.

IV. THE CELLULAR DYNAMICAL MEAN FIELD THEORY

We also used Cellular Dynamical Mean Field Theory (CDMFT) to confirm the appearance of a superconducting dome by independent means.

A. Description of the method

CDMFT like VCA, proceeds by tiling the lattice with clusters and by computing an optimized self-energy for each cluster. Unlike VCA, the space of self-energies is not explored by adding Weiss fields on the cluster, but rather by coupling each cluster to a bath of uncorrelated, auxiliary orbitals that represent the effect of the cluster's environment [15, 16, 22, 23]. The cluster Hamiltonian is supplemented by bath-cluster hybridization and bath energy terms:

$$H_{\text{bath}} = \sum_{\mu,\alpha} \theta_{\alpha\mu} a_{\mu}^{\dagger} c_{\alpha} + \sum_{\mu,\nu} \epsilon_{\mu\nu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu} + \text{H.c.} \quad (15)$$

where a_{μ} denotes the annihilation operator for the bath orbital labeled μ .

This, together with the restriction of the Hubbard Hamiltonian (1) to the cluster, defines an Anderson impurity model. The cluster Green function, when traced over the bath orbitals, takes the following form as a function of complex frequency ω :

$$\mathbf{G}'^{-1}(\omega) = \omega - \mathbf{t} - \mathbf{\Gamma}(\omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) \quad (16)$$

where the hybridization matrix $\mathbf{\Gamma}(\omega)$ is

$$\mathbf{\Gamma}(\omega) = \boldsymbol{\theta}(\omega - \boldsymbol{\epsilon})^{-1} \boldsymbol{\theta}^{\dagger}. \quad (17)$$

in terms of the matrices $\theta_{\alpha\mu}$ and $\epsilon_{\mu\nu}$. The Green function $\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ for the lattice model is then computed from the cluster's self-energy as

$$\mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \mathbf{G}_0^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) \quad (18)$$

Here $\tilde{\mathbf{k}}$ denotes a reduced wave-vector, belonging to the Brillouin zone associated with the superlattice of clusters that defines the tiling. All Green function-related quantities are $2N_c \times 2N_c$ matrices, with N_c being the number of sites in the unit cell of the superlattice, which is made of one or more distinct clusters (the factor of 2 is there because of spin). \mathbf{G}_0 is the non-interacting Green function. In practice, the cluster Green function is computed from an exact diagonalization technique using variants of the Lanczos method (just like in VCA). Then the self-energy is extracted from Eq. (16).

The bath and hybridization parameters ($\epsilon_{\mu\nu}, \theta_{\alpha\mu}$) are determined by the self-consistency condition

$$\mathbf{G}'(\omega) = \frac{N_c}{N} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \quad (19)$$

(N is the [quasi-infinite] number of sites in the whole system). In other words, the local Green function $\mathbf{G}'(\omega)$ should coincide with the Fourier transform of the full Green function

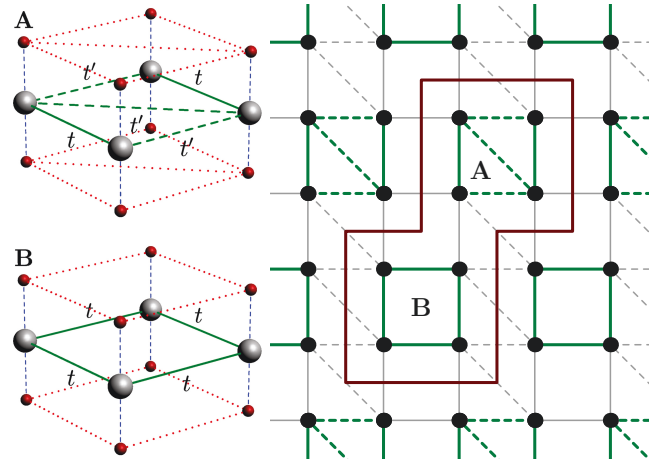


FIG. 7. (Color online) CDMFT cluster-bath system used in this work. The trellis lattice was deformed into a square lattice for simplicity. Right panel: arrangement of the two clusters A and B needed to tile the lattice. Intra- and inter-cluster hopping terms are represented by green and gray lines, respectively (full for t , dashed for t'). Left panel: pictorial representation of the two clusters: lattice sites are gray spheres and bath orbitals are represented by smaller, red spheres. Dashed blue lines are bath-cluster hybridization terms and red dotted lines anomalous terms between bath sites, forming the anomalous part of the matrix ϵ .

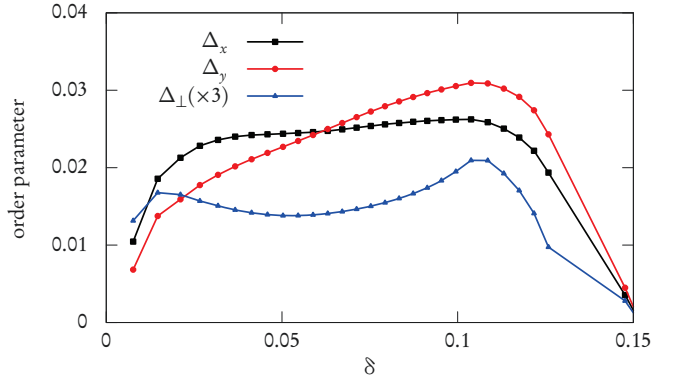


FIG. 8. (Color online) Order parameters computed from the CDMFT solutions found with the cluster-bath system illustrated in Fig. 7, as a function of doping. The CDMFT solutions do not break time-reversal invariance.

at the origin. This condition should hold at all frequencies, which is impossible in a zero-temperature implementation of CDMFT because of the finite number of bath parameters at our disposal. Therefore, condition (19) is only approximately satisfied, through the use of a merit function. Details can be found, for instance, in Ref. [23].

B. System studied and superconductivity

When modeling superconductivity in CDMFT, it is convenient to introduce anomalous terms between bath sites, thus treating bath sites as if they were forming a so-called ‘phan-

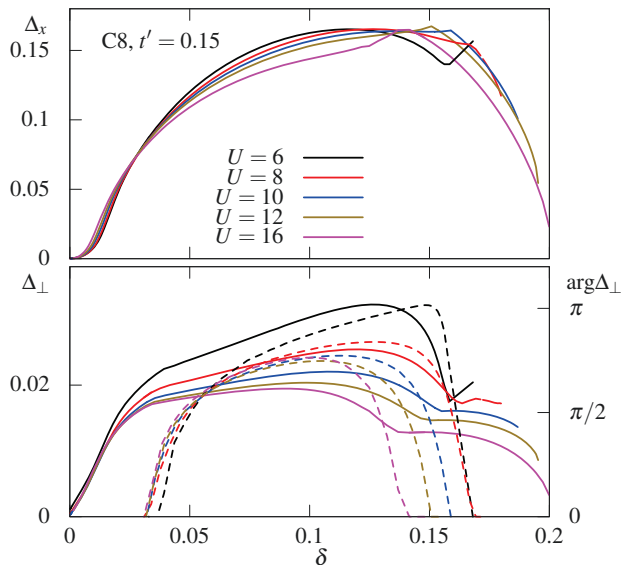


FIG. 9. (Color online) Order parameters Δ^x (top) and $|\Delta_\perp|$ (bottom) as a function of doping δ for cluster C8 and several values of on-site repulsion U .

tom cluster'. The cluster-bath system used in this work is illustrated on Fig. 7. Two unequivalent, four-site clusters form the repeated unit cell of the superlattice. The Nambu formalism is used to represent anomalous terms (see Ref. [24] for explanations of its use in the context of CDMFT). The bath orbitals are grouped into two sets of four, and within each set anomalous terms are defined that mimic what could occur on the cluster itself (hence the expression 'phantom cluster'). Each bath set has four or five links (dotted red lines on the figure) and a complex pairing operator is defined on each of these links, except on the rung link where it is assumed to be real, in order to set the global phase of the superconducting state. Taking symmetries into account, this makes for a total of 14 bath parameters for superconductivity, in addition to 8 bath orbital energies and as many hybridization parameters, for a total of 30 variational parameters.

Figure 8 shows the order parameters Δ_x , Δ_y and Δ_\perp for the CDMFT solutions obtained at $U = 10$. These solutions do not break time-reversal in any significant way ($\text{Im}\Delta_\perp < 10^{-5}$). But the superconducting dome seen in VCA is still there, although somewhat narrower (nothing beyond $\delta = 15\%$). As doping is increased, the inter-ladder pairing operator Δ_\perp has a first maximum around 1.5%, and then decreases before increasing again, carried by the other components. This is another evidence that the Cooper pairs tend to gather between the ladders at small doping.

V. DISCUSSION

Let us first point out an important difference between the present results, obtained for weakly coupled ladders, and superconductivity in the hole-doped, square lattice Hubbard model. In the latter [18, 24] the order parameter scales like

$J \sim 4t^2/U$ at large U . Here, Δ_x is nearly U -independent in the range studied, as shown on Fig. 9. Changing the ratio U/t is typically accomplished by applying pressure on the sample. However, in the case of $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, changing the pressure would not only affect the value of t , but also of t' and, more importantly, doping, as carriers migrate between the chains and the ladders. Thus mapping a change in U to an experimentally accessible control parameter is very difficult.

Let us now discuss the origin of the chiral superconductivity that we have obtained in VCA. It is known that in the repulsive, large- U Hubbard model, the lattice symmetry and connectivity play an essential role in determining the symmetry of the order parameter. On the square lattice, real d -wave ($d_{x^2-y^2}$) symmetry fits well with the four-fold coordination. On the other hand, for triangular and honeycomb lattices, $d + id$ or chiral superconductivity fits well with the three- and six-fold coordination: Chiral states carrying a $l_z = 2$ angular momentum avoid nodes in the order parameter bond values in real space, thus gaining condensation energy. Likewise, in an isolated and isotropic ladder, d -wave symmetry fits well because of the plaquettes. On the trellis lattice, we have elementary triangles, squares, and five-fold coordination. A five-fold, odd number coordination in general accommodates a complex combination of d and s components. Clearly the amplitude of the chiral component of superconductivity should increase with frustration, i.e., with t' .

How to explain, then, that VCA and CDMFT disagree on the chiral nature of superconductivity? It may be that the small energy difference between the complex and real solutions shown on Fig. 6 cannot be resolved efficiently by CDMFT, but would be resolved if the same cluster-bath systems used in CDMFT were treated by Potthoff's self-energy functional approach (a method called CDIA); in practice, this is impossible to do because of the large number of variational parameters involved.

Despite this difference, the two approaches agree on important features: (1) The absence of superconductivity at half-filling: the system is then a Mott insulator; (2) the existence of a 'dome' of d -wave superconductivity up to 15% to 20% doping; and (3) the tendency of Cooper pairs to migrate from the inter-ladder regions to the plaquettes as doping is increased. A careful study of the order parameter symmetry of the superconducting cuprate spin ladder compounds becomes important in the context of the possibility of chiral superconductivity found in this work.

ACKNOWLEDGMENTS

Discussions with A.-M.S. Tremblay are gratefully acknowledged. Computing resources were provided by Compute Canada and Calcul Québec. DS and JPLF thank NSERC (Canada) and FRQNT (Quebec) for their support. GB acknowledges the support of the Perimeter Institute for Theoretical Physics, Waterloo (Canada) and of the Science and Engineering Research Board (SERB, India) for the SERB Distinguished Fellowship.

-
- [1] E. Dagotto and A. Moreo, *Phys. Rev. B*, **38**, 5087 (1988).
- [2] E. Dagotto, J. Riera, and D. Scalapino, *Phys. Rev. B*, **45**, 5744 (1992).
- [3] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, and E. S. Swanson, *Phys. Rev. B*, **47**, 3196 (1993).
- [4] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Môri, and K. Kinoshita, *Journal of the Physical Society of Japan*, **65**, 2764 (1996).
- [5] T. Nagata, M. Uehara, J. Goto, N. Komiya, J. Akimitsu, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, H. Takahashi, T. Nakanishi, *et al.*, *Physica C: Superconductivity*, **282**, 153 (1997).
- [6] D. Mohan Radheep, R. Thiyagarjan, S. Esakkimuthu, G. Deng, E. Pomjakushina, C. L. Prajapat, G. Ravikumar, K. Conder, G. Baskaran, and S. Arumugam, *ArXiv e-prints* (2013), [arXiv:1303.0921 \[cond-mat.supr-con\]](https://arxiv.org/abs/1303.0921).
- [7] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and T. M. Rice, *Phys. Rev. B*, **53**, 251 (1996).
- [8] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 882 (1994).
- [9] S. Gopalan, T. M. Rice, and M. Sgrist, *Phys. Rev. B*, **49**, 8901 (1994).
- [10] L. Balents and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B*, **53**, 12133 (1996).
- [11] K. Kuroki, T. Kimura, and H. Aoki, *Phys. Rev. B*, **54**, R15641 (1996).
- [12] T. Dahm and D. Scalapino, *Physica C: Superconductivity*, **288**, 33 (1997).
- [13] H. Kontani and K. Ueda, *Physical review letters*, **80**, 5619 (1998).
- [14] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni, and M. Potthoff, *Phys. Rev. B*, **70**, 245110 (2004).
- [15] A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B*, **62**, R9283 (2000).
- [16] G. Kotliar, S. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 186401 (2001).
- [17] M. Arai and H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. B*, **56**, R4305 (1997).
- [18] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 156404 (2005).
- [19] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, and W. Hanke, *Phys. Rev. B*, **74**, 235117 (2006).
- [20] M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B*, **32**, 429 (2003).
- [21] M. Potthoff, in *Theoretical methods for Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, edited by A. Avella and F. Mancini (Springer, 2012) Chap. 9.
- [22] A. Liebsch, H. Ishida, and J. Merino, *Phys. Rev. B*, **78**, 165123 (2008).
- [23] D. Sénéchal, in *Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, edited by A. Avella and F. Mancini (Springer Berlin Heidelberg, 2012) pp. 341–371, ISBN 978-3-642-21831-6.
- [24] S. S. Kancharla, B. Kyung, D. Sénéchal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*, **77**, 184516 (2008).

4.1 Complément : diagramme de phase au demi-remplissage

Dans cet article, nous avons étudié le modèle de Hubbard à une bande sur le réseau en treillis, un modèle théorique du cuprate $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. On s'intéresse ici à une question complémentaire : le caractère itinérant ou localisé de l'antiferromagnétisme au demi-remplissage. Nous dressons le diagramme de phase du modèle au demi-remplissage dans le plan (U, t') . La figure 4.1 montre le réseau en treillis, où la partie colorée correspond à l'amas de huit sites utilisé pour établir le diagramme de phase de la figure 4.3.

On détermine les frontières entre les phases métallique et isolante et entre les phases métallique et antiferromagnétique en calculant la relation entre la densité électronique n et le potentiel chimique μ . En VCA se fait, en traitant le potentiel chimique μ' de l'amas comme un paramètre variationnel. Au-dessus de la valeur critique de l'interaction de Coulomb U_c , un gap de charge se développe et est révélé par l'apparition d'un plateau dans la courbe $n(\mu)$. Voir par exemple la figure 4.2, pour $t' = 0.2t$. La figure 4.3 représente le diagramme de phase dans le plan (U, t') . La courbe rouge est la transition de Mott délimitant la phase métallique et la phase isolante lorsqu'on ignore l'antiferromagnétisme. Dans le cas des échelles découplées, c'est-à-dire à $t' = 0$, on trouve un isolant de Mott pour toutes les valeurs non nulles de U . À t' petit, la courbe de transition est approximativement quadratique et suit la loi :

$$U_c \approx 0.120\sqrt{tt'} \quad (4.1)$$

Cependant une meilleure solution, ayant une plus basse énergie, peut être obtenue en permettant l'émergence de l'antiferromagnétisme, aussi bien pour la phase métallique que pour la phase isolante. En VCA, on permet l'antiferromagnétisme en ajoutant au hamiltonien de l'amas un terme comportant un champ de Weiss antiferromagnétique M :

$$H_M = M \sum_i e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \quad \mathbf{Q} = (\pi, \pi) \quad (4.2)$$

où \mathbf{Q} est le vecteur qui relie deux surfaces de Fermi. La courbe bleue de la figure 4.3 indique la transition entre les phases métallique et isolante quand nous permettons l'antiferromagnétisme. C'est la frontière entre une phase antiferromagnétique localisée et itinérante. Les échelles de spins découplées n'ont pas un ordre antiferromagnétique compte tenu du théorème de Mermin-Wagner. Cependant, la VCA trouvera un tel ordre, mais celui-ci peut être extrapolé à zéro dans la limite d'un amas infini [132].

Dans le cas d'un réseau carré, où on tient compte seulement du terme de saut aux voisins immédiats, on a un emboîtement parfait, et par conséquent le gap antiferromagnétique se développe

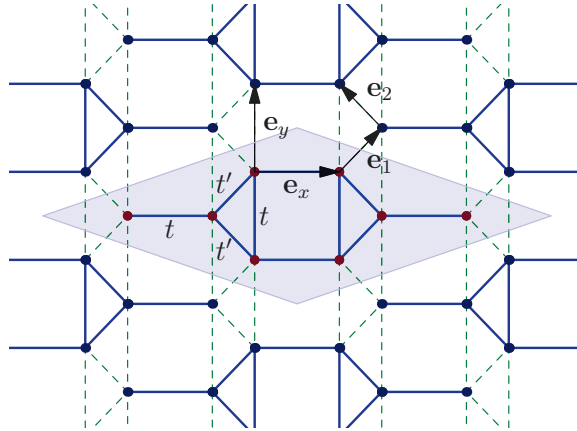


FIGURE 4.1 Réseau en treillis pour le cuprate $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. Les points représentent les atomes de cuivre, tandis que les atomes d'oxygène devraient se situer au milieu des côtés de chacune des plaquettes. L'amplitude de saut dans la direction horizontale et verticale est t et celle entre les échelles est notée par t' . La partie colorée correspond à l'amas de huit sites utilisé pour établir le diagramme de phase au demi-remplissage. \mathbf{e}_1 et \mathbf{e}_2 sont les vecteurs de base du réseau direct, \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_y , les vecteurs unitaires dans le plan cartésien.

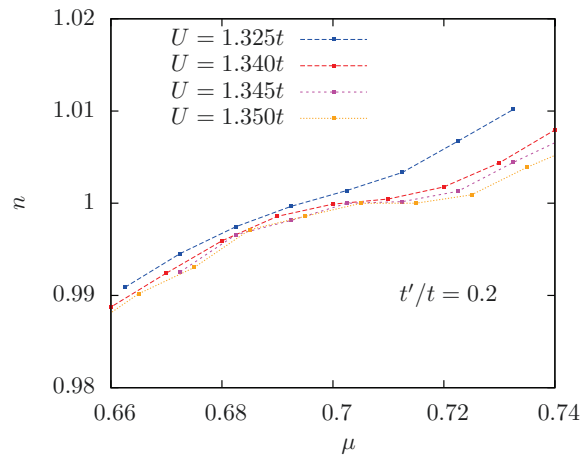


FIGURE 4.2 Densité électronique n en fonction du potentiel chimique μ du modèle de Hubbard sur le réseau en treillis à $t' = 0.2t$ et pour des valeurs différentes de l'interaction de Coulomb U . La valeur critique correspond à $U_c = 1.345t$, où le plateau disparaît au demi-remplissage.

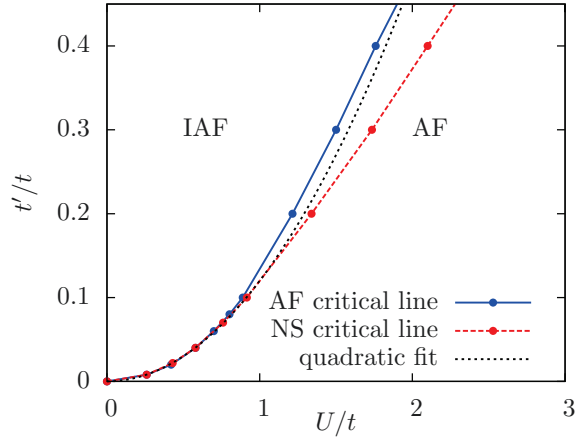


FIGURE 4.3 Diagramme de phase du modèle de Hubbard sur le réseau en treillis au demi-remplissage dans le plan (U, t') à $t = 1$. IAF et AF, séparés par la courbe bleue, désignent respectivement la phase métallique itinérante antiferromagnétique et la phase isolante antiferromagnétique. Pour des valeurs de U et t' petites, les courbes critiques suivent la relation $U_c \sim 0.120\sqrt{tt'}$ (voir la courbe noire, le lissage obtenu à partir des données numériques). La courbe rouge est la transition de Mott délimitant la phase métallique et la phase isolante lorsqu'on ignore l'antiferromagnétisme (c'est-à-dire dans la phase normale).

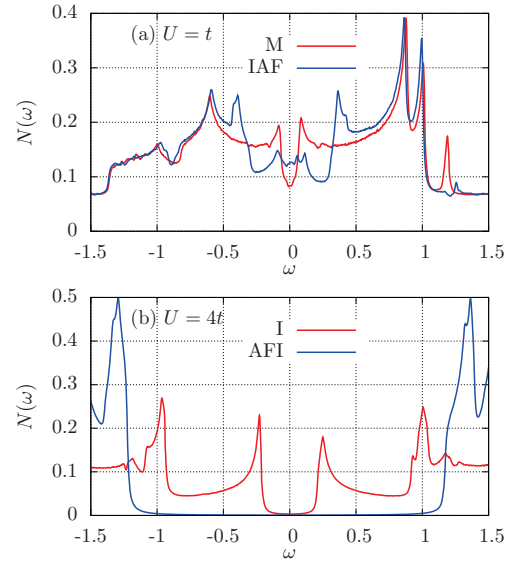


FIGURE 4.4 Densité d'états $N(\omega)$ en fonction de la fréquence du modèle de treillis au demi-remplissage. (a) Dans la phase itinérante antiferromagnétique (IAF) et dans la solution normale métallique (M) à $U = t$, (b) dans la phase normale isolante (I) et dans la phase localisée antiferromagnétique (AFI) à $U = 4t$. La solution métallique montre les caractéristiques d'un pseudogap. Dans les graphiques (a) et (b), le paramètre de saut t' est $0.2t$ et l'élargissement lorentzien $\eta = 0.01t$.

sur toute la surface de Fermi. Dans le cas qui nous occupe, la surface de Fermi est déformée et il n'y a pas d'emboîtement parfait. Ainsi, on a un gap indirect conduisant à une phase itinérante antiferromagnétique.

L'ordre antiferromagnétique dans les échelles de spins découplées disparaît et correspond à une phase de liquide de spin comme décrit par la méthode de groupe de renormalisation de la matrice de densité [133]. Nous nous attendons à ce qu'une phase de liquide de spin gappée se développe dans les échelles faiblement couplées, c'est-à-dire lorsque t' est plus petit que l'énergie du gap de spin. Cependant on doit mentionner que la VCA n'est pas capable de calculer la valeur du gap de spin.

À la figure 4.4, on montre la densité d'états d'un électron à $U = t$ et $U = 4t$ respectivement pour la phase métallique et isolante à $t' = 0.2t$. Un élargissement lorentzien, $\eta = 0.01t$, a été utilisé. La figure 4.4 (a) indique une densité d'états non gappée aussi bien pour la phase normale métallique (notée par M et délimitée par le courbe rouge) que pour la phase itinérante antiferromagnétique (notée par IAF et délimitée par la courbe bleue). Nous avons observé les caractéristiques d'un pseudogap dans la phase normale métallique M, cohérent avec les résultats précédents obtenus avec d'autres méthodes numériques [134]. Cependant, en présence d'antiferromagnétisme, le comportement de la densité d'états caractéristique d'un pseudogap disparaît dans la phase métallique.

La figure 4.4 (b) montre un gap plus grand même pour la solution antiferromagnétique (AFI) que pour l'isolant de Mott simple (I). Néanmoins, le gap dans la solution isolante antiferromagnétique est beaucoup plus grand que l'énergie de condensation antiferromagnétique estimée à $4t^2/U$. Dans la solution non magnétique, un gap de charge se développe. On note aussi une réduction très considérable du gap de Mott-Hubbard.

Chapitre 5

Supraconductivité triplet p et $p + ip$ sur le réseau du graphène

Ce projet étudie la supraconductivité dans le modèle de Hubbard défini sur le réseau du graphène. On s'intéresse donc à la supraconductivité causée par les interactions électron-électron, c'est-à-dire qu'on ignore la contribution des phonons. Nous avons étudié le modèle de Hubbard simple et le modèle de Hubbard étendu. Les méthodes numériques servant à solutionner ce problème sont l'approximation de l'amas variationnel (VCA) et le champ moyen dynamique sur amas (CDMFT). Dans le cas du modèle de Hubbard étendu, le hamiltonien du système original et celui de l'amas diffèrent plus que par des termes de sauts. En effet, les interactions étendues sont tronquées quand on subdivise le réseau en plusieurs amas. Par conséquent, la VCA et la CDMFT ne sont plus directement applicables. On résout ce problème en traitant les interactions étendues entre les amas par l'approximation de Hartree. Nous appelons cette méthode l'approximation dynamique de Hartree (DHA) comme décrit dans l'article. Dans cette méthode, la VCA permet de déterminer, par auto cohérence, les valeurs moyennes qui apparaissent dans la partie étendue du hamiltonien.

L'application de la VCA et de la CDMFT sur un amas hexagonal de six sites permet d'étudier plusieurs types de supraconductivité : s , d , p , f , $d + id$, $p + ip$. Nous trouvons que la solution favorisée est de symétrie p ou $p + ip$ dépendant de l'interaction de Coulomb étendue et de la gamme de dopage. Contrairement au modèle de Hubbard étendu défini sur un réseau carré, qui modélise les cuprates supraconducteurs, ici le potentiel de Coulomb favorise la supraconductivité, en particulier dans sa forme chirale.

Chiral triplet superconductivity on the graphene lattice

J. P. L. Faye,¹ P. Sahebsara,² and D. Sénéchal¹

¹*Département de physique and RQMP, Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1*

²*Department of Physics, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran*

(Dated: June 19, 2015)

Motivated by the possibility of superconductivity in doped graphene sheets, we investigate superconducting order in the extended Hubbard model on the two-dimensional graphene lattice using the variational cluster approximation (VCA) and the cellular dynamical mean-field theory (CDMFT) with an exact diagonalization solver at zero temperature. The nearest-neighbor interaction is treated using a mean-field decoupling between clusters. We compare different pairing symmetries, singlet and triplet, based on short-range pairing. VCA simulations show that the real (nonchiral), triplet p -wave symmetry is favored for small V , small on-site interaction U or large doping, whereas the chiral combination $p + ip$ is favored for larger values of V , stronger on-site interaction U or smaller doping. CDMFT simulations confirm the stability of the $p + ip$ solution, even at half-filling. Singlet superconductivity (extended s -wave or d -wave) is either absent or sub-dominant.

I. INTRODUCTION

Following the production of graphene sheets in 2004 [1], many have speculated about the theoretical possibility of superconductivity in doped graphene. The theoretical discussion has been enlarged to include models of interacting electrons on the graphene (honeycomb) lattice, without necessarily focusing on parameter values relevant to graphene, as other systems based on this geometry exist: for a recent review see, e.g., Ref. [2]. A constant source of excitement is the general conclusion that superconductivity, if it occurs, should be chiral, i.e., should break time-reversal symmetry. This implies the possibility of unidirectional transport along the sample edge and, with the added effect of spin-orbit coupling, the presence of Majorana fermions along the edge, with potential applications to robust quantum computing. In particular, certain vortex excitations in $p + ip$ superconductors have zero-energy Majorana modes [3] in their cores, which endow these vortices with non-Abelian statistics [4].

Many studies predict a superconducting order parameter with $d + id$ symmetry, i.e., a chiral state based on singlet pairing [5–10]. But many of those have excluded triplet pairing from the outset. A recent Quantum Monte Carlo study [11] compares singlet and triplet states and predicts that the favored state would have $p + ip$ (triplet) symmetry [12], but it is performed at low density ($\sim 20\%$), whereas we are interested in the vicinity of half filling. Such comparisons between triplet or singlet pairing have also been made using other methods or different theoretical models [13, 14] and the favored pairing state is not strikingly obvious.

In this work, we add the perspective of two different methods: the variational cluster approximation (VCA) [15–18] and the cellular dynamical mean field theory (CDMFT) [19–22]. General reviews on dynamical quantum cluster methods can also be found in Refs [23–25]. VCA is a dynamical variational method: it identifies the best possible electron self-energy $\Sigma(\omega)$ in a restricted space of self-energies that are the physical self-energies of a small cluster of atoms. CDMFT is based on the same principle, except that the best possible self-energy is determined self-consistently in an Anderson impurity problem where the small cluster plays the role of the

impurity. We apply these methods to the extended Hubbard model on the graphene lattice, from half-filling to about 20% doping and compare various pairings: singlet and triplet, chiral and non chiral. The dominant pairing symmetry found by VCA, i.e. the one with the smallest free energy at zero temperature, is $p + ip$: a chiral, spin-triplet pairing. This solution is also found using CDMFT. The range of parameters studied, in particular for the on-site repulsion U and the nearest-neighbor repulsion V , contains accepted values for graphene sheets. Both methods find that the strength of $p + ip$ superconductivity increases with V .

The paper is organized as follow: in Sect. II, we define the model and the various pairing symmetries from mean-field the point of view. In Sect. III we review the VCA and its application to systems with extended interactions, before presenting our results in Sect. IV. In Sect. V, the CDMFT is applied to the same problem. A discussion follows in Sect. VI.

II. MODEL AND MEAN-FIELD DESCRIPTION

A. The model

We consider the extended, one-band Hubbard model defined on the graphene (or honeycomb) lattice, which contains two sublattices A and B as illustrated in Fig 1. The Hamiltonian can be expressed as

$$H = -t \sum_{\mathbf{r} \in A, \sigma, j} (c_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r} + \mathbf{e}_j, \sigma} + \text{H.c.}) - \mu \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} + U \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}, \uparrow} n_{\mathbf{r}, \downarrow} + V \sum_{\mathbf{r} \in A, j} n_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r} + \mathbf{e}_j} \quad (1)$$

where $c_{\mathbf{r}, \sigma}^{(\dagger)}$ destroys (creates) an electron of spin σ in a Wannier orbital at site \mathbf{r} , $n_{\mathbf{r}, \sigma} = c_{\mathbf{r}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{r}, \sigma}$ is the number of electrons of spin σ at site \mathbf{r} , and $n_{\mathbf{r}} = n_{\mathbf{r}, \uparrow} + n_{\mathbf{r}, \downarrow}$. The three vectors $\mathbf{e}_{1,2,3}$ link a site of sublattice A with its three nearest neighbors (NN) on sublattice B , and are oriented at 120° of each other. The first and last sums run over sites of the A sublattice only and contain respectively all hopping terms and extended interactions. The other sums run over all sites: μ is the chemical potential and U the on-site repulsion.

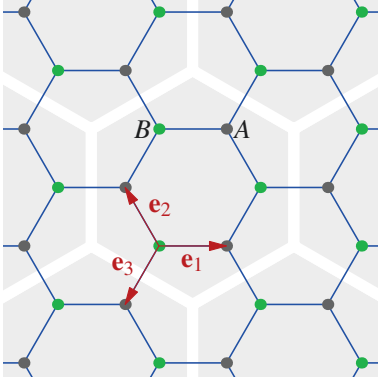


FIG. 1. (Color online) Tiling of the graphene lattice by 6-site clusters (gray shading) used in VCA. The A and B sublattices are indicated, as well as the three elementary vectors $\mathbf{e}_{1,2,3}$.

This model constitutes an approximate description of graphene sheets, wherein longer-range Coulomb interactions and hopping are neglected. In pure graphene the band is half-filled and t is estimated at 2.8 eV, the on-site Coulomb repulsion U is expected to be around 9.3 eV $\approx 3.3t$ and the nearest-neighbor Coulomb repulsion at $V = 5.5$ eV $\sim 2t$ [26]. In the rest of this paper, we will set $t = 1$, thus defining the unit of energy, and we will work at zero temperature. We are concerned with electronic degrees of freedom only, and neglect all phonon-related effects.

B. Pairing symmetries

We start by providing a description of superconducting (SC) order in the mean-field picture. Ref. [13] provides a complete classification of pairing operators in terms of low-degree polynomials of momentum, according to the irreducible representations of D_{6h} in momentum space. Here we will follow a different approach, based on a real-space description of pairing operators defined on adjacent sites; we neglect the possibility of on-site (singlet) pairing because of the on-site repulsion U . In momentum space, this amounts to using basis functions that are aware of the Brillouin zone, i.e., complex exponentials of wavevectors times nearest-neighbor vectors. The relevant pairing operators defined on the links between adjacent sites are

$$\begin{aligned} \text{singlet: } S_{i,\mathbf{r}} &= c_{\mathbf{r},\uparrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\downarrow} - c_{\mathbf{r},\downarrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\uparrow} \\ \text{triplet: } T_{i,\mathbf{r}} &= c_{\mathbf{r},\uparrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\downarrow} + c_{\mathbf{r},\downarrow}c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_i,\uparrow} \end{aligned} \quad (2)$$

Given the three elementary directions on the graphene lattice, this makes a total of six operators per site, which can be combined into operators of well-defined symmetry as

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{\text{singlet}} &= \sum_{\mathbf{r}} (\Delta_1 S_{1,\mathbf{r}} + \Delta_2 S_{2,\mathbf{r}} + \Delta_3 S_{3,\mathbf{r}}) \\ \hat{\Delta}_{\text{triplet}} &= \sum_{\mathbf{r}} (\Delta_1 T_{1,\mathbf{r}} + \Delta_2 T_{2,\mathbf{r}} + \Delta_3 T_{3,\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (3)$$

TABLE I. Irreducible representations (irreps) of D_{6h} associated with the six pairing operators defined on nearest-neighbor sites. S_j and T_j are the singlet and triplet pairing along the directions \mathbf{e}_j indicated on Fig. 1. The last four rows show the chiral representations, which are complex combinations of the real operators defined under E_1 and E_2 .

Irrep	symbol	operators
A_1	s	$\hat{\Delta}_s = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} + S_{2,\mathbf{r}} + S_{3,\mathbf{r}})$
B_1	f	$\hat{\Delta}_f = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} + T_{2,\mathbf{r}} + T_{3,\mathbf{r}})$
E_1	d	$\hat{\Delta}_{d,1} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} - S_{2,\mathbf{r}})$
		$\hat{\Delta}_{d,2} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} - S_{3,\mathbf{r}})$
E_2	p	$\hat{\Delta}_{p,1} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} - T_{2,\mathbf{r}})$
		$\hat{\Delta}_{p,2} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} - T_{3,\mathbf{r}})$
chiral representations		
E_1	$d + id$	$\hat{\Delta}_{d+id} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} + e^{2\pi i/3} S_{2,\mathbf{r}} + e^{4\pi i/3} S_{3,\mathbf{r}})$
	$d - id$	$\hat{\Delta}_{d-id} = \sum_{\mathbf{r}} (S_{1,\mathbf{r}} + e^{-2\pi i/3} S_{2,\mathbf{r}} + e^{-4\pi i/3} S_{3,\mathbf{r}})$
E_2	$p + ip$	$\hat{\Delta}_{p+ip} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} + e^{2\pi i/3} T_{2,\mathbf{r}} + e^{4\pi i/3} T_{3,\mathbf{r}})$
	$p - ip$	$\hat{\Delta}_{p-ip} = \sum_{\mathbf{r}} (T_{1,\mathbf{r}} + e^{-2\pi i/3} T_{2,\mathbf{r}} + e^{-4\pi i/3} T_{3,\mathbf{r}})$

where the relative amplitudes $(\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3)$ define the symmetry of each operator. These may be classified according to the irreducible representations (irreps) of D_{6h} (or C_{6v} , which is equivalent for a purely two-dimensional system). These are given in Table I, and illustrated on Fig. 2. Note that the irreps A_2 and B_2 do not exist in this six-dimensional space of operators. Representations E_1 and E_2 are two-dimensional, and only one of their components is illustrated on Fig. 2. This allows for the existence of complex representations $d \pm id$ and $p \pm ip$ expressed in the last four rows of Table I.

C. Mean-field description

The goal of this subsection is to develop a physical or geometric sense for the superconducting order parameter through the mean-field description. We are not performing self-consistent mean-field computations, which are not possible in the framework of the Hubbard model. The more powerful variational cluster approximation (VCA) and cellular dynamical mean-field theory (CDMFT) will be used instead, in the next sections.

The BCS Hamiltonian in momentum space is expressed in a Nambu description by arranging the creation and annihilation operators for the two sublattices and the two spins into a four-component object:

$$\mathcal{C}_{\mathbf{k}} = (c_{A,\mathbf{k},\uparrow}, c_{B,\mathbf{k},\uparrow}, c_{A,-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{B,-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger) \quad (4)$$

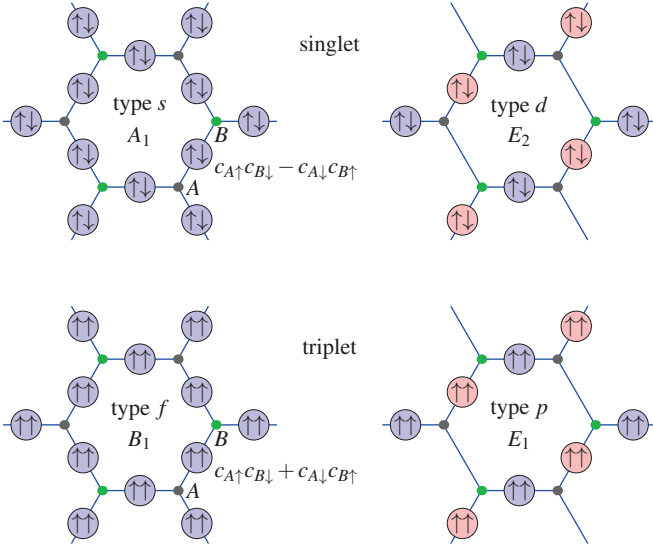


FIG. 2. (Color online) Representation of singlet and triplet pairing amplitudes in real space. Blue means positive, red means negative. Only one component out of two is illustrated for the E_1 and E_2 representations: $\Delta_{d,2}$ and $\Delta_{p,2}$. Upon rotating by 60 degrees, the two sublattices A and B are interchanged, which changes the sign of the triplet pair (because of the anticommutation relations) but not that of the singlet pair.

The Hamiltonian then takes the form:

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} H_{\mathbf{k}} \mathcal{C}_{\mathbf{k}} \quad (5)$$

with the 4×4 Hermitian matrix:

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} -\mu & \gamma_{\mathbf{k}} & 0 & -\eta_{\mathbf{k}}^* \\ \gamma_{\mathbf{k}}^* & -\mu & \zeta \eta_{-\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \zeta \eta_{-\mathbf{k}}^* & \mu & -\gamma_{\mathbf{k}} \\ -\eta_{\mathbf{k}} & 0 & -\gamma_{\mathbf{k}}^* & \mu \end{pmatrix} \quad (6)$$

where μ is the chemical potential and where

$$\gamma_{\mathbf{k}} = -t \sum_{j=1,2,3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_j} \quad \text{and} \quad \eta_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1,2,3} \Delta_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_j} \quad (7)$$

The symbol ζ in (6) is 1 and -1 for triplet and singlet pairing, respectively. The pairing amplitudes Δ_j may be read from the definition of the operators of Table I. For instance, in the case of a $p + ip$ or $d + id$ symmetry, they are

$$(\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3) = \Delta(1, e^{2\pi i/3}, e^{4\pi i/3}) \quad (8)$$

where Δ is a global pairing amplitude.

It is not difficult to show that the dispersion relation derived from the mean-field Hamiltonian (6) is

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{b_{\mathbf{k}} \pm \sqrt{b_{\mathbf{k}}^2 - B_{\mathbf{k}}}} \quad (9)$$

where

$$b_{\mathbf{k}} = \mu^2 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{2}|\eta_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{2}|\eta_{-\mathbf{k}}|^2 \quad (10)$$

and

$$B_{\mathbf{k}} = \mu^4 + |\gamma_{\mathbf{k}}|^4 + |\eta_{\mathbf{k}}|^2 |\eta_{-\mathbf{k}}|^2 - 2 \text{Re}(\xi \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}}^2) + \mu^2 (|\eta_{\mathbf{k}}|^2 + |\eta_{-\mathbf{k}}|^2 - 2|\gamma_{\mathbf{k}}|^2) \quad (11)$$

If the amplitudes Δ_i are real, i.e., for the real representations s , p , d and f , then $\eta_{-\mathbf{k}} = \eta_{\mathbf{k}}^*$, but this is not true for the chiral representations. In the normal case ($\eta_{\mathbf{k}} \equiv 0$), Eq. (9) reduces to the graphene dispersion $E_{\mathbf{k}} = \mu \pm |\gamma_{\mathbf{k}}|$.

The Dirac points $\mathbf{K} = (2\pi/3, 2\pi/3\sqrt{3})$ and $\mathbf{K}' = (2\pi/3, -2\pi/3\sqrt{3})$, located on the Brillouin zone corners, are special, since $\gamma(\mathbf{K}) = \gamma(\mathbf{K}') = 0$. At half-filling ($\mu = 0$), the normal-state dispersion vanishes at these points and the low-energy dispersion is made of cones issuing from them. The gap function $\eta_{\mathbf{k}}$ also vanishes at the Dirac points if all three amplitudes Δ_i have the same phase, i.e. for s and f symmetries. This implies that s -wave and f -wave superconductivity is gapless at half filling. So is chiral superconductivity ($d + id$ and $p + ip$). Indeed, in the right-handed case (8) one has $\eta_{\mathbf{K}'} = 0$ and $\eta_{-\mathbf{K}'} \neq 0$. Nevertheless, $B_{\mathbf{K}'} = 0$ at half-filling and the gap vanishes. The same is true at the other Dirac point, since $\eta_{\mathbf{K}} \neq 0$ and $\eta_{-\mathbf{K}} = 0$. Thus, superconductivity may be “hidden”, or gapless at half-filling [10].

D. Order parameter

The momentum-dependent superconducting order parameter $\Psi_{ab}(\mathbf{k})$ is defined as the integral over frequency of the Gorkov function (the anomalous part of the Green function):

$$\Psi_{ab}(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} F_{ab}(\mathbf{k}, i\omega) \quad (12)$$

Here (a, b) are sublattice indices taking two possible values. The Gorkov function F_{ab} is the top-right block of the Nambu Green function $G_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega)$ defined as follows at zero temperature:

$$G_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \Omega | \mathcal{C}_{\mu}(\mathbf{k}) \frac{1}{\omega - H + E_0} \mathcal{C}_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{k}) | \Omega \rangle + \langle \Omega | \mathcal{C}_{\nu}^{\dagger}(\mathbf{k}) \frac{1}{\omega + H - E_0} \mathcal{C}_{\mu}(\mathbf{k}) | \Omega \rangle, \quad (13)$$

where ω is a complex-valued frequency, $|\Omega\rangle$ is the many-body ground state and E_0 the ground state energy. The indices μ, ν take the four possible values defined in (4). For a two-band model, $F_{ab} = G_{a,b+2}$. In the special case of the non-interacting BCS Hamiltonian (5), the Nambu Green function is

$$G_{\mu\nu}(\mathbf{k}, \omega) = \left(\frac{1}{\omega - H_{\mathbf{k}}} \right)_{\mu\nu} \quad (14)$$

and the order parameter $\Psi_{ab}(\mathbf{k})$ is readily calculated from the negative eigenvalues of $H_{\mathbf{k}}$ and the corresponding eigenvectors. We illustrate on the left panel of Fig. 3 the superconducting order parameter of type $p + ip$ with $\Delta = 0.3$ at 10% doping. Note how the phase of the order parameter Δ_{11} circles

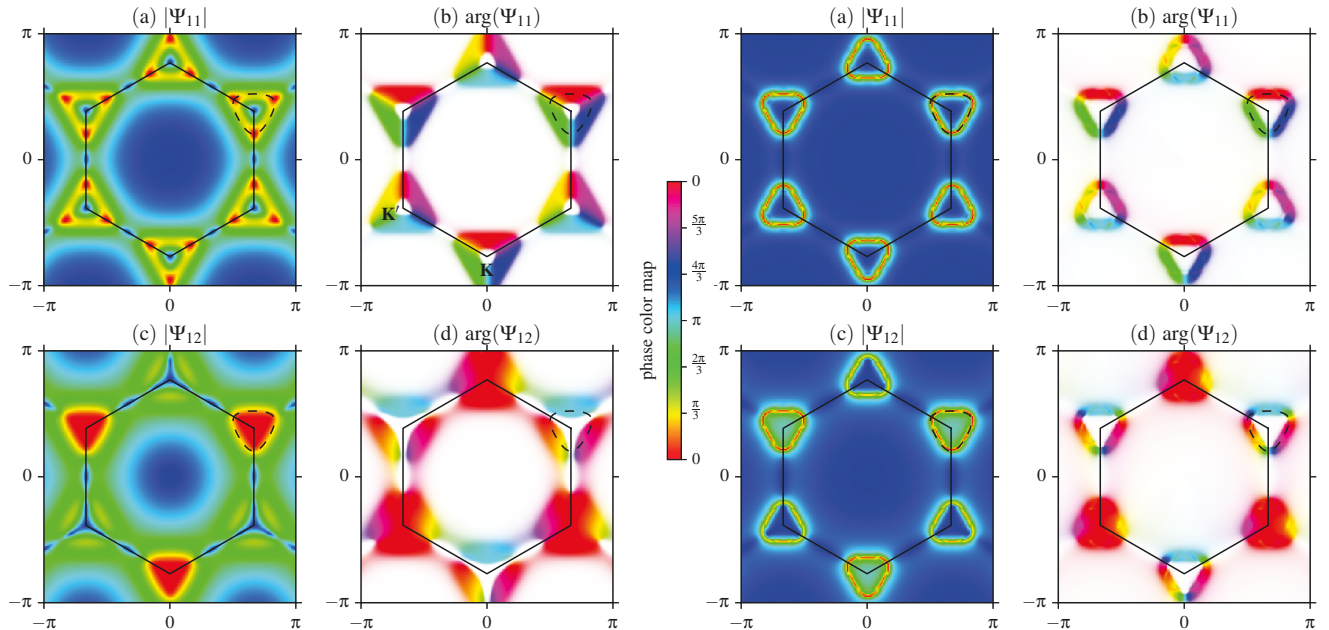


FIG. 3. (Color online) Color representation of the superconducting order parameter $\Psi_{ab}(\mathbf{k})$, as a function of wave vector, for a $p+ip$ symmetry. Left half of the figure: a BCS state; right half: a solution found in VCA. Panels labeled (a) and (c) represent the amplitude (red is maximum, blue means zero). Panels labeled (b) and (d) represent the phase (the phase color map is shown in the middle; white means an amplitude lower than some cutoff value). The top panels ((a) and (b)) represent the intra-sublattice component $\Psi_{11}(\mathbf{k})$. The bottom panels ((c) and (d)) represent the inter-sublattice component $\Psi_{12}(\mathbf{k})$. The Brillouin zone is indicated, as well as the Fermi surface around one of the Dirac points \mathbf{K} (dashed curve). Doping was set at 10%. The VCA solution was obtained at $(U, V) = (3, 0.4)$.

once around the Dirac points \mathbf{K} and \mathbf{K}' . By contrast, the phase of Δ_{12} circles twice around \mathbf{K} and does not circle around \mathbf{K}' , whereas the opposite would be true for $p-ip$ or for Δ_{21} .

It is difficult to encapsulate the “amount” of SC order in a simple number. The best choice for that is the root-mean-square SC order parameter:

$$\Psi_{\text{rms}}^2 = \sum_{a,b} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} |\Psi_{ab}(\mathbf{k})|^2 \quad (15)$$

This definition has the advantage of being invariant under changes of basis affecting the sublattice (or band) indices.

III. THE VARIATIONAL CLUSTER APPROXIMATION

A. The method

The variational cluster approximation (VCA) [15] can be used to investigate the possibility of superconductivity in Model (1). VCA has been used extensively, in particular to study the emergence of d -wave superconductivity in a simple description of the high- T_c cuprates based on the square-lattice, one-band Hubbard model [16, 17]. It is based on Potthoff’s self-energy functional approach [27] (for a review, see Ref. 28). In VCA, the lattice is tiled into an infinite collection of identical clusters, like the six-site cluster used in this work and illustrated on Fig. 1. We must distinguish the original

Hamiltonian H , defined on the infinite lattice, from a reference Hamiltonian H' , obtained from H by (1) severing the inter-cluster hopping terms and (2) adding a small number of Weiss field in order to probe certain broken symmetries. Any one-body term can also be added to H' ; in particular, the chemical potential μ' of H' may be different from the one appearing in H . The basic requirement is that H and H' share the same interaction term. Even though H' is defined on an infinite set of disconnected clusters, in practice we work on its restriction to a single cluster, since all clusters are identical.

The self-energy $\Sigma(\omega)$ associated with H' is used as a variational self-energy, in order to construct the Potthoff self-energy functional:

$$\Omega[\Sigma(h)] = \Omega'[\Sigma(h)] + \text{Tr} \ln[-(\mathbf{G}_0^{-1} - \Sigma(h))^{-1}] - \text{Tr} \ln(-\mathbf{G}'(h)) \quad (16)$$

where \mathbf{G}' is the physical Green function of the reference system, \mathbf{G}_0 is the non-interacting Green function of the original system and h denotes collectively the coefficients of all the adjustable one-body terms added to H' . The symbol Tr stands for a functional trace, i.e., a sum over frequencies, momenta and bands. Ω' is the ground state energy (chemical potential included) of the cluster which, along with the associated Green function \mathbf{G}' , is computed numerically, in our case via the exact diagonalization method at zero temperature. Eq. (16) provides us with an exact, nonperturbative value of the Potthoff functional $\Omega[\Sigma(h)]$, albeit on a restricted space

of self-energies $\Sigma(h)$ which are the physical self-energies of the reference Hamiltonian H' . Expression (16) is computed numerically in order to look for stationary points of that functional, for instance via Newton's method. The resulting value of h defines the best possible self-energy Σ for that parameter set; it is then combined with \mathbf{G}_0 to form an approximate Green function \mathbf{G} for the original Hamiltonian H , from which any one-body quantity, for instance the order-parameters associated with broken symmetries, can be computed.

When confronted with competing solutions, obtained for instance via different sets of Weiss fields, the one with the lowest value of the Potthoff functional is selected. VCA retains the correlated character of the model, since the local interaction is not factorized in any way. The approximation may be controlled in principle by varying the size of the cluster and the number of variational parameters used.

Since one of the goals of this work is to identify the symmetry of the superconducting order parameter in Model (1), we will use the 6-site, ring cluster depicted on Fig. 1, because it is the most symmetric we can use, even though it is not the largest. A ten-site cluster will also be used in order to assess the robustness of our predictions. For all calculations involving superconductivity, we used the Nambu formalism, in which a particle-hole transformation is performed on the spin-down orbitals. The pairing operators then have the appearance of hopping terms; two of the three components of the triplet pairing operator cannot be easily described that way, but rotation invariance allows us to concentrate on the $S_z = 0$ component.

B. Extended interactions

The VCA approximation as summarized above only applies to systems with on-site interactions, since the Hamiltonians H and H' must differ only by one-body terms, i.e., they must have the same interaction part. This is not true if extended interactions are present, as they are truncated when the lattice is tiled into clusters. To treat the extended Hubbard model, one must, in addition, perform a Hartree approximation on the extended interactions. We call this the dynamical Hartree approximation (DHA), as the on-site and extended interactions are treated exactly within the cluster. It has been used in Ref. 29 in order to assess the effect of extended interactions on strongly-correlated superconductivity.

The extended interaction in the model Hamiltonian (1) is replaced by

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} V_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^c n_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}'} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} V_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{\text{ic}} (\bar{n}_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}'} + n_{\mathbf{r}} \bar{n}_{\mathbf{r}'} - \bar{n}_{\mathbf{r}} \bar{n}_{\mathbf{r}'}) \quad (17)$$

where $V_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^c$ denotes the extended interaction between sites belonging to the same cluster, whereas $V_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{\text{ic}}$ those interactions between sites belonging to different clusters. Both the first term (\hat{V}^c) and the second term (\hat{V}^{ic}), which is a one-body operator, are part of the lattice Hamiltonian H and of the cluster Hamiltonian H' . The mean fields $\bar{n}_{\mathbf{r}}$ must be determined self-consistently via a repeated application of the VCA method or

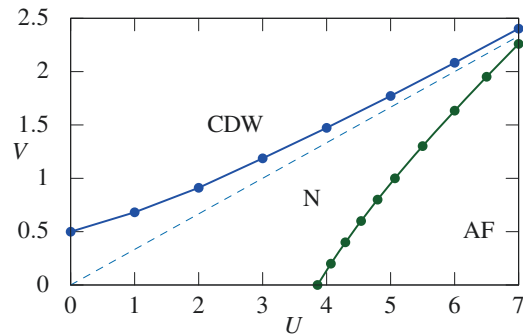


FIG. 4. (Color online) Half-filling phase diagram of the $U - V$ extended Hubbard model, obtained through VCA. The critical U for the appearance of antiferromagnetism at $V = 0$ is $U_c = 3.86$. The three phases are a charge-density wave (CDW), a normal semi-metal (N) and an antiferromagnet (AF).

even, more simply, of cluster perturbation theory (CPT) [30].

In practice, the symmetric matrix $V_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{\text{ic}}$ is diagonalized and the problem is expressed in terms of eigenoperators m_μ :

$$\hat{V}^{\text{ic}} = \sum_{\mu} D_{\mu} \left[\bar{m}_{\mu} m_{\mu} - \frac{1}{2} \bar{m}_{\mu}^2 \right] \quad (18)$$

For the 6-site cluster used in this work, the two eigenoperators considered correspond to a uniform shift of the chemical potential and a charge-density-wave operator:

$$m_1 = \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} \quad m_2 = \sum_{\mathbf{r} \in A} n_{\mathbf{r}} - \sum_{\mathbf{r} \in B} n_{\mathbf{r}} \quad (19)$$

with the appropriate coupling constants $D_1 = \frac{1}{6}$ and $D_2 = -\frac{1}{6}$.

IV. RESULTS FROM THE VCA

A. Antiferromagnetism and charge order at half-filling

It is well established that the Hubbard model on the graphene lattice with nearest-neighbor hopping has an antiferromagnetic ground state beyond a certain value of the on-site interaction U at $V = 0$ [31–34]. We mapped the antiferromagnetic transition line on the $U - V$ plane at half-filling, with VCA, in the dynamical Hartree approximation described in Sect. III B with the mean field m_1 of Eq. (19). The Weiss field added to the cluster Hamiltonian in order to probe antiferromagnetism in VCA is

$$H_{\text{AF}} = h_{\text{AF}} \left\{ \sum_{i \in A} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \sum_{i \in B} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \right\}. \quad (20)$$

The phase boundary between the antiferromagnetic (AF) and normal phases found in this way is indicated in green on Fig. 4. This is a continuous (second-order) transition. At $V = 0$, the critical value of U for antiferromagnetism is $U_c \sim 3.86$, identical to 2 decimal places to the value obtained from large-scale quantum Monte Carlo simulations [32], and close to

$U_c \sim 3.6$ from the dynamical cluster approximation [35]. The antiferromagnetic phase is bound to extend somewhat away from half-filling. Ideally we would want to avoid clashing with this phase in our study of superconductivity.

At larger values of V a charge density wave (CDW) instability is bound to occur. We determined the phase boundary between the CDW and normal phases by applying the dynamical Hartree approximation with the mean fields m_1 and m_2 of Eq. (19), and by comparing the energies Ω of the two competing solutions: a normal state (NS) with $m_2 = 0$ and a CDW with $m_2 \neq 0$. No Weiss field was added in this case, in order to simplify the computation: thus CPT was used instead of VCA, but the functional (16) was computed as a best estimate of the free energy. The phase boundary is indicated in blue on Fig. 4, and tends asymptotically towards the line $V = U/3$ (dashed line), as expected in the strong coupling limit. For sufficiently large U , the two phase boundaries (AF-NS and CDW-NS) will cross and a competition between CDW and AF phases would need to be examined. The NS-CDW phase boundary is basically identical with the one found with the dynamical cluster approximation (DCA) on large clusters [35]. At $U = 0$ the NS-CDW transition is continuous, but becomes discontinuous beyond some value of U . This is in fact an important test of the dynamical Hartree approximation used in the rest of this work. In particular, the constant correction added to the energy (the last term of Eq. (17)) is crucial if the phase boundary is to tend towards the line $V = U/3$.

Curiously, the values $(U, V) = (3.3, 2.0)$ computed in Ref. [26] lie within the CDW phase. But adding a second-neighbor Coulomb interaction V' would push the CDW phase boundary further up: the phase boundary in the strong-coupling limit is easily seen to be the line $V = U/3 + 2V'$, and the value of V' computed in Ref. [26] for graphene is more than enough to push that phase boundary beyond the proposed values of (U, V) .

B. Superconductivity

In VCA, the possible presence of superconductivity is probed by adding to the cluster Hamiltonian H' one of the pairing operators appearing in Table I. The VCA computations for superconductivity use two Weiss fields: the overall pairing amplitude Δ and the cluster chemical potential μ' . Treating the latter as a variational parameter guarantees thermodynamic consistency [36]. These computations are carried for different pairing symmetries, and, when in the presence of extended interactions, by performing an extra self-consistency loop for the cluster Hartree approximation, as described in Sect. III B above.

In order to compare solutions obtained with Weiss fields of different pairing symmetries, we compute their energy densities $E = \Omega + \mu n$, as a function of electron density n . More precisely, we compare their condensation energies $E_N - E_{SC}$, the difference between the energy of the normal solution, obtained by using only the chemical potential μ' as a variational parameter, and that of the superconducting solution, obtained by using both μ' and Δ as variational parameters. Figure 5

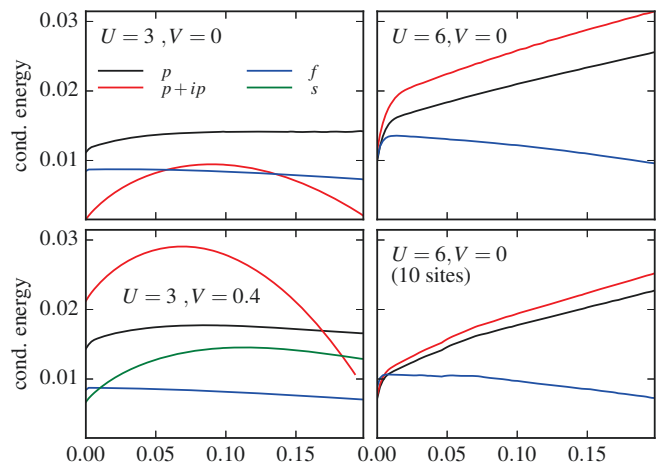


FIG. 5. (Color online) Condensation energy in units of t of the various triplet and singlet superconducting solutions found in VCA as a function of doping $\delta = 1 - n$. Top left: Stable solutions at $U = 3$ and $V = 0$. Bottom left: Stable solutions at $U = 3$ and $V = 0.4$. Top right: Stable solutions at $U = 6$ and $V = 0$. Bottom right, the same, but computed on a larger, 10-site cluster made of two edge-sharing hexagons. The d -wave solution was not stable, and the s -wave solution was only stable for $(U, V) = (3, 0.4)$ among the solutions found, and was never the lowest-energy solution.

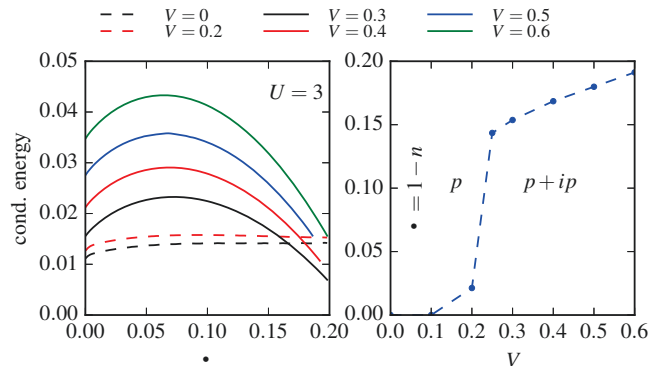


FIG. 6. (Color online) Left panel: Condensation energy in units of t for the preferred superconducting solutions at $U = 3$ as a function of doping δ , for different values of V . Dashed curves: p -wave solutions; full curves: $p + ip$ solutions. Right panel: Phase diagram on the $V - \delta$ plane at $U = 3$. There is a transition between p and $p + ip$ solutions.

shows the condensation energy as a function of doping for $(U, V) = (3, 0)$, $(3, 0.4)$ and $(6, 0)$. In the latter case, two cluster sizes (6 and 10 sites) were used (see below). Different pairing symmetries were studied, but triplet pairing is dominant always. The value $U = 3$ on the left panels was chosen because of the absence of antiferromagnetism.

The first striking result is the existence of triplet-pairing solutions (f , p and $p + ip$) even at half-filling. Singlet-pairing solutions do not exist at $V = 0$, but arise in the presence of the extended interaction. However, their condensation energy is either too small to appear on the graph, or is smaller than

that of triplet-pairing solutions. In particular, a d -wave solution was not found: the Potthoff functional was stationary only for a vanishing value of the corresponding Weiss field. A chiral, $d + id$ solution is found at $(U, V) = (3, 0.4)$, but its condensation energy is negligible and would be barely visible if shown on Fig. 5. An extended s -wave solution is found at $(U, V) = (3, 0.4)$, but is never the most stable solution. That title goes to the p -wave or to the chiral $p + ip$ solution, depending on doping and on V . At $(U, V) = (3, 0)$, the dominant solution has p -wave symmetry, but already at $V = 0.4$ the chiral, $p + ip$ solution dominates.

The left panel of Fig. 6 shows the condensation energy for the lowest-energy solution as a function of doping for different values of the extended interaction V , at $U = 3$. The lowest two values of V (0 and 0.2) prefer a real, p -wave solution, whereas higher values of V favor the $p + ip$ solution. According to these results, V has a favorable effect on superconductivity. The right panel of Fig. 6 shows a phase diagram on the $V - \delta$ plane: lower doping and higher values of V favor the chiral $p + ip$ state compared to the non-chiral p -wave state.

We now move to stronger coupling. The two panels on the right of Fig. 5 shows the condensation energy for the different SC solutions (all triplet) at $U = 6$. In principle the solution should be antiferromagnetic for a range of doping around half-filling for this value of U . Here antiferromagnetism was suppressed in order to simplify computations: we are concerned here with the preferred SC pairing, not the possible coexistence with antiferromagnetism. The top right panel shows the condensation energy as a function of doping computed from the six-site cluster illustrated on Fig. 1 and used in most of this work. The bottom panel shows the corresponding results on a ten-site cluster made of two hexagonal cells. Using a larger cluster provides a check on the robustness of VCA results, even though a finite-size analysis is rarely possible. Our results still stand, except that the 10-site cluster does not have the full symmetry of the lattice, and therefore a Weiss field of one symmetry (for instance $p + ip$) will lead to a nonzero average of the f -wave pairing operator as well, which would not happen for the hexagonal, 6-site cluster.

V. CLUSTER DYNAMICAL MEAN-FIELD THEORY

We use cellular dynamical mean field theory (CDMFT) to confirm the appearance of triplet superconductivity by an independent method. CDMFT, like VCA, proceeds by tiling the lattice with clusters and by computing an optimized self-energy for each cluster. Unlike VCA, the space of self-energies is not explored by adding Weiss fields on the cluster, but rather by coupling each cluster to a bath of uncorrelated, auxiliary orbitals that represent the effect of the cluster's environment [19–22]. The cluster Hamiltonian is supplemented by bath-cluster hybridization and bath energy terms:

$$\begin{aligned} H_{\text{hyb}} &= \sum_{\mu, \alpha} \theta_{\alpha\mu} a_{\mu}^{\dagger} c_{\alpha} + \text{H.c.} \\ H_{\text{bath}} &= \sum_{\mu, \nu} \epsilon_{\mu\nu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu} \end{aligned} \quad (21)$$

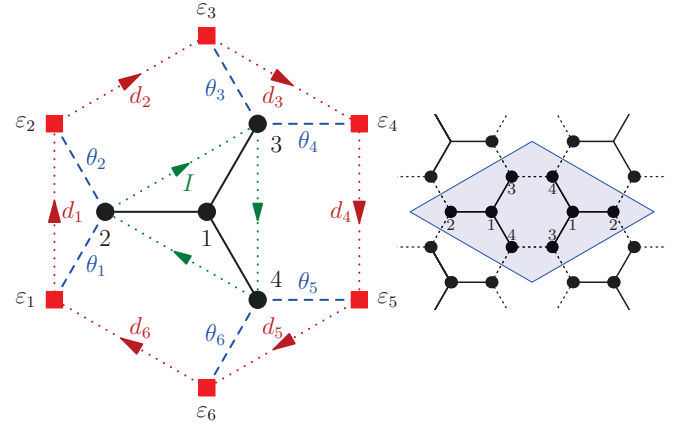


FIG. 7. (Color online) Left: Cluster-bath system used in CDMFT. The cluster sites are black circles, the bath orbitals red squares. The bath parameters are orbital energies ϵ_i , hybridizations θ_i and intra-bath triplet pairing d_i (the arrows indicate the conventional sign of that pairing, which is odd under spatial inversion). The chiral supercurrent I is measured along the green dotted triangle. The four-site cluster by itself does not tile the lattice, but can be combined with its inverted image to tile the lattice (right panel).

where a_{μ} denotes the annihilation operator for the bath orbital labeled μ . Again, we use the Nambu formalism, wherein a particle-hole transformation is applied to the spin-down orbitals. Hence the matrices $\theta_{\alpha\mu}$ and $\epsilon_{\mu\nu}$ may contain off-diagonal blocks associated with pairing, contributing to the anomalous Green function.

The Hamiltonians (21), together with the restriction of the Hubbard Hamiltonian (1) to the cluster, defines an Anderson impurity model. The cluster Green function, when traced over the bath orbitals, takes the following form as a function of complex frequency ω :

$$\mathbf{G}'^{-1}(\omega) = \omega - \mathbf{t} - \mathbf{\Gamma}(\omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) \quad (22)$$

where the hybridization matrix $\mathbf{\Gamma}(\omega)$ is

$$\mathbf{\Gamma}(\omega) = \boldsymbol{\theta}(\omega - \epsilon)^{-1} \boldsymbol{\theta}^{\dagger}. \quad (23)$$

in terms of the matrices $\theta_{\alpha\mu}$ and $\epsilon_{\mu\nu}$. In practice, the cluster Green function is computed from an exact diagonalization technique using variants of the Lanczos method (just like in VCA) and the self-energy is extracted from Eq. (22).

The Green function $\mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ for the lattice model is then computed from the cluster's self-energy as

$$\mathbf{G}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \mathbf{G}_0^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) - \mathbf{\Sigma}(\omega) \quad (24)$$

Here $\tilde{\mathbf{k}}$ denotes a reduced wave vector, belonging to the Brillouin zone associated with the superlattice of clusters that defines the tiling, and \mathbf{G}_0 is the non-interacting Green function. All Green function-related quantities are $2N_c \times 2N_c$ matrices, N_c being the number of sites in the unit cell of the superlattice, which is made of one or more distinct clusters (the factor of 2 is there because of spin, or more precisely Nambu space).

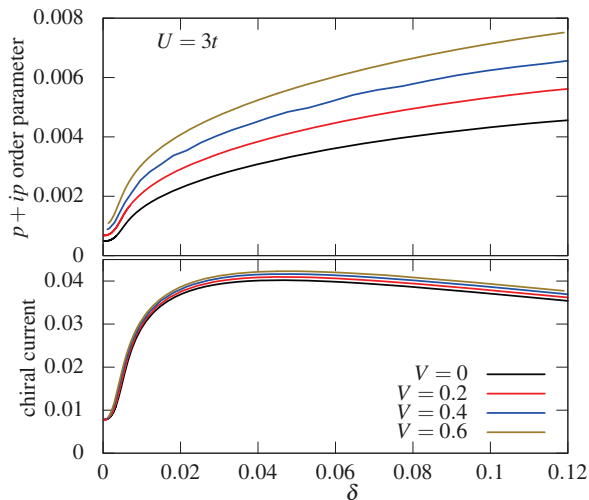


FIG. 8. (Color online) Top panel: expectation value of the $p+ip$ pairing operator $\hat{\Delta}_{p+ip}$ in the solutions found by CDMFT for $U = 3$ and different values of the nearest-neighbor Coulomb interaction V , as a function of doping. Bottom panel: corresponding value of the chiral current I circulating along the triangle defined by the sites 2, 3 and 4 of the cluster.

The bath and hybridization parameters $(\epsilon_{\mu\nu}, \theta_{\alpha\mu})$ are determined by the self-consistency condition

$$\mathbf{G}'(\omega) = \int \frac{d^2k}{2\pi} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \mathbf{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \quad (25)$$

where the integral is carried over the reduced Brillouin zone (the domain of $\tilde{\mathbf{k}}$). In other words, the local Green function $\mathbf{G}'(\omega)$ should coincide with the Fourier transform of the full Green function at the origin of the superlattice. This condition should hold at all frequencies, which is impossible in a zero-temperature implementation of CDMFT because of the finite number of bath parameters at our disposal. Therefore, condition (25) is only approximately satisfied, through the use of a merit function. Details can be found, for instance, in Refs [22, 37, 38].

In the presence of extended interactions, the dynamical Hartree approximation is used in conjunction with CDMFT, but in that case the mean-field parameters are converged at the same time as the bath parameters, which makes the method more efficient than its VCA counterpart.

In the zero-temperature formalism used here, the size of the bath is limited by the use of the Lanczos method to solve the Anderson impurity problem. We used the bath-cluster system illustrated on Fig. 7. The cluster has four sites. Together with its inverted image, it forms a periodically repeated ‘supercluster’ that tiles the lattice. The six bath orbitals are assigned fictitious positions that represent the neighboring sites of the cluster. They each have a bath energy ϵ_i and a hybridization θ_i with the cluster. In addition, the superconducting pairing takes place only between the bath orbitals, along the links indicated in red on Fig. 7. The triplet pairing amplitudes d_i are defined in the order shown, and may be constrained into parameters representing various pairing symmetries. For instance, two

independent f -wave bath parameters $d_{1,2}^{(f)}$ could be introduced such that

$$d_1 = d_3 = d_5 = d_1^{(f)} \quad d_2 = d_4 = d_6 = d_2^{(f)} \quad (26)$$

whereas two $p+ip$ -wave parameters $d_{1,2}^{(p+ip)}$ would be introduced such that

$$d_1 = e^{-2i\pi/3} d_3 = e^{2i\pi/3} d_5 = d_1^{(p+ip)} \quad (27)$$

$$d_2 = e^{-2i\pi/3} d_4 = e^{2i\pi/3} d_6 = d_2^{(p+ip)}$$

and $p-ip$ bath parameters would be defined by complex conjugation of the prefactors. Using bath parameters with the proper symmetries helps confirming that the converged values do indeed represent solutions with well-defined symmetry-breaking patterns, as some of these parameters, of a given symmetry, will converge to nonzero values whereas all others will converge to zero.

In order to facilitate convergence we have set all θ_i to a common value and arranged the bath energies into two groups: $\epsilon_1 = \epsilon_3 = \epsilon_5 = \epsilon$ and $\epsilon_2 = \epsilon_4 = \epsilon_6 = \epsilon'$. In studying $p+ip$ pairing, we thus have a total of $3+4=7$ variational parameters (the 4 come from the real and imaginary parts of $d_1^{(p+ip)}$ and $d_2^{(p+ip)}$), plus an optional 6 others if other superconducting channels are put in competition with the $p+ip$ channel, to check stability.

Figure 8 shows the results of CDMFT computations performed on the cluster-bath system depicted on Fig. 7 for $U = 3$ and several values of the nearest-neighbor repulsion V , as a function of doping δ . The top panel shows the absolute value of the expectation value $\langle \hat{\Delta}_{p+ip} \rangle$ of the $p+ip$ pairing operator defined in Table (I). The bottom panel shows the chiral current I , defined on Fig. 7, that circulates around the cluster, as a function of doping. This is a direct measure of the chiral character of superconductivity on the cluster. The current actually flows from site 2 to site 3 via the bath sites, and so on, in a circular manner, back to site 2. This can only be measured on the cluster: physically, it would vanish in the bulk and only appear as an edge effect.

The chiral $p+ip$ solution is indeed found, in preference to non-chiral solutions. In other words, when the 6 anomalous bath parameters are allowed to vary in both their real and imaginary parts, the $p+ip$ -wave solution is found, the operator $\hat{\Delta}_{p+ip}$ has a nonzero expectation value and the other operators $\hat{\Delta}_{p-ip}$ and $\hat{\Delta}_f$ have zero expectation value. Of course, initial values of the bath parameters determine whether the $p+ip$ or the $p-ip$ solutions emerge in the end. Like in the VCA solutions, the nearest-neighbor repulsion V favors superconductivity.

As the chemical potential μ is varied towards half-filling, the $p+ip$ order parameter decreases, but does not vanish at half-filling. Thus there is a superconducting solution at half filling, at the particle-hole symmetric point, like in VCA.

Similar calculations were attempted for s , d and $d+id$ -wave superconductivity, with the bath operators d_i of Fig. 7 replaced by singlet pairing operators, but were not successful: either the trivial (normal) solution was found, or the CDMFT procedure did not converge.

VI. DISCUSSION

Our approach is based on a real-space analysis and is not confined to the neighborhood of the Fermi surface. Short-range correlations are taken into account exactly, and retardation effects may be important: we go well beyond mean-field theory, even though long-range fluctuations are not taken into account. We also study, on the same footing and without bias, all possible pairing symmetries.

Our conclusions are to be contrasted with those of other studies that use different methodologies, and that conclude that the preferred SC solution has $d + id$ symmetry: For instance, in Ref. [5], a renormalization-group analysis based on a small number of k -points and repulsive interactions is performed. In Ref. [7], renormalized mean-field theory is applied on the $t - J$ model (thus in the strong coupling limit, not the same regime as ours). A functional renormalization-group analysis is also performed, with the same conclusions, even though the approach is usually applied at lower coupling. In Ref. [8], a variational Monte Carlo method is applied, but a d -wave symmetry is assumed at the outset. The constrained path Monte Carlo analysis of Ref. [9] necessitates an initial wave function, and thus may be biased towards a singlet-pairing solution as well.

On the other hand, the mean-field analysis of Ref. [10] concludes that triplet, $p + ip$ superconductivity is preferred if the on-site interaction is repulsive and the nearest-neighbor interaction is attractive. But retardation effects from a strong on-site interaction, not visible in a mean-field treatment, may lead to an effective, nearest-neighbor attraction. As demonstrated in Ref. [29], an additional, repulsive nearest-neighbor interaction V does not necessarily suppress this effect. This is a complicated dynamical question, especially in the intermediate-coupling regime.

Many authors have argued that antiferromagnetic spin fluctuations provide the pairing “glue” in high- T_c superconductors. In particular, within the Hubbard model, the energy scale

associated with short-range spin fluctuations has been shown to correlate with features of the anomalous self-energy [39]. Triplet pairing, on the other hand, would require ferromagnetic spin fluctuations.

VII. CONCLUSION

We have shown that triplet, p -wave superconductivity emerges as the dominant channel for superconductivity in the extended Hubbard model on the graphene lattice at weak to moderate coupling for dopings ranging from zero to 20%, using the variational cluster approximation (VCA) and cellular dynamical mean field theory (CDMFT) with an exact diagonalization solver at zero temperature. In the presence of an extended interaction V , we performed a mean-field decoupling of the inter-cluster interaction, a method we call the dynamical Hartree approximation (DHA), used in conjunction with VCA or CDMFT.

VCA simulations show that the real (nonchiral) p -wave symmetry is favored for small V , small on-site interaction U or large doping, whereas the chiral combination $p + ip$ is favored for larger values of V , stronger on-site interaction U or smaller doping. In this regime, superconductivity exists even at half-filling, even though the order weakens on approaching half-filling.

A study of the pairing dynamics similar to that of Refs [29, 39, 40] would be of interest.

ACKNOWLEDGMENTS

Discussions with A.-M.S. Tremblay are gratefully acknowledged. Computing resources were provided by Compute Canada and Calcul Québec. This research is supported by NSERC grant no RGPIN-2015-05598 (Canada) and by FRQNT (Québec).

-
- [1] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Reviews of Modern Physics*, **81**, 109 (2009).
 - [2] A. M. Black-Schaffer and C. Honerkamp, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **26**, 423201 (2014).
 - [3] N. Kopnin and M. Salomaa, *Phys. Rev. B*, **44**, 9667 (1991).
 - [4] D. Ivanov, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 268 (2001).
 - [5] R. Nandkishore, L. S. Levitov, and A. V. Chubukov, *Nat Phys*, **8**, 158 (2012).
 - [6] R. Nandkishore and A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B*, **86**, 115426 (2012).
 - [7] W. Wu, M. M. Scherer, C. Honerkamp, and K. Le Hur, *Phys. Rev. B*, **87**, 094521 (2013).
 - [8] S. Pathak, V. B. Shenoy, and G. Baskaran, *Phys. Rev. B*, **81**, 085431 (2010).
 - [9] T. Ma, Z. Huang, F. Hu, and H.-Q. Lin, *Phys. Rev. B*, **84**, 121410 (2011).
 - [10] B. Uchoa and A. H. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 146801 (2007).
 - [11] T. Ma, F. Yang, H. Yao, and H.-Q. Lin, *Phys. Rev. B*, **90**, 245114 (2014).
 - [12] There is some variation in the literature on the use of p - and d -wave terminology and their relation to triplet vs singlet pairing. Strictly speaking, one should use conventional notation for the D_{6h} point group. See Ref. [13].
 - [13] A. M. Black-Schaffer, W. Wu, and K. Le Hur, *Phys. Rev. B*, **90**, 054521 (2014).
 - [14] Z.-C. Gu, H.-C. Jiang, D. N. Sheng, H. Yao, L. Balents, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. B*, **88**, 155112 (2013).
 - [15] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrighoni, and M. Potthoff, *Phys. Rev. B*, **70**, 245110 (2004).
 - [16] D. Sénéchal, P.-L. Lavertu, M.-A. Marois, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 156404 (2005).
 - [17] M. Aichhorn, E. Arrighoni, M. Potthoff, and W. Hanke, *Phys. Rev. B*, **74**, 235117 (2006).
 - [18] M. Potthoff, in *DMFT at 25: Infinite dimensions, Lecture Notes of the Autumn School on Correlated Electrons 2014*, edited by E. Pavarini, E. Koch, D. Vollhardt, and A. Lichtenstein (Forschungszentrum Jülich, 2014).

- [19] A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B*, **62**, R9283 (2000).
- [20] G. Kotliar, S. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 186401 (2001).
- [21] A. Liebsch, H. Ishida, and J. Merino, *Phys. Rev. B*, **78**, 165123 (2008).
- [22] D. Sénéchal, in *Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, edited by A. Avella and F. Mancini (Springer Berlin Heidelberg, 2012) pp. 341–371, ISBN 978-3-642-21831-6.
- [23] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.*, **77**, 1027 (2005).
- [24] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Rev. Mod. Phys.*, **78**, 865 (2006).
- [25] A.-M. Tremblay, B. Kyung, and D. Sénéchal, *Low Temperature Physics*, **32**, 424 (2006).
- [26] T. Wehling, E. Şaşıoğlu, C. Friedrich, A. Lichtenstein, M. Katsnelson, and S. Blügel, *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 236805 (2011).
- [27] M. Potthoff, *Eur. Phys. J. B*, **32**, 429 (2003).
- [28] M. Potthoff, in *Theoretical methods for Strongly Correlated Systems*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, edited by A. Avella and F. Mancini (Springer, 2012) Chap. 9.
- [29] D. Sénéchal, A. G. R. Day, V. Bouliane, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*, **87**, 075123 (2013).
- [30] D. Sénéchal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 522 (2000).
- [31] Z. Meng, T. Lang, S. Wessel, F. Assaad, and A. Muramatsu, *Nature*, **464**, 847 (2010).
- [32] S. Sorella, Y. Otsuka, and S. Yunoki, *Sci. Rep.*, **2** (2012).
- [33] S. R. Hassan and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 096402 (2013).
- [34] F. F. Assaad and I. F. Herbut, *Phys. Rev. X*, **3**, 031010 (2013).
- [35] W. Wu and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*, **89**, 205128 (2014).
- [36] M. Aichhorn, E. Arrighoni, M. Potthoff, and W. Hanke, *Phys. Rev. B*, **74**, 024508 (2006).
- [37] S. S. Kancharla, B. Kyung, D. Sénéchal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*, **77**, 184516 (2008).
- [38] D. Sénéchal, *Phys. Rev. B*, **81**, 235125 (2010).
- [39] B. Kyung, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B*, **80**, 205109 (2009).
- [40] E. Gull and A. J. Millis, *Phys. Rev. B*, **90**, 041110 (2014).

5.1 Complément : solutions p et f par la CDMFT

Même si une simulation avec la méthode du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) favorise la solution $p + ip$, en l'absence de fonction d'hybridation complexe, nous obtenons une solution de type p pure ainsi qu'une solution de type f . Nous discutons de ces solutions p et f dans cette section complétant ainsi l'article. Les contraintes sur les paramètres de bain définissant les solutions p et f sont les suivantes :

$$\begin{cases} d_1 = -d_3, d_5 = 0 \text{ et } d_2 = -d_4, d_6 = 0 \text{ pour } p \\ d_1 = d_3 = d_5 \text{ et } d_2 = d_4 = d_6 \text{ pour } f \end{cases} \quad (5.1)$$

Pour les paramètres de bain d_i , voir figure 7 de l'article.

À la figure 5.1, on montre le paramètre d'ordre supraconducteur triplet p (ou la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\Delta}_{p,1}$ du tableau I de l'article) en fonction du dopage $\delta = 1 - n$, où n est la densité électronique. Le système n'est pas supraconducteur au demi-remplissage. En fonction du dopage, le paramètre d'ordre supraconducteur augmente en amplitude et diminue à 10% avant de disparaître aux environs de 16%. Il a la forme d'un dôme comme dans le cas du modèle de Hubbard défini sur un réseau carré, qui modélise les cuprates supraconducteurs. En fonction de la répulsion électron-électron entre atomes voisins, l'amplitude du paramètre d'ordre p augmente lorsque V augmente. Ainsi l'interaction de Coulomb aux plus proches voisins favorise la supraconductivité contrairement au modèle de Hubbard étendu défini sur un réseau carré, qui modélise les cuprates supraconducteurs. Noter aussi que le paramètre d'ordre est plus petit que pour la solution $p + ip$ par un facteur de 3 à 4.

La valeur moyenne de l'opérateur supraconducteur de type f ($\hat{\Delta}_f$ du tableau I de l'article) est nulle lorsque l'opérateur est défini aux voisins immédiats. Par contre, un paramètre d'ordre au deuxième voisin n'est pas nul. Il est défini de la façon suivante :

$$\hat{\Delta}_f = \sum_{\mathbf{r}} (T'_{1,\mathbf{r}} + T'_{2,\mathbf{r}} + T'_{3,\mathbf{r}}) \quad (5.2)$$

où les $T'_{i,\mathbf{r}}$ sont donnés par :

$$\begin{cases} T'_{1,\mathbf{r}} = c_{\mathbf{r},\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_1-\mathbf{e}_3,\downarrow} + c_{\mathbf{r},\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_1-\mathbf{e}_3,\uparrow} \\ T'_{2,\mathbf{r}} = c_{\mathbf{r},\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_2-\mathbf{e}_3,\downarrow} + c_{\mathbf{r},\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_2-\mathbf{e}_3,\uparrow} \\ T'_{3,\mathbf{r}} = c_{\mathbf{r},\uparrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_1-\mathbf{e}_2,\downarrow} + c_{\mathbf{r},\downarrow} c_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_1-\mathbf{e}_2,\uparrow} \end{cases} \quad (5.3)$$

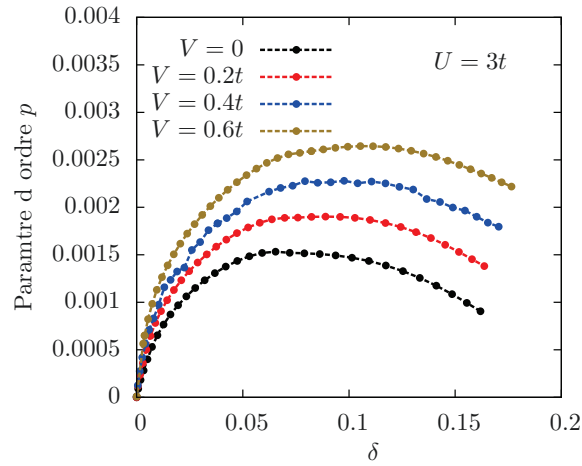


FIGURE 5.1 Paramètre d'ordre supraconducteur p (ou la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\Delta}_{p,1}$ du tableau I de l'article) en fonction du dopage $\delta = 1 - n$ sur le réseau du graphène où n est la densité électronique. La répulsion électron-électron entre atomes voisins V favorise la supraconductivité. Comme dans le cas du modèle de Hubbard étendu défini sur un réseau carré, qui modélise les cuprates supraconducteurs, le paramètre d'ordre a la forme d'un dôme centré aux environs de 10% de dopage.

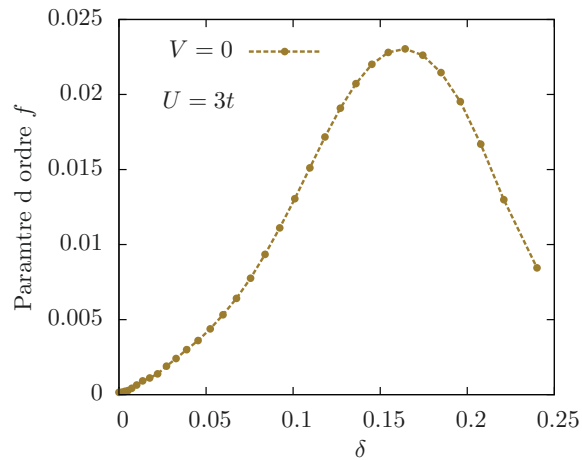


FIGURE 5.2 Paramètre d'ordre supraconducteur f en fonction du dopage sur le réseau du graphène. Contrairement à la solution p , la supraconductivité de type f existe seulement au deuxième voisin, en plus le paramètre d'ordre a la forme d'un dôme comme dans les cuprates.

La figure 5.2 décrit le comportement du paramètre d'ordre supraconducteur triplet f , ou la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{\Delta}'_f$ de l'équation (5.2), en fonction du dopage. Le paramètre d'ordre supraconducteur est nul au demi-remplissage et augmente en fonction du dopage, comme dans le cas de la symétrie p . Il a la forme d'un dôme centré autour de 15% avant de s'annuler aux environs de 25%.

Chapitre 6

Conclusion générale

Dans la première partie de cette thèse, nous avons étudié le diagramme de phase du modèle de Kitaev-Hubbard au demi-remplissage. Ce diagramme apparaît à la figure 5 de l'article et est reproduit ci-dessous. La solution analytique, dans la limite sans interactions, révèle une transition de Lifshitz, c'est-à-dire une modification de la surface de Fermi en passant d'une phase semi-métallique à une autre. Ces phases se distinguent seulement par leurs points de Dirac qui sont au nombre de deux lorsque $t' > t'_c$ et de huit lorsque $t' < t'_c$. À $t' = 0$, on retrouve les deux points de Dirac du graphène. Le paramètre d'ordre topologique ne varie pas à la transition entre les deux phases. Cette transition se produit si les nouveaux points de Dirac s'annulent par paires. Les points de Dirac survivent en présence des interactions. En effet, ils sont protégés par la symétrie par inversion du temps. D'un point de vue expérimental, il est possible d'observer ces points de Dirac dans les réseaux optiques d'atomes froids par effet tunnel de Bloch-Zener.

En plus des phases semi-métalliques, le diagramme de phase contient une phase de liquide de spin algébrique (ALS) qui se distingue par ses applications potentielles dans la réalisation des ordinateurs quantiques. Cette phase est localisée au-dessus de la phase antiferromagnétique (AF) sur la figure. L'étude du comportement du paramètre d'ordre antiferromagnétique a permis d'identifier la nature de la transition entre les différentes phases. Elle est du premier ordre entre la phase de liquide de spin algébrique et la phase antiferromagnétique. Cependant entre l'antiferromagnétisme et les deux semi-métaux, le changement de phase est continu.

Comme deuxième projet, nous nous sommes intéressés à l'étude du modèle de Hubbard sur le réseau en treillis qui, constitue une description simplifiée du matériau $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, ayant une structure en échelles faiblement couplées. Dans un premier temps, nous avons établi le diagramme de phase au demi-remplissage. L'approximation de l'amas variationnel (VCA) permet d'identifier une phase antiferromagnétique itinérante et une phase antiferromagnétique isolante. Dans la limite des petites valeurs des paramètres du modèle, la courbe critique suit une loi en

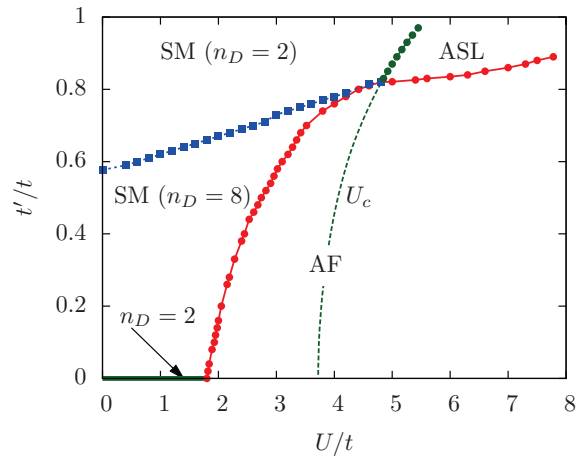


FIGURE 6.1 Diagramme de phase du modèle de Kitaev-Hubbard au demi-remplissage. SM, AF et ALS désignent respectivement la phase semi-métallique, antiferromagnétique et de liquide de spin algébrique. n_D est le nombre de points de Dirac.

racine carrée en fonction du terme de saut entre les échelles, d'où une signature du deuxième ordre. La densité d'états montre les caractéristiques d'un pseudogap à la fréquence nulle. Dans un deuxième temps, nous avons aussi étudié la supraconductivité de ce modèle du côté dopé aux trous. Au demi-remplissage, le paramètre d'ordre supraconducteur est nul, mais devient fini en fonction du dopage. L'approximation de l'amas variationnel (VCA) indique un paramètre d'ordre de type $d + id$ (donc chiral) qui a la forme d'un dôme en fonction du dopage. Cependant, cette solution supraconductrice complexe existe seulement dans une région de dopage bien déterminée et redevient réelle à l'extérieur de ce domaine. L'utilisation de l'approximation du champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) reproduit la forme en dôme du paramètre d'ordre supraconducteur. Néanmoins, contrairement à la VCA, la solution est réelle dans tout le domaine d'existence du paramètre d'ordre, mais reste toujours de type d . Le désaccord entre les méthodes VCA et CDMFT sur la nature complexe du paramètre d'ordre, dans une portion de dopage, peut être expliqué par une différence d'énergie très petite entre la solution réelle et la solution complexe. Le super-courant, mesuré sur l'amas, indique une migration des paires de Cooper, initialement localisées entre les échelles, vers le centre des échelles au fur et à mesure qu'on augmente le dopage.

Enfin, notre dernier projet porte sur l'étude de la supraconductivité du modèle de Hubbard défini sur le réseau du graphène. Dans la limite à couplage faible et dans une région de dopage de 0 à 20%, la symétrie triplet p est favorisée, comparée aux autres possibilités. En présence des interactions étendues V , nos simulations conduisent à une symétrie p pour V faible. Cependant, dans la limite des paramètres théoriques du graphène, une solution $p + ip$ chirale devient favorisée. Elle est aussi la solution favorisée en couplage fort. Ce dernier constitue un résultat intéressant,

compte tenu de ses applications potentielles, en particulier dans la réalisation des ordinateurs quantiques topologiques.

Bibliographie

- [1] J. Hubbard, Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences **276**, 238 (1963).
- [2] J. Hubbard, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **277**, 237 (1964).
- [3] J. Hubbard, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **281**, 401 (1964).
- [4] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism* (Springer, 1994).
- [5] P. Fazekas, Lecture Notes in Physics **5**, 650 (1999).
- [6] E. Fradkin, *Field theories of condensed matter systems* volume 7 (Addison-Wesley Redwood City, 1991).
- [7] J. Hubbard, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **276**, 238 (1963).
- [8] M. C. Gutzwiller, Physical Review Letters **10**, 159 (1963).
- [9] J. Kanamori, Progress of Theoretical Physics **30**, 275 (1963).
- [10] P. Anderson, Physical Review **79**, 350 (1950).
- [11] P. W. Anderson, Physical Review **115**, 2 (1959).
- [12] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [13] A. Georges and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **45**, 6479 (1992).
- [14] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [15] D. Vollhardt, AIP Conference Proceedings **1297** (2010).
- [16] J. M. Luttinger and P. Nozières, *Phys. Rev.* **127**, 1431 (1962).
- [17] P. Nozières and J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **127**, 1423 (1962).
- [18] S. Pairault, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5389 (1998).
- [19] S. Pairault, D. Sénéchal, and A.-M. Tremblay, *Eur. Phys. J. B* **16**, 85 (2000).
- [20] W. Metzner, *Phys. Rev. B* **43**, 8549 (1991).
- [21] J. Spalek, *Acta Physica Polonica A* **III**, 409 (2007), 0706.4236.
- [22] N. Bogolyubov and S. Tyablikov, Retarded and advanced green functions in statistical physics, in *Soviet Physics Doklady*, volume 4, p. 589, 1959.

- [23] A. Damascelli, *Physica Scripta* **2004**, 61 (2004).
- [24] W. Meissner and R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaften* **21**, 787 (1933).
- [25] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [26] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64**, 189 (1986).
- [27] J. Schrieffer, *Solid state communications* **92**, 129 (1994).
- [28] D. A. Brawner and H. R. Ott, *Phys. Rev. B* **50**, 6530 (1994).
- [29] M. L. Teague, A. D. Beyer, M. S. Grinolds, S. I. Lee, and N.-C. Yeh, *EPL (Europhysics Letters)* **85**, 17004 (2009).
- [30] P. D. Johnson *et al.*, *Journal of Physics : Conference Series* **449**, 012007 (2013).
- [31] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [32] C. Bourbonnais and D. Jerome, *Advances in synthetic metals: twenty years of progress in science and technology* (Elsevier, 1999), chap. 3.
- [33] D. Jérôme, *Chemical Reviews* **104**, 5565 (2004), PMID : 15535660.
- [34] D. Jérôme and H. J. Schulz, *Advances in Physics* **51**, 293 (2002).
- [35] N. Doiron-Leyraud *et al.*, *Phys. Rev. B* **80**, 214531 (2009).
- [36] I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **62**, R14669 (2000).
- [37] I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, *Phys. Rev. B* **65**, 180502 (2002).
- [38] Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, and Y. Bando, *Journal of Solid State Chemistry* **95**, 230 (1991).
- [39] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994).
- [40] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and D. Würtz, *Phys. Rev. B* **50**, 13515 (1994).
- [41] K. Ishida *et al.*, *Phys. Rev. B* **53**, 2827 (1996).
- [42] F. Mila, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **6**, 201 (1998).
- [43] Z. Hiroi, *Journal of Solid State Chemistry* **123**, 223 (1996).
- [44] E. Dagotto, *Reports on Progress in Physics* **62**, 1525 (1999).
- [45] T. Rice, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **103**, 165 (1996).
- [46] E. Dagotto and T. Rice, *Rep. Prog. Phys* **62**, 1525 (1996).
- [47] E. Dagotto, J. Riera, and D. Scalapino, *Phys. Rev. B* **45**, 5744 (1992).
- [48] S. Gopalan, T. M. Rice, and M. Sgrist, *Phys. Rev. B* **49**, 8901 (1994).
- [49] B. Normand, D. F. Agterberg, and T. M. Rice, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4296 (1999).
- [50] B. Normand and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **56**, 8760 (1997).
- [51] V. P. Mineev, K. Samokhin, and L. Landau, *Introduction to unconventional superconductivity* (CRC Press, 1999).
- [52] K. Magishi *et al.*, *Phys. Rev. B* **57**, 11533 (1998).
- [53] M. Uehara *et al.*, *Journal of the Physical Society of Japan* **65**, 2764 (1996).
- [54] M. Isobe *et al.*, *Phys. Rev. B* **57**, 613 (1998).
- [55] T. Osafune, N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1980 (1997).

- [56] D. Braithwaite *et al.*, *Solid State Communications* **114**, 533 (2000).
- [57] T. Nakanishi *et al.*, *Phys. Rev. B* **72**, 054520 (2005).
- [58] K. Novoselov *et al.*, *nature* **438**, 197 (2005).
- [59] M. Huefner *et al.*, *Phys. Rev. B* **79**, 134530 (2009).
- [60] S. De Franceschi, L. Kouwenhoven, C. Schönberger, and W. Wernsdorfer, *Nature Nanotechnology* **5**, 703 (2010).
- [61] O.-P. Saira *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 027203 (2007).
- [62] G. Profeta, M. Calandra, and F. Mauri, *Nature physics* **8**, 131 (2012).
- [63] W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968).
- [64] R. Nandkishore and A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **86**, 115426 (2012).
- [65] T. Ma, F. Yang, H. Yao, and H.-Q. Lin, *Phys. Rev. B* **90**, 245114 (2014).
- [66] A. M. Black-Schaffer and S. Doniach, *Phys. Rev. B* **75**, 134512 (2007).
- [67] T. E. Weller, M. Ellerby, S. S. Saxena, R. P. Smith, and N. T. Skipper, *Nature Physics* **1**, 39 (2005).
- [68] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [69] A. M. Black-Schaffer, W. Wu, and K. Le Hur, *Phys. Rev. B* **90**, 054521 (2014).
- [70] J. B. Marston and C. Zeng, *Journal of Applied Physics* **69** (1991).
- [71] J. S. Helton *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 107204 (2007).
- [72] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White, *Science* **332**, 1173 (2011).
- [73] S. R. Hassan, P. V. Sriluckshmy, S. K. Goyal, R. Shankar, and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 037201 (2013).
- [74] M. Hermele *et al.*, *Phys. Rev. B* **70**, 214437 (2004).
- [75] Y. Ran, M. Hermele, P. A. Lee, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 117205 (2007).
- [76] M. Hermele, Y. Ran, P. A. Lee, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. B* **77**, 224413 (2008).
- [77] S. R. Hassan, P. V. Sriluckshmy, S. K. Goyal, R. Shankar, and D. Sénéchal, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 037201 (2013).
- [78] N. Mott, *Canadian Journal of Physics* **34**, 1356 (1956).
- [79] M. Caffarel and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1545 (1994).
- [80] W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 4302 (1970).
- [81] K. Kobayashi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 803 (1999).
- [82] P. W. Leung, Z. Liu, E. Manousakis, M. A. Novotny, and P. E. Oppenheimer, *Phys. Rev. B* **46**, 11779 (1992).
- [83] P. W. Leung, B. O. Wells, and R. J. Gooding, *Phys. Rev. B* **56**, 6320 (1997).
- [84] N. Bulut, D. Scalapino, and S. White, *Phys. Rev. B* **50**, 7215 (1994).
- [85] N. Bulut, D. J. Scalapino, and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 705 (1994).
- [86] A. Moreo, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, S. R. White, and N. E. Bickers, *Phys. Rev. B* **41**, 2313 (1990).
- [87] R. Preuss *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 732 (1994).

- [88] R. Preuss, W. Hanke, C. Gröber, and H. G. Evertz, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1122 (1997).
- [89] M. Vekić and S. R. White, *Phys. Rev. B* **47**, 1160 (1993).
- [90] R. N. Silver, D. S. Sivia, and J. E. Gubernatis, *Phys. Rev. B* **41**, 2380 (1990).
- [91] C. E. Creffield, E. G. Klepfish, E. R. Pike, and S. Sarkar, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 517 (1995).
- [92] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 206402 (2003).
- [93] M. Nuss, E. Arrigoni, M. Aichhorn, and W. von der Linden, *Phys. Rev. B* **85**, 235107 (2012).
- [94] M. Potthoff, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **36**, 335 (2003).
- [95] M. Potthoff, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **32**, 429 (2003).
- [96] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [97] A. Georges, arXiv preprint cond-mat/0403123 (2004).
- [98] G. Kotliar and D. Vollhardt, *Physics Today* **57**, 53 (2004).
- [99] C. J. Bolech, S. S. Kancharla, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **67**, 075110 (2003).
- [100] C. Gros and R. Valentí, *Phys. Rev. B* **48**, 418 (1993).
- [101] D. Sénéchal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).
- [102] M. G. Zacher, R. Eder, E. Arrigoni, and W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2585 (2000).
- [103] M. G. Zacher, R. Eder, E. Arrigoni, and W. Hanke, *Phys. Rev. B* **65**, 045109 (2002).
- [104] C. M. Bender, F. Cooper, G. S. Guralnik, and D. H. Sharp, *Phys. Rev. D* **19**, 1865 (1979).
- [105] C. Bender, F. Cooper, R. Kenway, and L. M. Simmons, *Phys. Rev. D* **24**, 2693 (1981).
- [106] D. Sénéchal, D. Perez, and D. Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
- [107] D. Sénéchal, arXiv preprint arXiv :0806.2690 (2008).
- [108] D. Sénéchal and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126401 (2004).
- [109] N. P. Armitage *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257001 (2002).
- [110] K. M. Shen *et al.*, *Science* **307**, 901 (2005).
- [111] Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst, *Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems: a practical guide* volume II (Siam, 2000).
- [112] R. Freund, *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems : A Practical Guide* **11**, 80 (2000).
- [113] A. Krylov, *Izv. Akad. Nauk. SSSR Otd Mat. Estest* **1**, 491 (1931).
- [114] Z. Bai, *Applied Numerical Mathematics* **43**, 9 (2002).
- [115] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [116] M. Potthoff, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **32**, 429 (2003).
- [117] M. Potthoff, M. Aichhorn, and C. Dahnken, *Physical Review Letters* **91**, 206402 (2003).
- [118] M. Potthoff, *Condensed Matter Physics* **9**, 557 (2006), cond-mat/0406671.

- [119] M. Potthoff, *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* **32**, 429 (2003).
- [120] J. M. Luttinger and J. C. Ward, *Phys. Rev.* **118**, 1417 (1960).
- [121] G. Baym and L. P. Kadanoff, *Phys. Rev.* **124**, 287 (1961).
- [122] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, and G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001).
- [123] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [124] A. Kitaev, *Annals of Physics* **321**, 2 (2006), January Special Issue.
- [125] D. Jaksch and P. Zoller, *Annals of Physics* **315**, 52 (2005), Special Issue.
- [126] S. R. Hassan, S. Goyal, R. Shankar, and D. Sénéchal, *Phys. Rev. B* **88**, 045301 (2013).
- [127] P. A. Lee, *Reports on Progress in Physics* **71**, 012501 (2008).
- [128] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, and G. Saito, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 107001 (2003).
- [129] L.-K. Lim, J.-N. Fuchs, and G. Montambaux, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 175303 (2012).
- [130] T. Kaneyoshi, *Physica B : Condensed Matter* **407**, 4358 (2012).
- [131] Y. Yamaji, T. Misawa, and M. Imada, *Journal of the Physical Society of Japan* **75**, 094719 (2006).
- [132] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni, and M. Potthoff, *Phys. Rev. B* **70**, 245110 (2004).
- [133] Z. Weihong, J. Oitmaa, C. Hamer, and R. Bursill, *Journal of Physics : Condensed Matter* **13**, 433 (2001).
- [134] H. Kontani and K. Ueda, *Physical Review Letters* **80**, 5619 (1998).