

Université de Montréal

**Énergétique des vortex et comportement magnétique
de la supraconductivité $SO(5)$**

par

Michaël Juneau

**Département de physique
Faculté des arts et des sciences**

**Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures
en vue de l'obtention du grade de
Maître ès sciences (M.Sc.)
en physique**

Septembre, 2002

©Michaël Juneau, 2002



AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé:

**Énergétique des vortex et comportement magnétique
de la supraconductivité $SO(5)$**

présenté par:

Michaël Juneau

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes:

M. Paranjape, président-rapporteur
R. MacKenzie, directeur de recherche
Y. Lépine, membre du jury

Mémoire accepté le:

RÉSUMÉ

Une courte révision de la supraconductivité classique est présentée. Un modèle Ginzburg-Landau basé sur la théorie $SO(5)$ réunissant les phases supraconductrice et anti-ferromagnétique des supraconducteurs à haute température est examiné. Des solutions numériques des équations de ce modèle sont calculées et discutées. Ces solutions prennent la forme de vortex dotés d'un nombre entier de quanta de flux. Un noyau anti-ferromagnétique peut s'établir dans le vortex sous certaines conditions, qui seront décrites. L'énergie libre divisée par le quanta de flux est examinée dans une redéfinition du critère habituel discriminant les types I et II des supraconducteurs.

Mots-clés: supraconducteur, anti-ferromagnétisme, théorie, haute température, symétrie, Ginzburg-Landau

ABSTRACT

A short review of classical superconductivity is presented. A Ginzburg-Landau model based on the $SO(5)$ theory of superconducting and anti-ferromagnetic phases of high-temperature superconductivity is examined. Numerical solutions of the equations of this model are calculated and discussed. These solutions take the form of vortices containing an integer number of flux quanta. An anti-ferromagnetic vortex core may appear under certain conditions, which will be described herein. The free energy divided by the number of flux quanta will be studied, giving rise to a redefinition of the usual criterion that discriminates between superconductors of type I and II.

Key words: superconductor, anti-ferromagnetism, theory, high temperature, symmetry, Ginzburg-Landau

TABLE DES MATIERES

RÉSUMÉ	i
ABSTRACT	ii
TABLE DES MATIERES	iii
LISTE DES TABLEAUX	vii
LISTE DES FIGURES	viii
REMERCIEMENTS	x
CHAPITRE 1: Introduction	1
1.1 Historique de la supraconductivité	1

1.1.1	Débuts	1
1.1.2	Découverte de la supraconductivité à haute température	5
1.1.3	Propriétés principales	7
1.2	Le modèle $SO(5)$ dans la conjecture	14
1.2.1	Buts du modèle	16
1.2.2	Critiques du modèle $SO(5)$	16
1.2.3	Aperçu du modèle $SO(5)$ projeté	17
1.3	Grandes lignes de ce mémoire	18
CHAPITRE 2: Modèle $SO(2)$ de la SC conventionnelle		20
2.1	Énergie libre	20
2.2	Équations du mouvement	21
2.3	Ansätze du vortex	21
2.4	Changement de variables sans dimension	23

2.5 Conditions frontières (linéarisation) 25

2.6 Changement vers une équation différentielle de différence 27

2.7 Résultats numériques 28

 2.7.1 Formes des solutions vs. les paramètres 28

 2.7.2 Énergie libre du vortex 29

CHAPITRE 3: Modèle SO(5) 33

3.1 Énergie libre 33

3.2 Équations du mouvement 35

3.3 Ansatz du vortex 36

3.4 Changement de variables sans dimension 36

3.5 Conditions frontières (linéarisation) 38

3.6 Changement vers une équation différentielle de différence 39

3.7 Résultats numériques 39

TABLE DES MATIERES

vi

3.7.1 β_c par calcul variationnel 40

3.7.2 β_c par solution des équations différentielles 42

3.7.3 Formes des solutions vs. les paramètres 43

3.7.4 Énergie libre du vortex 44

Conclusion **50**

BIBLIOGRAPHIE **xii**

APPENDICE A: Données expérimentales sur les supraconducteurs **xiv**

APPENDICE B: Méthode numérique de la relaxation **xvi**

B.1 Présentation générale de l'algorithme xvii

LISTE DES TABLEAUX

3-1	Comparaison entre calculs numériques et fonction analytique pour $\kappa_0(\beta)$	47
A-1	Exemples de longueurs caractéristiques	xiv
A-2	Exemples de valeurs d'inductions magnétiques critiques	xv

LISTE DES FIGURES

2-1	Estimés initiaux des solutions $SO(2)$	26
2-2	Effet de la variation de κ sur les solutions $SO(2)$	29
2-3	Effet du nombre d'enroulement sur les solutions $SO(2)$	29
2-4	Vortex type I $SO(2)$	30
2-5	Vortex type II $SO(2)$	30
2-6	Comportement de \mathcal{F}_m dans le modèle $SO(2)$	32
3-1	Potentiel dans le modèle $SO(5)$	34
3-2	Estimés initiaux $SO(5)$ avec forte présence du noyau AF	38
3-3	Estimés initiaux $SO(5)$ avec noyau AF faible	38

3-4	Courbes de β_c par calcul variationnel	43
3-5	Courbes de β_c par méthodes combinées	43
3-6	Paramètres α, β permettant la présence du noyau AF pour $\delta = 1$	44
3-7	Influence de la présence du noyau AF par κ et m	44
3-8	Superposition des trois méthodes de recherche de β_c	45
3-9	Solutions atteintes avec estimés initiaux de la Fig. 3-3	46
3-10	Effet de la variation de κ sur la solution η dans $SO(5)$	47
3-11	Effet du nombre d'enroulement sur la solution η dans $SO(5)$	47
3-12	Comportement de \mathcal{F}_m dans le modèle $SO(5)$	48

REMERCIEMENTS

Je remercie mon directeur de maîtrise, Richard MacKenzie, qui a su m'inculquer le niveau de compréhension requis pour ce sujet à l'aide de son immense talent de pédagogue et de sa patience à mon égard.

Je remercie également Marc-André Vachon qui m'a aidé à surmonter de nombreuses difficultés dans ce travail et avec qui ce fut un authentique plaisir de travailler.

CHAPITRE 1

Introduction

1.1 Historique de la supraconductivité

1.1.1 Début

Les travaux expérimentaux de H. Kamerlingh Onnes en 1911 sur la dépendance en température de la résistivité du mercure [1] marquaient le début de la branche de la supraconductivité. La compréhension théorique du phénomène de conduction électrique se centrait sur le fameux modèle de conduction métallique développé par Riecke, Drude et Lorentz au début du 20^e siècle. La découverte de la chute complète (qui est différente, il faut le souligner, d'une chute spectaculaire mais partielle) de la résistivité autour d'une température dite critique de 4 K et en dessous ne cadrait pas avec la théorie de l'époque.

Rapidement, d'autres matériaux présentant une température critique T_c sont trouvés: des éléments (métaux, comme l'étain, le plomb, l'aluminium, etc.) et plus tard, des alliages et des composés intermétalliques. Malheureusement, toute application pratique utilisant ces matériaux (de T_c maximal à environ 23 K) est limitée par les contraintes imposées par le refroidissement à l'hélium liquide, qui est nécessaire pour atteindre ces basses températures.

Puis, en 1933, un phénomène encore plus spectaculaire au point de vue des physiciens se révèle à eux: les supraconducteurs présentent un parfait diamagnétisme pour des champs externes suffisamment faibles (travaux de Meissner et Oschenfeld [2]). Pour des champs plus grands qu'une certaine valeur dépendant de la température ($H > H_c(T)$), la supraconductivité est détruite et le matériau retourne à l'état normal (conducteur). Ce changement peut avoir lieu soit brusquement, soit graduellement, dépendant du type de supraconducteur, comme nous allons voir plus loin. Une courbe empirique délimitant les états supraconducteur et normal est donnée (pour les premiers supraconducteurs trouvés):

$$H_{cm}(T) = H_{cm}(0) \left[1 - (T/T_c)^2\right] \quad (1.1)$$

où H représente le champ magnétique appliqué, la lettre c signifie critique, la lettre m signifie qu'on regarde la valeur de ce champ dans le corps du matériau (et non en surface, où naissent d'autres complications, sur lesquelles nous allons revenir).

Les théories de supraconductivité se succèdent relativement lentement. La découverte de l'effet Meissner inspire plusieurs théoriciens à poser des modèles phénoménologiques. En 1933, Gorter et Casimir [3, 4] écrivent sur la thermodynamique de l'état supraconducteur, puisque l'expérience montre qu'on peut s'en approcher et s'en éloigner de façon réversible. En 1935, les fameux frères London soumettent des articles [5, 6] qui établissent un lien entre champs électrique E et magnétique B avec la densité de courant J . Une valeur clé qui ressort de leur analyse est la longueur de pénétration λ_L qui entre dans l'expression du champ magnétique essayant de pénétrer dans un matériau supraconducteur:

$$H(x) = H(0)e^{-x/\lambda_L} \quad (1.2)$$

Le modèle prédit donc que l'effet Meissner n'est pas réalisé en surface du matériau supraconducteur puisque le champ doit d'abord décroître de façon exponentielle à mesure qu'il entre dans celui-ci. Cette théorie reste phénoménologique puisqu'elle n'est en fait que l'ensemble des équations de Maxwell, accompagné des deux équations servant de contraintes entre E , B et J .

La justification de la présence de ces équations supplémentaires n'est pas encore établie dans le milieu.

La lancée phénoménologique se poursuit dans les années 50 avec la théorie électronique non-locale de Pippard. Ce dernier ajoute la contrainte de la cohérence des fonctions d'ondes supraconductrices, qui empêche une variation trop rapide (les traitements précédents avaient trop simplifié en permettant une chute brusque et totale aux extrémités). La longueur de cohérence ξ devient une quantité importante qui caractérise les différents matériaux supraconducteurs et représente la limite d'interaction entre les électrons supraconducteurs.

Ensuite vient la théorie de Ginzburg-Landau (GL), une approche phénoménologique, qui se sert de l'outillage de l'expansion Landau de l'énergie libre en termes de paramètres d'ordre. Celui utilisé dans la théorie GL est une fonction d'onde complexe dont on sait que le module est proportionnel à la densité des électrons supraconducteurs. Cette théorie rend compte des effets quantiques, ce que la théorie des London ne faisait pas. Le modèle incorpore les idées modernes de l'époque, ce qui mène à l'utilisation d'un paramètre important: $\kappa = \lambda/\xi$. Cette quantité permet de discriminer entre deux types de supraconducteurs: les types I ($\kappa < 1/\sqrt{2}$) et II ($\kappa > 1/\sqrt{2}$). Les supraconducteurs tombant dans la catégorie du type I sont essentiellement les premiers qui ont été étudiés, soit des éléments pour la plupart. Les supraconducteurs du type II sont connus à partir des années 30 et comprennent le cas spécial du niobium, les alliages, composés chimiques, et plus récemment, les cuprates.

La principale différence entre les supraconducteurs des deux types se trouve dans leur comportement magnétique, soit leur manifestation propre de l'effet Meissner. En effet, pour les membres du type I, l'effet Meissner est limité par un champ magnétique critique assez faible en dessous duquel le champ externe est complètement expulsé, tel que mentionné auparavant. Par contre, pour les supraconducteurs du type II, il existe deux champs critiques qui déterminent la réponse

au champ magnétique. Tout d'abord, un champ externe en dessous de la première limite H_{c1} est complètement expulsé. Lorsque le champ atteint une valeur entre les deux champs critiques H_{c1} et H_{c2} (tels que $H_{c2} > H_{c1}$), un état mixte subsiste, c'est-à-dire que le champ pénètre à l'intérieur du corps du supraconducteur, mais seulement en des régions d'une certaine forme qui dépend de la géométrie du système; par exemple en forme de tube de flux, soit les vortex¹, qui seront amplement décrits en détail plus loin. Une analyse des propriétés magnétiques en terme d'énergie de surface qui explique ce phénomène se retrouve dans la plupart des ouvrages sur la supraconductivité; par exemple, voir Tinkham [8]. Finalement, lorsque le champ externe est supérieur à H_{c2} , sa pénétration devient presque complète, permettant parfois un courant de surface supraconducteur, qui s'estompe enfin à une valeur bien supérieure de H_{c3} . Pour voir des valeurs expérimentales de champs critiques, voir l'appendice A.

Toujours dans les années 50, une théorie microscopique révolutionnaire est bâtie par Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [9]. Elle se base sur l'existence d'un état d'énergie plus faible pour les électrons se déplaçant au voisinage de la surface de Fermi. Cet état apparie deux de ces électrons, de nombre d'onde et de spins opposés, grâce à une interaction attractive. Dans la théorie originale, le couplage de paires d'électrons en onde- s (s -wave) est possible grâce à la médiation de phonons virtuels. Une bande interdite sépare l'état où le nombre maximal de paires d'électrons supraconducteurs est réalisé de l'état qui compte une paire en moins.

Or, il faut se rendre compte qu'avant BCS, personne ne sait à coup sûr quel est le mécanisme étrange qui semble vaincre la forte interaction de Coulomb entre les électrons, pour permettre à ceux-ci d'interagir. Quoiqu'il en soit, un état lié peut se former dès qu'une attraction, aussi faible qu'elle puisse être, existe. Le fer de lance de la théorie BCS implique donc des paires d'électrons de spins opposés, ce qui donne des entités de spin nul, les paires de Cooper. Ayant un spin nul,

¹D'après les travaux d'Abrikosov [7] en 1958. Les vortex laissent pénétrer une quantité de flux magnétique qui est quantifiée, ce qui amène à l'échelle macroscopique un phénomène quantique.

ces paires répondent à une statistique de Bose-Einstein. Ceci explique naturellement la présence d'une température critique en dessous de laquelle un condensat de Bose-Einstein peut se former, ainsi que sa caractéristique de superfluidité, qui se traduit par la chute totale de résistivité.

Il faut attendre vers la fin des années 50 pour que Gor'kov tisse de nouveaux liens entre la théorie microscopique et certains aspects de la théorie GL. La majeure contribution de Gor'kov est d'avoir redérivé les équations GL à partir de la théorie BCS près de la température critique en utilisant la technique des fonctions de Green. D'autres résultats intéressants sont sortis de cette analyse, notamment que la charge électronique e^* utilisée dans le modèle GL est nulle autre que deux fois la valeur de la charge élémentaire.

Le front de théories de Ginzburg, Landau, Gor'kov et aussi Abrikosov [7] semblait fournir une explication tout à fait acceptable dans certains cas précis. Les cas plus compliqués posaient des difficultés au niveau technique, et non conceptuel. Il faudra attendre un certain temps avant que la situation ne change.

1.1.2 Découverte de la supraconductivité à haute température

C'est en 1986, grâce à une expérience effectuée dans les laboratoires d'IBM, que la compréhension redevient soudainement insuffisante. Un nouveau supraconducteur, le $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$, découvert par K.A. Müller et J. Bednorz [10] a une T_c dans les 30 K. Ce composé est, ironiquement, un isolant à des températures normales et à dopage nul. La limite théorique prévue par la théorie BCS de 30 K est désormais brisée. À partir de ce moment, c'est l'escalade: de nombreux nouveaux composés sont découverts et la barre monte à des niveaux records dans les 130 K². Certains

²Le record actuel au moment d'écrire ces lignes est détenu par le $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+z}$ et a une T_c de 164 K sous une pression de 30 GPa. À une pression normale, la palme revient au $\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8.33}$ qui a une

chercheurs pensent que la limite théorique de T_c pour ces nouveaux matériaux se situe autour de 200 K, d'autres la croient beaucoup plus élevée. Plus important encore, les hautes températures critiques dépassent maintenant le niveau significatif de 77 K, soit la température de liquéfaction de l'azote, qui coûte énormément moins cher à produire que l'hélium liquide. Ceci se révèle prometteur pour des applications technologiques viables, du moins au niveau de la réfrigération.

Un important groupe des nouveaux matériaux sont les cuprates, des composés cristallins en forme de couches planaires alternantes qui contiennent de l'oxyde de cuivre (proportions variables de Cu et de O). Ils comportent typiquement des terres rares, mais plusieurs autres éléments ont été essayés, comme le mercure. Normalement, une à trois couches d'atomes différents séparent chacune des couches d'oxyde de cuivre. Une autre caractéristique importante est celle de l'influence des dopants sur les propriétés de conduction de ces composés: en effet, il est possible d'obtenir un isolant anti-ferromagnétique, un conducteur avec phase supraconductrice ou un conducteur sans cette phase en variant le dopage. Le diagramme de phase qui comprend l'influence du dopage est assez riche en variétés pour cette classe de composés et c'est une des majeures motivations qui ont amené la création du modèle $SO(5)$, qui sera discuté plus loin.

La théorie BCS ne réussit pas à rendre compte des hautes températures critiques dans ces cuprates. Une explosion d'articles fait rage depuis cette période et continue jusqu'à ce jour, puisqu'une explication définitive n'existe pas encore. Plusieurs idées sont encore débattues, comme par exemple, la présence de trous mobiles dans certaines couches du cristal, qui ajoutent à la charge effective qui se déplace dans le réseau. Un fait qui supporte cette dernière idée est la grande dépendance en dopage qui semble dicter complètement la possibilité de la présence d'une phase supraconductrice ou non. En effet, le mécanisme des trous mobiles ne peut se réaliser que si une balance précise dans le nombre des électrons de valence est atteinte.

T_c de 138 K

Au plan théorique, les paires *d-wave* d'électrons sont étudiées plus attentivement afin de proposer une explication qui colle davantage à la réalité des cuprates que l'ancien mécanisme BCS. Également, des modifications évidentes doivent être apportées aux anciennes théories pour tenir compte des effets de l'anisotropie apportée par la structure laminaire des nouveaux supraconducteurs. Nous ne tiendrons pas compte de cette structure, mais notre travail numérique peut être facilement adapté pour en inclure les aspects généraux.

Les supraconducteurs à haute température forment toujours un fabuleux casse-tête de la physique de la matière condensée. Le modèle de Hubbard (ou encore modèle t-J avec bande presque à moitié remplie) avancé au début de l'étude du sujet devait rendre compte de la forte corrélation électronique dans les oxydes. Malheureusement, seul le cas unidimensionnel donne lieu à des solutions exactes et n'est pas facilement généralisable. Dans le plus simple des modèles de Hubbard, l'Hamiltonien exhibe une symétrie entre les électrons et les trous, ce qui est idéal puisque cette caractéristique se reflète souvent dans de nombreux supraconducteurs à haute T_c .

1.1.3 Propriétés principales

a. Thermodynamique

Il est intéressant et utile de s'arrêter sur les conditions d'utilisation des fonctions thermodynamiques de l'enthalpie libre de Gibbs (\mathcal{G}) et l'énergie libre d'Helmholtz (\mathcal{F}).

D'abord, les différentes fonctions thermodynamiques choisissent un différent ensemble de variables thermodynamiques indépendantes et de variables imposées comme constantes; le choix de l'une d'entre elles est dicté par la situation considérée. Les variables indépendantes peuvent soit

s'avérer être des variables thermodynamiques extensives (proportionnelles à la taille du système), soit intensives (indépendantes de la taille du système), selon. Ces variables sont souvent appariées selon des couples extensif-intensif (ce qui leur donne une forme de travail généralisé).

Par exemple, dans les systèmes mécaniques comme celui du contenant gazeux avec piston, la variable d'état intensive est l'opposé de la pression, $-P$, et la variable extensive, le volume V . Dans les expressions des différentielles des fonctions thermodynamiques, elles sont conjuguées dans des termes de la forme PdV ou VdP . D'autres exemples de paires sont la polarisation électrique \mathbf{P} avec le champ électrique \mathbf{E} et la longueur L avec la tension J d'un fil.

Partant de la première loi de la thermodynamique en nous restreignant à des trajectoires réversibles dans l'espace de phase:

$$dU = TdS + YdX \quad (1.3)$$

où le terme YdX représente une somme de tous les couples de variables intensives Y (les forces généralisées, que ce soit mécaniques ou chimiques: $-P$, \mathbf{E} , J , etc) et différentielles de variables extensives (les déplacements généralisés: V , L , \mathbf{P} , etc). L'énergie interne U est indiquée si on veut étudier des processus pour X et l'entropie S constants. En effet:

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_X \quad Y = \left(\frac{\partial U}{\partial X} \right)_S \quad (1.4)$$

On peut facilement changer le rôle des quantités par des transformations de Legendre. Ainsi, pour obtenir l'enthalpie, on soustrait à l'énergie interne le terme XY :

$$dH = d(U - XY) = dU - YdX - XdY \quad (1.5)$$

ce qui donne:

$$dH = TdS - XdY \quad (1.6)$$

donc, nous avons une fonction avec laquelle on peut étudier des processus à entropie S et variable intensive Y constantes:

$$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S} \right)_Y \quad X = - \left(\frac{\partial H}{\partial Y} \right)_S \quad (1.7)$$

Pour se rendre à l'énergie libre de Helmholtz, on soustrait TS à l'énergie interne:

$$dF = d(U - TS) = -SdT + YdX \quad (1.8)$$

donc:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_X \quad Y = \left(\frac{\partial F}{\partial X} \right)_T \quad (1.9)$$

Pour l'enthalpie libre de Gibbs³, on soustrait TS et XY à l'énergie U :

$$dG = d(U - TS - XY) = -SdT - XdY \quad (1.10)$$

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_Y \quad X = - \left(\frac{\partial G}{\partial Y} \right)_T \quad (1.11)$$

ce qui nous permet d'inspecter des processus à Y et T constants. On peut aussi tisser un lien entre F et G :

$$H = U - YX \quad (1.12)$$

$$F = U - TS \quad (1.13)$$

$$G = H - TS \quad (1.14)$$

donc:

$$G = F - YX \quad (1.15)$$

Dans ce qui va suivre, le champ magnétique externe \mathbf{H} joue le rôle de Y , alors que le champ magnétique résultant dans le matériau supraconducteur, l'induction magnétique \mathbf{B} , est la variable X .

Donc, l'énergie libre de Helmholtz est indiquée pour étudier une situation où la température et l'induction magnétique sont maintenues constantes. L'énergie libre F atteindra donc un

³Aussi connu sous le nom: énergie libre de Gibbs.

minimum à l'équilibre thermodynamique dans cette situation. Ceci peut servir à déterminer ce qui est permis dans un système avec de telles contraintes, et ce qui ne l'est pas. La configuration employant F qui nous intéresse dans notre travail est celle du vortex. Dans notre forme attendue de solution, on fixe le quanta de flux m , ce qui revient à effectivement décider d'avance quel est le champ résultant dans le matériau, c'est-à-dire, le champ magnétique qui réussit à pénétrer dans le matériau supraconducteur.

Nous nous servons de l'énergie libre pour pouvoir comparer des configurations de vortex qui diffèrent de quanta de flux m , mais qui sont identiques dans tous les autres paramètres. Ceci revient à comparer des points distincts statiques dans un espace des configurations. Cette analyse n'est qu'une esquisse d'explication de la préférence du système pour une valeur de m plutôt qu'une autre, mais procure un bon point de départ. Pour avoir une vision complète, il faudrait regarder au niveau de la dynamique des interactions de vortex, ce qui dépasse largement le cadre du présent travail.

L'enthalpie libre de Gibbs, en revanche, va servir dans les situations où la température et le champ magnétique externe sont fixes, par exemple dans le calcul de l'énergie de surface. On calcule celle-ci en considérant une configuration en deux régions (normale et supraconductrice). Le milieu normal est pénétré par un champ magnétique externe fixe. On peut lire une analyse qui établit un lien entre énergie de surface et énergie d'un vortex à grande valeur de m (de façon à ce que la frontière du vortex s'apparente à une interface plane) dans [11]. Cet article montre comment on peut atteindre une conclusion compatible avec le résultat clé (que nous voyons au chapitre 3) de ce présent travail.

b. Ginzburg-Landau

Cette théorie s'inspire fortement des travaux antérieurs de Landau, où les fonctions thermodynamiques usuelles peuvent s'exprimer en puissances d'un paramètre d'ordre; de façon générale:

$$F = F_0 + c_1\eta + c_2\eta^2 + c_3\eta^3 + c_4\eta^4 + \dots \quad (1.16)$$

où η serait un paramètre d'ordre qui caractérise un état de symétrie du système (e.g. alignement de spins dans le ferromagnétisme). Évidemment, pour bien représenter un phénomène en question, il faut imposer certaines conditions. Pour permettre un état d'équilibre ϵ , il faut retrouver les conditions suivantes à ce point:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \eta} \right|_{\eta=\epsilon} = 0 \quad \left. \frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2} \right|_{\eta=\epsilon} > 0 \quad (1.17)$$

Dans ce travail, nous allons également nous limiter à des expansions des paramètres d'ordre jusqu'à la quatrième puissance. De plus, les termes linéaire et cubique doivent disparaître afin qu'une transition de phase continue puisse être décrite. Cependant, il y aura d'autres restrictions qui seront explicitées plus tard (c.f. section 3.1) afin de restreindre l'analyse à une étendue raisonnable.

La théorie GL fait usage d'intuitions: l'état supraconducteur est plus ordonné que l'état normal et on choisit la fonction d'onde ψ comme étant le paramètre d'ordre. Cette fonction d'onde est normalisée de façon à ce que $|\psi|^2$ soit proportionnel au nombre n_s , qui est la densité des électrons supraconducteurs. Écrivons maintenant la densité de l'énergie libre de Helmholtz telle qu'utilisée dans la théorie GL:

$$F_{sH} = F_n - \frac{a}{2}|\psi|^2 + \frac{b}{4}|\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*\mathbf{A}}{c} \right) \psi \right|^2 + \frac{\mathbf{h}^2}{8\pi} \quad (1.18)$$

où sH sont les indices de l'énergie libre du supraconducteur en présence d'un champ magnétique, F_n est l'énergie libre à l'état normal, $\mathbf{h} = \nabla \times \mathbf{A}$ est le champ magnétique qui pénètre dans le

matériau⁴, et les paramètres a et b dépendent de la température. Cette expression est valide près de T_c , c'est-à-dire pour $|T_c - T| \ll 1$.

Il faut noter en passant un détail important qui se retrouve dans cette expression de l'énergie libre. On retrouve un terme qui est proportionnel au gradient de la fonction d'onde ψ , ce qui ne se retrouvait pas dans les équations London. Comme on le sait par la mécanique quantique, le gradient au carré d'une fonction d'onde est proportionnel au terme positif de l'énergie cinétique, donc il s'agit d'un terme qui augmente l'énergie libre. Les équations de surface de London prédisaient une énergie de surface strictement négative, puisqu'elles ne pouvaient compter sur l'apport de ce terme qui aurait possiblement pu renverser le signe de cette énergie.

Comme nous devons adapter cette expression à une transition de phase du second ordre, nous devons adapter nos coefficients a et b . Tout d'abord, les coefficients a et b doivent être choisis tel que F soit minimisé par $\psi = 0$ à la transition et $\psi \neq 0$ sous la température critique. Ensuite, $a(T)$ et $b(T)$ doivent être des fonctions régulières. Ceci est satisfait par:

$$a > 0, \quad b > 0 \quad T < T_c \quad (1.19)$$

$$a = 0 \quad T = T_c \quad (1.20)$$

Aucun terme linéaire dans l'expression de l'énergie libre n'apparaît puisque cela empêcherait d'avoir une valeur nulle pour le paramètre d'ordre, lorsque $T > T_c$. Aussi, les termes cubiques qui ne fournissent pas un scalaire à l'énergie libre ne sont pas permis (i.e. lorsque le paramètre d'ordre est un vecteur).

⁴Nous utilisons \mathbf{h} plutôt que \mathbf{B} ici, pour souligner qu'il s'agit de l'induction magnétique microscopique. Autrement dit, $\mathbf{B} = \langle \mathbf{h} \rangle$.

c. Longueurs caractéristiques

Les longueurs importantes du système sont la longueur de corrélation ξ des électrons supraconducteurs, qui détermine jusqu'à quelle distance les fluctuations du paramètre d'ordre ψ peuvent avoir une influence, et la longueur de pénétration du champ magnétique, qui détermine la grandeur de la région pénétrée par le flux magnétique. On peut écrire ces expressions en termes des quantités provenant de l'équation de base GL (1.18). On a la longueur de cohérence:

$$\xi = \left(\frac{\hbar^2}{m^* a^2} \right)^{1/2} \quad (1.21)$$

Pour la longueur de pénétration λ , il faut d'abord trouver la position du minimum du potentiel (c.f. section 2.1) $\nu^2 = a^2/b$:

$$\lambda = \left(\frac{m^* c^2}{4\pi e^* \nu^2} \right)^{1/2} \quad (1.22)$$

On peut voir un tableau sommaire donnant quelques mesures expérimentales de ces quantités dans l'appendice A.

d. Effet Meissner

Cette propriété distingue les supraconducteurs des matériaux qui sont simplement des conducteurs parfaits. En effet, pour un conducteur parfait, la configuration du système dépend du chemin parcouru dans un diagramme de phase en température T et en champ magnétique externe appliqué H_e . Supposons que le point de départ soit à une température au-delà de T_c et de champ H_e nul et que le point d'arrivée soit à une température inférieure à T_c et champ H_e nul. Le premier chemin est le suivant:

- Réduire la température jusqu'à celle du point d'arrivée sans toucher au champ;

- Augmenter le champ sans toutefois dépasser H_c , à température constante. Ici, les courants de surface induits vont empêcher que le flux magnétique pénètre à l'intérieur du matériau;
- Remettre le champ à une valeur nulle, à température constante.

Dans ce cas, le résultat final est un conducteur parfait et une absence de champ. Par contre, pour le deuxième chemin:

- Augmenter le champ à température constante (qui est supérieure à T_c pour le moment);
- Réduire la température jusqu'à celle du point d'arrivée sans toucher au champ;
- Remettre le champ à une valeur nulle, à température constante.

La différence entre ce chemin et le premier est qu'un champ emprisonné à l'intérieur du matériau va subsister. La dépendance du chemin indique bien sûr un manque de réversibilité thermodynamique dans les transitions entre ces états. C'est précisément sur ce point que les supraconducteurs se distinguent; pour ces derniers, le champ magnétique est expulsé hors du corps du matériau dès que la température tombe en dessous de T_c , c'est-à-dire, à la deuxième étape du deuxième chemin. Autrement dit, il s'agit d'une transition de phase réversible.

1.2 Le modèle $SO(5)$ dans la conjecture

En 1997, Shou-Chen Zhang signe un article [12] dans lequel il propose un modèle dans lequel les phases jusqu'à maintenant disparates (du moins au point de vue théorique) d'anti-ferromagnétisme

(AF)⁵ et de supraconductivité (SC) *d-wave* sont réunies dans une transition de phase gouvernée par une symétrie $SO(5)$. L'inspiration du modèle provient du fait que dans une certaine classe de matériaux supraconducteurs à haute température critique T_c , le diagramme de phase de ceux-ci exhibe une structure riche dans laquelle reviennent souvent ces deux phases. Comme les deux phases peuvent être interprétées en terme de brisure spontanée de symétrie, Zhang propose de les unifier en un paramètre d'ordre qu'il appelle le *superspin*, un vecteur à cinq composantes qui représente le groupe $SO(5)$: deux pour le paramètre d'ordre SC complexe et trois pour celui de l'anti-ferromagnétisme. L'idée est que l'état fondamental du système peut passer par toutes les configurations à l'aide d'une matrice de générateurs d'une algèbre de Lie, un opérateur de rotation en cinq dimensions comme le nom du groupe l'indique.

Un exemple de résolution d'un problème par la symétrie qui a inspiré Zhang est la chromodynamique quantique qui traite le problème de l'interaction forte. La symétrie qui prévaut dans la limite où la masse des quarks tend vers zéro est le groupe $SU(2) \times SU(2)$. Lorsque cette symétrie est légèrement brisée, les quarks acquièrent une petite masse et la quantité normalement invariante du courant axial n'est plus qu'approximativement conservée. Cette idée est reprise dans le modèle $SO(5)$, où un modèle effectif non-linéaire de basse énergie est bâti avec une symétrie exacte $SO(5)$, mais où l'on ajoute le terme de brisure explicite de la symétrie pour rendre compte de l'effet des masses finies.

⁵L'anti-ferromagnétisme peut être représenté par un paramètre d'ordre vectoriel. À l'aide d'un spin de référence dans un réseau, on regarde si la direction des spins des sites voisins sont alternées. Le paramètre d'ordre atteint sa valeur maximale lorsque l'alternance est parfaite.

1.2.1 Buts du modèle

La supraconductivité à haute température demeure un sujet extrêmement compliqué de la physique de la matière condensée. Les théories (modèle de Hubbard ou le modèle $t - J$ avec bande presque à demi-remplie) les plus prometteuses dans la description du phénomène demeurent malheureusement intraitables. Comme il est souvent arrivé dans l'histoire de la physique, une compréhension en terme de la symétrie permet d'accéder à l'hamiltonien effectif du système à partir de la compréhension de la physique en question à haute énergie. La particularité amenée par les supraconducteurs oxydes à haute température T_c est qu'il s'est avéré qu'un autre morceau de physique de basse énergie contribuait à influencer l'état fondamental.

L'obtention de l'hamiltonien de basse énergie ne pouvait se faire avec la méthode habituelle du groupe de renormalisation en raison de la compétition des deux niveaux d'énergie d'ordres forts différents. C'est donc sur la recherche d'une symétrie que Zhang s'est penché pour pouvoir construire son modèle.

1.2.2 Critiques du modèle $SO(5)$

Afin de donner une présentation plus équilibrée du sujet, jetons un coup d'oeil sur les critiques[13, 14] qui ont été provoquées peu de temps après la publication de l'article original sur le modèle $SO(5)$. La remarque la plus sérieuse est reliée à l'incompatibilité des phases thermodynamiques SC et AF puisqu'elles diffèrent d'une symétrie de jauge locale. L'article de Baskaran et Anderson [14] mentionne également qu'il n'existe pas de phase intermédiaire homogène et localement stable entre les phases SC et AF, donc il n'existe pas d'opérateur qui puisse effectuer une déformation continue entre les deux. Les auteurs se rabattent donc à considérer une transition entre les

phases thermodynamiques plus fondamentales (métal pour SC et isolant de Mott pour AF), qu'ils trouvent immédiatement comme inutilisable pour le bien du modèle en raison de la discontinuité dans la fonction du potentiel chimique.

Un autre obstacle au modèle $SO(5)$ est le fait qu'il soit difficile de le vérifier expérimentalement. De nombreuses difficultés techniques sont reliées au contrôle du dopage. En effet, l'obtention d'un dopage exact ne semble pas être une tâche précise et parfaitement reproductible, et encore moins la variation de ce dopage dans un même matériau. La prédiction la plus spectaculaire de ce mémoire dépend fortement d'un contrôle très fin du dopage qui est bien au delà des techniques actuelles. Néanmoins, des effets seraient possiblement observables dans une large gamme de valeurs différentes de dopage. Un autre détail à ne pas perdre de vue est que la théorie GL est une théorie de champs moyens qui ne s'occupe pas des fluctuations des paramètres d'ordre au point de transition.

1.2.3 Aperçu du modèle $SO(5)$ projeté

Durant les deux années qui suivaient la publication des objections techniques au modèle $SO(5)$ mentionnées dans la section précédente, apparaissait une panoplie d'articles poussant celui-ci dans une application plus large (implémentation exacte microscopique, vérification numérique dans le modèle $t-J$). Le cas particulier qui jetait une ombre à cette lancée était le comportement d'isolant de Mott à bande à moitié remplie. Zhang [15, 16] réussit à contourner l'objection en restreignant son modèle original en posant une relation de commutation entre deux des générateurs du groupe. Toutefois, cette modification vers le *groupe $SO(5)$ projeté* ne change rien aux propriétés statiques du modèle, ce qui nous permet de nous en tenir avec la théorie originale.

1.3 Grandes lignes de ce mémoire

Ce travail débutera d'abord par une révision détaillée des solutions de type vortex Abrikosov de la supraconductivité conventionnelle (qui est analogue à l'apparition des vortex dans le modèle abélien de Higgs [17], qui se situe plus du côté de la physique théorique des particules que de la physique de l'état solide). La symétrie brisée est celle du champ électromagnétique et peut être décrite en terme du groupe de rotation $SO(2)$.

Le travail débutera d'abord par une présentation des solutions du système GL d'équations différentielles et de leur expression numérique. Ce chapitre mettra en vedette un critère très établi dans tous les ouvrages de supraconductivité, soit celui qui distingue les types I et II. Comme on l'a vu dans la section 1.1.1, le comportement du supraconducteur vis-à-vis un champ magnétique externe est ce qui détermine son type (type I: pénétration totale ou rien; type II: réseau de vortex pour $H_{c1} < H < H_{c2}$). Or, la présentation usuelle du critère se base sur le paramètre κ et du lien direct entre celui-ci et l'énergie de surface. Dans ce mémoire, une autre façon de discriminer⁶ entre les deux types sera présentée, soit par l'expression numérique de l'énergie libre du vortex et son comportement avec le quanta de flux magnétique m . En effet, un lien direct se dresse entre la pente de l'énergie libre par quanta $\mathcal{F}_m \equiv F(m)/m$ (négative, nulle ou positive) et la valeur de κ ($\kappa < 1/\sqrt{2}$, $\kappa = 1/\sqrt{2}$ ou $\kappa > 1/\sqrt{2}$). Tout ceci sera discuté en détail dans la section 2.7.2.

Fort de l'inspiration inculquée par le modèle $SO(5)$, l'objectif principal de ce mémoire est de revisiter les solutions de vortex dans un modèle Ginzburg-Landau étendu où est ajoutée la contribution du paramètre d'ordre anti-ferromagnétique. Nous verrons d'abord les conditions d'apparition d'un noyau anti-ferromagnétique. Le paramètre du modèle relié au dopage, β , doit être suffisamment grand pour que ce noyau devienne non-nul. Deux méthodes fort différentes

⁶Cette méthode est implicitement utilisée dans le travail de Bogomol'nyi [18].

seront présentées. En premier, une méthode variationnelle qui emploie une forme limite (à la valeur recherchée de β_c où commence à apparaître le noyau) de l'équation différentielle pour le paramètre d'ordre AF, forme qui s'apparente à une équation de Schrödinger en coordonnées cylindriques. La solution de cette équation de Schrödinger est tout simplement 0, et le principe variationnel teste la stabilité de ce choix de solution. Cette méthode emploie des formes estimées des solutions et ne requiert aucun calcul laborieux et lent. Bien sûr, les réponses données possèdent une certaine distance par rapport aux vraies valeurs étant donné la nature intrinsèque de ce genre de calcul variationnel.

La deuxième méthode passe par la résolution numérique directe du système d'équations différentielles, en vérifiant si les solutions obtenues présentent un noyau non-nul. Par la force brute, l'espace des paramètres κ et β est balayé afin de trouver une limite entre la zone avec noyau non-nul et la zone qui en est dépourvue. Ceci est naturellement beaucoup plus long, mais aussi plus exact.

Ensuite, toujours dans le cadre du modèle $SO(5)$, nous étudierons à nouveau la fonction \mathcal{F}_m , pour constater la présence d'une prédiction dramatique qui demande une révision du critère qui distingue les types de supraconducteurs (I ou II). En effet, la présence du noyau, lorsqu'elle est assez forte, change le comportement de \mathcal{F}_m de façon à diminuer la valeur de sa pente, voire même la renverser (pour une valeur dite β_0) dans le cas des supraconducteurs naïvement de type II (qui auraient une pente positive autrement). Étant donné le lien entre l'aspect de cette fonction et le comportement magnétique du supraconducteur, on est forcé de ne plus se contenter du paramètre κ pour discriminer le type I du type II. En toute fin, nous verrons une discussion sur le lien avec l'expérience de cette prédiction du modèle.

CHAPITRE 2

Modèle $SO(2)$ de la SC conventionnelle

2.1 Énergie libre

L'objectif de ce chapitre est de poser la nomenclature, les équations et quelques points d'études des solitons en forme de vortex pour le modèle plus simple $SO(2)$. Nous dérivons d'abord les équations Ginzburg-Landau pour ensuite étudier les solutions numériques qui en découlent.

Introduisons l'énergie libre de Helmholtz de la théorie GL:

$$\hat{F} = \int d\mathbf{x} \left\{ f_n + \frac{\mathbf{h}^2}{8\pi} + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar\nabla - \frac{e^*\mathbf{A}}{c} \right) \phi \right|^2 + V(|\phi|^2) \right\} \quad (2.1)$$

où $\mathbf{h} = \nabla \times \mathbf{A}$, ϕ est le paramètre d'ordre supraconducteur dont la norme est proportionnelle à la densité n_s des électrons supraconducteurs et où f_n est une constante représentant la densité d'énergie libre lorsque le matériau est dans la phase normale. Nous nous intéressons seulement aux équations indépendantes du temps. Nous avons également le paramètre de charge électrique de la théorie de Ginzburg-Landau qui satisfait l'égalité $e^* = 2e$ (cf. section 1.1.b.).

Le potentiel $V(|\phi|^2)$ dépend du module $|\phi|^2 = \phi\phi^*$:

$$V(|\phi|^2) = -\frac{a^2}{2}|\phi|^2 + \frac{b}{4}|\phi|^4 \quad (2.2)$$

Le minimum du potentiel a la valeur $|\phi|^2 = a^2/b \equiv \nu^2$, qui se voit facilement en minimisant l'expression du potentiel. C'est la valeur que prend ce champ lorsqu'on regarde une région *pleinement* supraconductrice, e.g. loin d'un vortex. Il y a une analogie à faire avec les *valeurs moyennes dans le vide* de la physique des particules.

2.2 Équations du mouvement

On trouve l'équation du mouvement pour ϕ en effectuant un calcul variationnel de la densité d'énergie libre $\hat{\mathcal{F}}$:

$$\partial_i \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial (\partial_i \phi^*)} \right) = \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial \phi^*} \quad (2.3)$$

qui nous donne:

$$-a^2 \phi + b \phi |\phi|^2 + \frac{1}{2m^*} \left(i\hbar \nabla + \frac{e^* \mathbf{A}}{c} \right)^2 \phi = 0 \quad (2.4)$$

De même pour l'équation pour A_i :

$$\partial_j \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial (\partial_j A_i)} \right) = \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial A_i} \quad (2.5)$$

Résultat:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{\hbar e^*}{2im^*c} (\phi^* (\nabla \phi) - \phi (\nabla \phi)^*) - \frac{e^{*2}}{m^*c^2} \phi^* \phi \mathbf{A} \quad (2.6)$$

2.3 Ansätze du vortex

Il est possible de donner un argument topologique très puissant pour montrer l'existence de solutions du type vortex. Si l'on étudie les configurations d'énergie finie, il est nécessaire que la magnitude de $\phi \rightarrow \nu$ à $x \rightarrow \infty$ (sinon, tel que l'équation (2.2) le montre, l'énergie potentielle

diverge). Bien que la norme de ϕ soit fixée à cet endroit, la phase n'est pas soumise à cette contrainte.

Lorsqu'on décrit un cercle à $x \rightarrow \infty$, la phase peut varier, à condition que la valeur de ϕ soit continue. Donc, la phase peut changer par un multiple entier m de 2π ; cet entier est le nombre d'enroulement. On peut se convaincre que l'évolution dans le temps des champs (un processus continu) ne peut changer le nombre d'enroulement; on dit alors que le système possède une *loi de conservation topologique*. Le vortex est la solution non-triviale de $m = 1$; on peut également considérer des solutions avec un m quelconque.

Pour des raisons topologiques, le paramètre d'ordre doit tomber à 0 au centre du vortex afin de préserver la continuité de la fonction qui le décrit. Les équations du mouvement de Ginzburg-Landau obtenues à la sous-section précédente peuvent être utilisées pour plusieurs formes de solitons. Les solutions en forme de vortex, mur de domaines et autres sont des objets très connus en supraconductivité. Également, beaucoup de gens se sont penchés sur la diffusion des vortex afin d'étudier leur interaction.

Nous décrirons le vortex à l'aide de deux coordonnées cylindriques (r et θ), la coordonnée parallèle au sens de pénétration du flux magnétique n'étant pas intéressante puisqu'elle ne dévoile pas les changements de phase du système. Voici donc les ansätze:

$$\phi = \nu f(r) e^{im\theta} \quad (2.7)$$

$$A_i = \frac{\epsilon_{ij} r_j}{e^* r} g(r) \quad (2.8)$$

où $f(r)$, $g(r)$ sont des fonctions scalaires sans dimensions et r_i est la composante cartésienne i de r ($i = 1, 2$ avec $r_1 = x$ et $r_2 = y$, par exemple). Le nombre d'enroulement m apparaît dans l'exposant et ϵ_{ij} est simplement un tenseur anti-symétrique à deux dimensions. La constante ν dans l'équation (2.7) est un coefficient qui choisit la position du minimum du potentiel comme

unité radiale pour l'expression $\nu f(r)$.

En insérant ces solutions dans les équations (2.4) et (2.6), on obtient le système suivant:

$$\frac{\hbar^2}{m^*} \left[f'' + \frac{f'}{r} - f \left(\frac{m}{r} + \frac{g}{\hbar c} \right)^2 \right] + a^2 f - b\nu^2 f^3 = 0 \quad (2.9)$$

$$g'' + \frac{g'}{r} - \frac{g}{r^2} - \frac{4\pi e^2 \hbar^2 \nu^2 f^2}{m^* c} \left(\frac{m}{r} + \frac{g}{\hbar c} \right) = 0 \quad (2.10)$$

Il faut bien faire attention de ne pas confondre la masse des porteurs de charge m^* et le nombre d'enroulement m . Aussi, les fonctions f et g dépendent de r .

2.4 Changement de variables sans dimension

Une grande simplification de l'écriture peut être atteinte en changeant l'échelle de certaines unités. Par exemple, il est utile de redéfinir l'unité de distance comme la longueur caractéristique du potentiel vecteur:

$$r \rightarrow \lambda s \quad (2.11)$$

L'équation 2.9 devient:

$$\frac{\hbar^2}{\lambda^2 m^*} \left[f'' + \frac{f'}{s} - f \left(\frac{m}{s} + \frac{\lambda g}{\hbar c} \right)^2 \right] + a^2 f - b\nu^2 f^3 = 0 \quad (2.12)$$

On divise cette équation par a^2 :

$$\left(\frac{\hbar^2}{a^2 m^*} \right) \left(\frac{1}{\lambda^2} \right) \left[f'' + \frac{f'}{s} - f \left(\frac{m}{s} + \frac{\lambda g}{\hbar c} \right)^2 \right] + f - \frac{b\nu^2 f^3}{a^2} = 0 \quad (2.13)$$

Or, (\hbar^2/m^*a^2) est précisément ξ^2 et $a^2 = b\nu^2$, donc:

$$\frac{1}{\kappa^2} \left[f'' + \frac{f'}{s} - f \left(\frac{m}{s} + \frac{\lambda g}{\hbar c} \right)^2 \right] + f - f^3 = 0 \quad (2.14)$$

Un autre changement de variable s'impose pour simplifier davantage l'équation afin de ne laisser comme paramètre libre que celui de la théorie GL, κ :

$$g \rightarrow ac\sqrt{m^*}A(s) \quad (2.15)$$

qui donne:

$$\frac{1}{\kappa^2} \left[f'' + \frac{f'}{s} - f \left(\frac{m}{s} + \lambda \frac{a\sqrt{m^*}A}{\hbar} \right)^2 \right] + f - f^3 = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{1}{\kappa^2} \left[f'' + \frac{f'}{s} - f \left(\frac{m}{s} + \kappa A \right)^2 \right] + f - f^3 = 0 \quad (2.17)$$

Évidemment, il ne faut pas confondre ce nouveau $A(s)$, fonction scalaire avec unités sans dimension, avec le potentiel vecteur original.

Opérant ces mêmes changements sur l'équation (2.10), nous obtenons comme résultat final:

$$h' + f^2 \left(\frac{m}{\kappa s} + A \right) = 0 \quad (2.18)$$

avec $h'(s) = -A'' - A'/s + A/s^2$.

Les expressions grossières des estimés initiaux des solutions ont été trouvées par essais-erreurs. Le but de cet exercice n'était que de rendre plus rapide la convergence de l'algorithme dans des cas qui présentent un profil des paramètres qui est près de valeurs réalistes. Il est entendu qu'elles ces expressions sont moins utiles lorsqu'on s'éloigne grandement de ces plages.

Les voici:

$$\begin{aligned} f &= \tanh^m \left(\frac{\sqrt{2}\kappa s}{m^{3/2}\log(10\sqrt{2}\kappa)} \right) \\ f' &= \frac{\sqrt{2}\kappa}{m^{3/2}\log(10\sqrt{2}\kappa)} \tanh^{m-1} \left(\frac{\sqrt{2}\kappa s}{m^{3/2}\log(10\sqrt{2}\kappa)} \right) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{\sqrt{2}\kappa s}{m^{3/2}\log(10\sqrt{2}\kappa)} \right) \\ A &= \frac{-ms}{\kappa(s^2 + 1)} \\ A' &= \frac{m(s^2 - 1)}{\kappa(s^2 + 1)^2} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Ces expressions permettent de converger rapidement (de l'ordre de 5 itérations et moins) pour des valeurs de κ telles que $0,001 \leq \kappa \leq 100$ et des petites valeurs de m (≤ 20). Pour obtenir des solutions convergentes pour des valeurs de paramètres en dehors de ces plages sûres, une façon de procéder est de parcourir l'espace des paramètres en plusieurs étapes, avec un point de départ sûr. C'est-à-dire, on introduit comme estimé initial des solutions non pas les expressions (2.19) mais bien des solutions numériques convergentes trouvées antérieurement et qui ont des valeurs de paramètres assez rapprochées. Ceci deviendra encore plus utile dans le traitement du modèle $SO(5)$ en raison de l'ajout d'un paramètre supplémentaire, qui rend la tâche d'estimation plus ardue.

2.5 Conditions frontières (linéarisation)

La Fig. 2-1 montre les estimés (c.f. les équations (2.19)) utilisés dans le programme du vortex dans le modèle $SO(2)$. Les fonctions représentées sont en unités sans dimension. La fonction f représentant le champ supraconducteur atteint rapidement sa valeur nominale. Ce comportement simple aux extrémités nous permet de poser des équations de conditions limites sans problème. Au centre du vortex ($s = 0$), nous avons:

$$\begin{aligned} f &= 0 \\ A &= 0 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Dans la région infiniment loin¹ du vortex ($s \rightarrow \infty$), les fonctions suivent ces comportements:

$$\begin{aligned} f &\approx 1 + \delta(s) & \delta(s) &\leq 0 \\ A &\approx -m/s\kappa + \epsilon(s) & \epsilon(s) &\geq 0 \end{aligned} \tag{2.21}$$

¹L'infini numérique n'est pas simplement représenté par une valeur grande et particulière de s . Il s'agit plutôt d'un point spécial où s'appliquent les conditions des formes asymptotiques; ce point est typiquement $s \sim 30,0$ dans nos programmes.

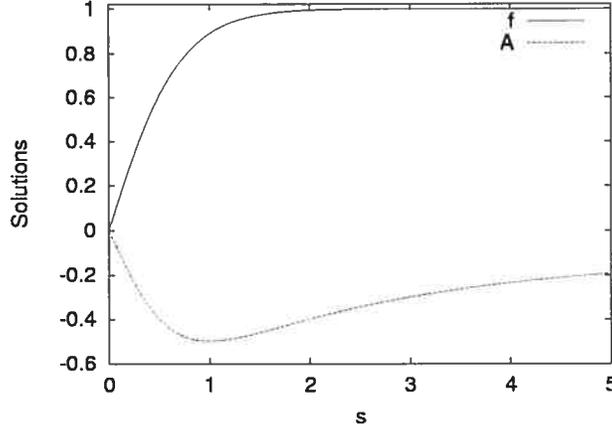


Fig. 2-1: Tracé des estimées initiaux utilisées dans l'algorithme; ici, $\kappa = 1$ et $m = 1$

où il est entendu que δ et ϵ sont des fonctions infinitésimales. En insérant ces formes asymptotiques dans les équations (2.17) et (2.18) et ne gardant que les termes linéaires, nous obtenons:

$$\begin{aligned} \delta'' = 2\kappa^2\delta &\Rightarrow \delta(s) \sim -e^{-\sqrt{2}\kappa s} \\ \epsilon'' = \epsilon &\Rightarrow \epsilon(s) \sim e^{-s} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Donc, en introduisant ces formes dans les rapports δ'/δ et ϵ'/ϵ afin d'établir des liens entre les fonctions f, A et leurs dérivées:

$$\begin{aligned} \frac{\delta'}{\delta} &= \frac{f'}{f-1} = -\sqrt{2}\kappa \\ \frac{\epsilon'}{\epsilon} &= \frac{-m/s^2\kappa + A'}{m/s\kappa + A} = -1 \end{aligned} \quad (2.23)$$

ce qui donne:

$$\begin{aligned} f' + \sqrt{2}\kappa(f-1) &= 0 \\ s^2\kappa(A' + A) + m(s-1) &= 0 \end{aligned} \quad (2.24)$$

2.6 Changement vers une équation différentielle de différence

Plusieurs changements doivent être apportés pour que ces équations puissent être utilisés dans notre programme numérique. Pour comprendre l'enjeu et l'importance de ceux-ci, il faut se référer à l'appendice B. Tout d'abord, les identifications directes:

$$y_1 \equiv f, \quad y_2 \equiv f' \quad y_3 \equiv A \quad y_4 \equiv A' \quad (2.25)$$

Toutes les fonctions et variables indépendantes sont maintenant définies dans un intervalle discret de valeurs, traitables par un ordinateur et parcourues par l'indice k . On définit des quantités utiles pour l'interpolation:

$$t_i \equiv y_i(k) + y_i(k-1) \quad X \equiv s(k) + s(k-1) \quad (2.26)$$

Il faut donc remplacer toute instance de fonction et variable indépendante s comme suit:

$$y_i \rightarrow \frac{t_i}{2} \quad (2.27)$$

$$s \rightarrow \frac{X}{2} \quad (2.28)$$

Pour une dérivée, il faut plutôt s'inspirer de sa définition en terme d'une limite²:

$$y'_i \rightarrow \frac{y_i(k) - y_i(k-1)}{\Delta} \quad (2.29)$$

Δ est une valeur du programme qui pose l'intervalle numérique entre chaque points de la grille. Tel qu'expliqué à l'appendice B, l'équation (2.17) se scinde en deux:

$$y'_1 = y_2 \Rightarrow \frac{y_1(k) - y_1(k-1)}{\Delta} - \frac{t_2}{2} = 0 \quad (2.30)$$

$$\frac{y_2(k) - y_2(k-1)}{\Delta} + \frac{t_2}{X} - \frac{t_1}{2} \left(\frac{2m}{X} + \frac{\kappa t_3}{2} \right)^2 + \frac{\kappa^2 t_1}{2} \left(1 - \frac{t_1^2}{4} \right) = 0 \quad (2.31)$$

²Voir l'appendice B; ceci est acceptable numériquement puisque l'intervalle entre les points est très petit par construction.

L'équation (2.18) devient:

$$y_3' = y_4 \Rightarrow \frac{y_3(k) - y_3(k-1)}{\Delta} - \frac{t_4}{2} = 0 \quad (2.32)$$

$$\frac{y_4(k) - y_4(k-1)}{\Delta} + \frac{t_4}{X} - \frac{2t_3}{X^2} - \frac{t_1^2}{4} \left(\frac{2m}{\kappa X} + \frac{t_3}{2} \right) = 0 \quad (2.33)$$

2.7 Résultats numériques

Dans cette section, nous verrons divers résultats numériques, dont certains qui seront changés par l'ajout du champ anti-ferromagnétique dans le chapitre 3.

2.7.1 Formes des solutions vs. les paramètres

Il est intéressant de jeter un coup d'oeil sur l'influence des paramètres sur les solutions; c'est de cette observation qu'est venue l'inspiration pour écrire nos estimés initiaux grossiers. Comme on peut le voir à la Fig. 2-2, plus κ est grand, plus la longueur de cohérence est petite, ce qui réduit la taille du vortex.

Les Fig. 2-4 et 2-5 montrent les solutions trouvées des deux cas extrêmes des types de supraconducteurs I et II. Le champ magnétique H est représenté ($H(s) = -A'(s) - A(s)/s$) plutôt que la partie radiale $A(s)$ du potentiel vecteur, afin de rejoindre la présentation usuelle du sujet. La densité d'énergie libre F est aussi représentée (c.f. l'équation (2.34)), mais nous allons y revenir dans la prochaine section.

Finalement, le changement du nombre de quanta m de flux magnétique à l'intérieur du

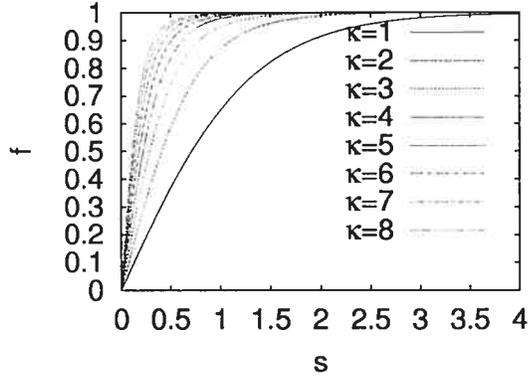


Fig. 2-2: Plus κ augmente, plus la longueur de pénétration λ du champ magnétique domine la longueur de cohérence ξ , ce qui a pour effet de renforcer la présence de la phase SC, ce qui se traduit par un rétrécissement du vortex.

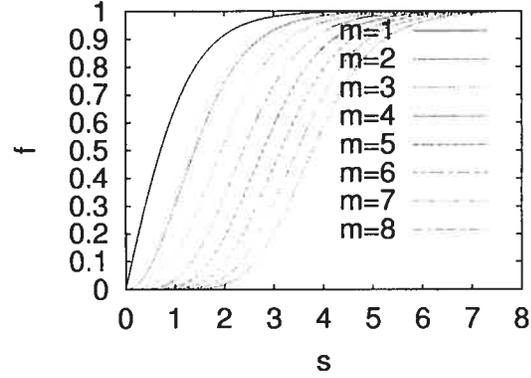


Fig. 2-3: Le nombre d'enroulement m représente le quanta de flux magnétique dans le vortex. Lorsqu'il augmente, le vortex grossit.

vortex influence directement la taille de celui-ci (voir Fig. 2-3). Pour des valeurs très grandes de m , il faut s'assurer que l'intervalle sur lequel le travail numérique s'effectue soit assez grand pour accommoder la forme entière de la fonction f , sinon l'algorithme risque de ne pas converger.

2.7.2 Énergie libre du vortex

En réinjectant des solutions numériques convergentes dans l'équation (2.1), on obtient l'énergie libre des vortex trouvés. Pour convenir aux traitements numériques, cette équation doit devenir discrète avec les changements vus ci-haut (incluant ceux qui posent des unités sans dimension):

$$F = \int_{s=0}^{\infty} ds \frac{s}{2} \left(\left(y_4 + \frac{y_3}{s} \right)^2 + \frac{y_2^2}{\kappa^2} + \frac{y_1^2}{\kappa^2} \left(\frac{m}{s} + \kappa y_3 \right)^2 - y_1^2 + \frac{y_1^4}{2} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.34)$$

Il faut noter qu'ici, les variables en jeu ne sont pas interpolées entre deux points puisque nous utilisons une intégration numérique la plus simple qui soit: somme de trapèzes. Il est possible

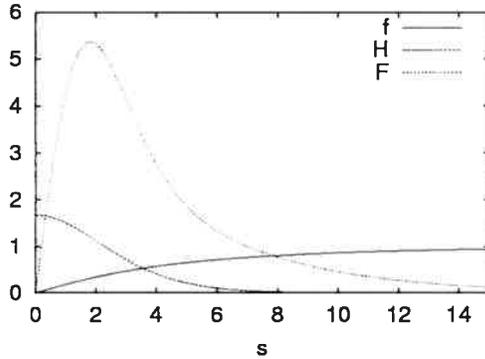


Fig. 2-4: Type I avec $\kappa \ll 1/\sqrt{2}$

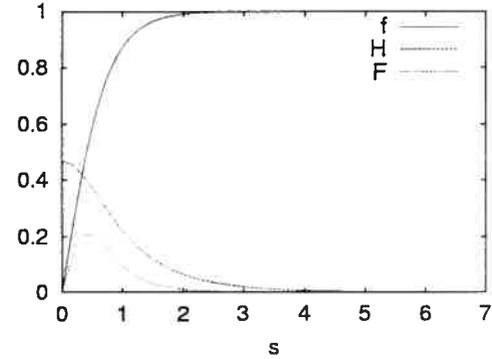


Fig. 2-5: Type II avec $\kappa \gg 1/\sqrt{2}$

d'utiliser des techniques plus sophistiquées, mais ce détail est secondaire.

Tel que discuté dans l'introduction, une quantité intéressante à étudier est l'énergie libre sur m en fonction de m , \mathcal{F}_m . Le comportement de cette fonction va de pair avec le comportement magnétique du supraconducteur; en d'autres termes, son type (I ou II) en question. Pour le type I, cette fonction sera strictement décroissante (e.g. Fig. 2-6.a), indiquant que l'énergie libre d'un vortex à nombre d'enroulement de 2, par exemple, sera moins grande que le double de l'énergie libre du vortex de base (pour lequel $m = 1$). Le système en équilibre thermodynamique tendra à aller vers la configuration qui minimise l'énergie, c'est-à-dire qu'il tendra à préférer $m \rightarrow \infty$ dans cet exemple. Ceci pourquoi l'effet Meissner dans les supraconducteurs de type I est complet et ne manifeste pas de réseau de vortex. On peut interpréter cette situation comme si le système tentait de former un vortex de nombre d'enroulement maximal, jusqu'à ce que toute la région soit pénétrée par le champ magnétique.

En revanche, pour les types II, le graphe de \mathcal{F}_m vs. m (e.g. Fig. 2-6.b) est strictement croissant, ce qui se traduit par l'apparition d'un réseau de vortex avec $m = 1$. Par continuité, il existe bien sûr une valeur de κ pour laquelle la fonction \mathcal{F}_m a une pente nulle (voir Fig. 2-6.c); il n'est pas surprenant de constater que cette valeur est précisément la valeur critique entre les

deux types, soit $\kappa = 1/\sqrt{2}$.

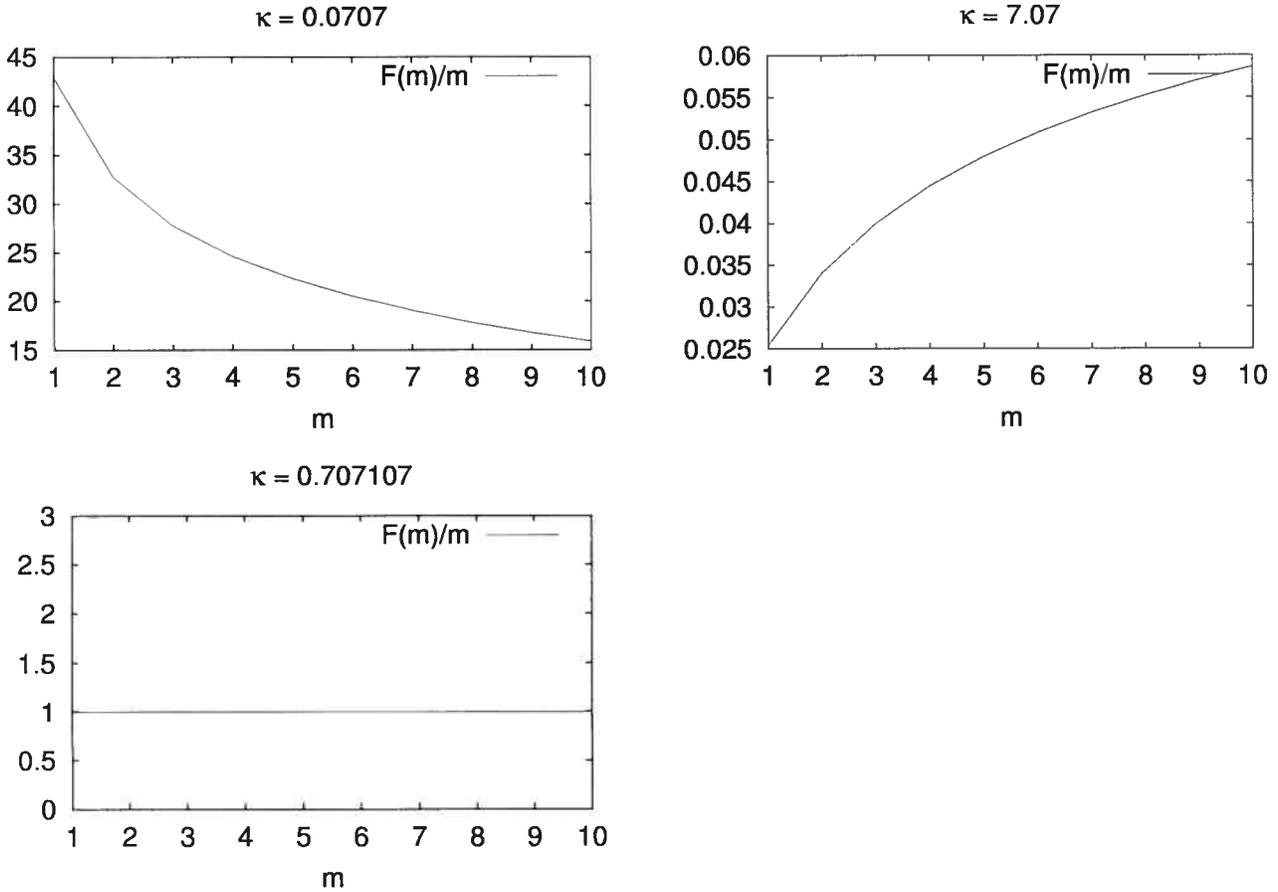


Fig. 2-6: Comportement de la fonction \mathcal{F}_m . La croissance ou décroissance semble directement reliée à la valeur de κ . a) $\kappa = 0.0707$ b) $\kappa = 7.07$ c) $\kappa = \kappa_c = 1/\sqrt{2}$

CHAPITRE 3

Modèle SO(5)

Dans ce chapitre, nous verrons maintenant les effets de l'ajout du champ anti-ferromagnétique dans l'énergie libre de Helmholtz. Les premières sections suivront strictement la démarche du chapitre précédent, avec les ajouts nécessaires. Nous allons d'abord examiner les solutions numériques de vortex où apparaissent des noyaux anti-ferromagnétiques et déterminer dans quelle plage des paramètres elles se situent. Ensuite, nous verrons l'influence d'un paramètre (β , relié au dopage¹) sur le comportement magnétique du supraconducteur à travers le graphe de l'énergie libre divisée par le nombre d'enroulement, en fonction de ce dernier (\mathcal{F}_m).

3.1 Énergie libre

L'énergie libre dans le modèle GL possède une forme similaire à celle du chapitre précédent:

$$\hat{F} = \int d\mathbf{x} \left\{ f_n + \frac{\mathbf{h}^2}{8\pi} + \frac{\hbar^2}{2m^*} |\nabla \mathbf{n}|^2 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar \nabla - \frac{e^* \mathbf{A}}{c} \right) \phi \right|^2 + V(|\phi|^2, \mathbf{n}) \right\} \quad (3.1)$$

¹En termes de quantités bien connues dans la physique du solide, $\beta = 1 - 8m^* \xi(T)^2 \chi(\mu_c^2 - \mu^2)/\hbar^2$. χ est la susceptibilité de charge et μ_c est la valeur critique du potentiel chimique [19].

La différence se retrouve dans l'apparition d'un nouveau paramètre d'ordre \mathbf{n} (vectoriel) représentant l'antiferromagnétisme et de nouveaux termes dans le potentiel, où de nombreux nouveaux paramètres apparaissent:

$$V(|\phi|, \mathbf{n}) = -\frac{a_1^2}{2}|\phi|^2 - \frac{a_2^2}{2}\mathbf{n}^2 + \frac{\lambda_1}{4}|\phi|^4 + \frac{\lambda_2}{4}\mathbf{n}^4 + \frac{\lambda_3}{2}|\phi|^2\mathbf{n}^2 \quad (3.2)$$

où $a_1, a_2, \lambda_1, \lambda_2$ jouent les mêmes rôles pour leurs champs respectifs que dans le chapitre précédent. Quant à λ_3 , il représente l'importance de l'interaction entre eux. Le paramètre d'ordre anti-ferromagnétique prend sa valeur maximale lorsque le système prend la configuration de spins suivante: d'un site repère avec un spin donné, il y a alternance de spins opposés entre tous les voisins du système. Avec le potentiel (3.2), il est possible de se définir un minimum absolu

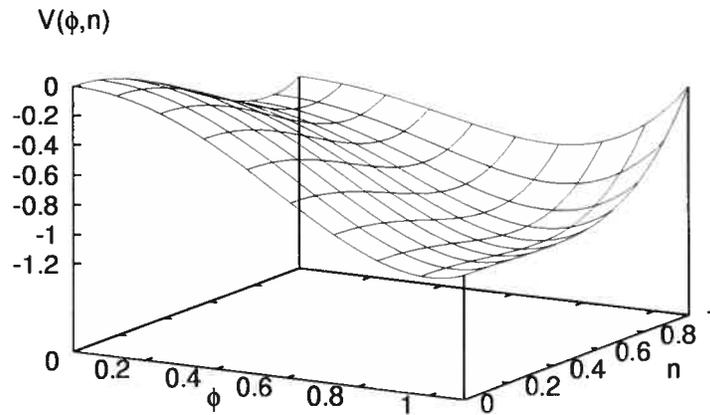


Fig. 3-1: Un potentiel avec un minimum absolu dans la phase SC

qui assure que le système soit dans la phase anti-ferromagnétique (AF). Bien qu'il soit possible d'obtenir une solution GL quelconque dans cette phase, cela dépasse le cadre de ce mémoire².

²C'est-à-dire que la valeur moyenne du vide du champ η serait non-nulle et une solution non-triviale quelconque pour ϕ pourrait exister.

Pour s'assurer d'avoir un minimum absolu (voir Fig. 3-1), on demande que le potentiel soit borné par le bas, ce qui est assuré par $\lambda_{1,2} > 0$ et $\lambda_3 > -\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}$. Ensuite, on définit les positions des minima sur les axes des champs:

$$\left. \frac{\partial V}{\partial \phi^*} \right|_{n=0} = -\frac{a_1^2}{2} \phi + \frac{\lambda_1}{2} \phi^3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \nu_\phi \equiv \frac{a_1}{\sqrt{\lambda_1}} \quad (3.3)$$

$$\left. \frac{\partial V}{\partial n} \right|_{\phi=0} = -a_2^2 n + \lambda_2 n^3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \nu_n \equiv \frac{a_2}{\sqrt{\lambda_2}} \quad (3.4)$$

La condition de phase SC (autrement dit, que le minimum absolu se trouve sur l'axe de ϕ) devient:

$$V(\nu_\phi, 0) < V(0, \nu_n) \quad (3.5)$$

$$\frac{a_1^4}{\lambda_1} > \frac{a_2^4}{\lambda_2} \quad (3.6)$$

Pour s'assurer que le minimum absolu ne se retrouve pas hors de l'axe pour ϕ , on ajoute la condition suivante à la position du minimum absolu:

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial n^2} V(\phi, n) \right|_{(\phi, n)=(\nu_\phi, 0)} = -a_2^2 + a_1^2 \frac{\lambda_3}{\lambda_1} > 0 \quad (3.7)$$

$$\Rightarrow \frac{\lambda_3}{\lambda_1} > \frac{a_2^2}{a_1^2} \quad (3.8)$$

3.2 Équations du mouvement

Équation du mouvement pour ϕ :

$$-a_1^2 \phi + \lambda_1 \phi |\phi|^2 + \lambda_3 n^2 |\phi| + \frac{1}{2m^*} \left(i\hbar \nabla + \frac{e^* \mathbf{A}}{c} \right)^2 \phi = 0 \quad (3.9)$$

Équation du mouvement pour A :

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{\hbar e^*}{2im^*c} (\phi^* (\nabla \phi) - \phi (\nabla \phi)^*) - \frac{e^{*2}}{m^*c^2} \phi^* \phi \mathbf{A} \quad (3.10)$$

Équation du mouvement pour \mathbf{n} :

$$\frac{\hbar^2}{m^*} \partial_i (\partial_i \mathbf{n}) = -a_2^2 \mathbf{n} + \lambda_2 n^2 \mathbf{n} + \lambda_3 |\phi|^2 \mathbf{n} \quad (3.11)$$

3.3 Ansätze du vortex

On ajoute aux solutions celle du champ AF:

$$\phi = \nu f(r) e^{im\theta} \quad (3.12)$$

$$A_i = \frac{\epsilon_{ij} r_j}{e^* r} g(r) \quad (3.13)$$

$$\mathbf{n} = n(r) \hat{n}_0 \quad (3.14)$$

où \hat{n}_0 est un vecteur unitaire pointant dans la direction du spin de référence et où $\nu = \nu_\phi$. Comme dans le chapitre précédent, on introduit ces solutions dans les équations du mouvement, pour obtenir:

$$\frac{\hbar^2}{m^*} \left[f'' + \frac{f'}{r} - f \left(\frac{m}{r} + \frac{g}{\hbar c} \right)^2 \right] + a_1^2 f - b_1 \nu^2 f^3 - \frac{b_3}{2} n^2 f = 0 \quad (3.15)$$

$$g'' + \frac{g'}{r} - \frac{g}{r^2} - \frac{4\pi e^2 \hbar^2 \nu^2 f^2}{m^* c} \left(\frac{m}{r} + \frac{g}{\hbar c} \right) = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\hbar^2}{m^*} \left(n'' + \frac{n'}{r} \right) + a_2^2 n - b_2 n^3 - b_3 \nu^2 f^2 n = 0 \quad (3.17)$$

3.4 Changement de variables sans dimension

On procède toujours avec la même démarche que le chapitre précédent, mais avec un changement de variable supplémentaire:

$$r \rightarrow \lambda s \quad (3.18)$$

$$g(r) \rightarrow a_1 c \sqrt{m^*} A(s) \quad (3.19)$$

$$n(r) \rightarrow \nu \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_2}} \eta(s) \quad (3.20)$$

À ce stade-ci, il est utile de réorganiser les 5 paramètres des équations de manière plus compacte:

$$\alpha = \frac{\lambda_3}{\lambda_1} \quad \delta = \frac{\lambda_3}{\lambda_2} \quad \beta = \frac{a_2^2}{a_1^2} \quad (3.21)$$

Ceci change les conditions (3.6, 3.8) sur le potentiel:

$$\beta^2 < \frac{\alpha}{\delta} \quad (3.22)$$

$$\beta < \alpha \quad (3.23)$$

La forme du potentiel (3.2) nous donne une symétrie $SO(2) \times SO(3)$. C'est seulement en posant une égalité entre a_1, a_2 et entre λ_1, λ_2 et λ_3 (i.e. en posant $\alpha = \delta = 1$ et $\beta = 1$) que nous retombons sur une symétrie $SO(5)$ exacte. Lorsque $\beta \simeq 1$, elle est approximative tandis que pour $0 < \beta < 1$, elle est brisée et l'état fondamental est la phase SC.

Les équations finales, sans dimensions, deviennent:

$$\frac{1}{\kappa^2} \left[f'' + \frac{f'}{s} - f \left(\frac{m}{s} + \kappa A \right)^2 \right] + f(1 - f^2 - \delta \eta^2) = 0 \quad (3.24)$$

$$h' + f^2 \left(\frac{m}{\kappa s} + A \right) = 0 \quad (3.25)$$

$$\frac{1}{\kappa^2} \left(\eta'' + \frac{\eta'}{s} \right) + \eta(\beta - \eta^2 - \alpha f^2) = 0 \quad (3.26)$$

On ajoute aux estimés (2.19), ceux des variables η et η' :

$$\begin{aligned} \eta &= \sqrt{\beta} \operatorname{sech} \left(s \sqrt{1 - \beta} \right) \\ \eta' &= -\sqrt{\beta(1 - \beta)} \tanh \left(s \sqrt{1 - \beta} \right) \operatorname{sech} \left(s \sqrt{1 - \beta} \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

On peut voir un tracé de ces expressions, avec les autres (2.19), dans les Fig. 3-2 et 3-3.

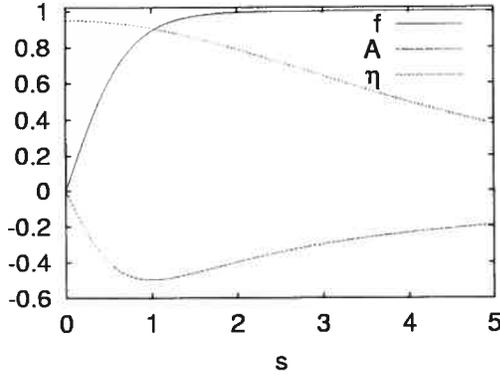


Fig. 3-2: Estimés initiaux avec $\kappa = 1$, $\beta = 0.9$ et $m = 1$

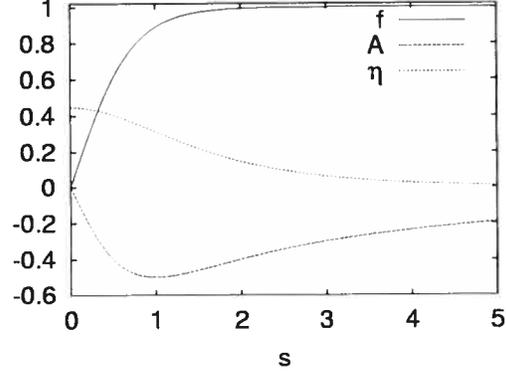


Fig. 3-3: Estimés initiaux avec $\kappa = 1$, $\beta = 0.2$ et $m = 1$

3.5 Conditions frontières (linéarisation)

Pour les fonctions $f(s)$ et $A(s)$, rien n'est changé par rapport au chapitre précédent (voir (2.24)). Quant à $\eta(s)$, on s'attend à ce qu'il prenne la forme d'un noyau atteignant une valeur non-nulle au centre du vortex, et qu'il tombe rapidement lorsqu'on s'en éloigne. Donc, à $s = 0$, par continuité:

$$\eta' = 0 \quad (3.28)$$

et à $s \rightarrow \infty$, $\eta \rightarrow 0$:

En ne gardant que les termes linéaires dans l'équation (3.17) et posant $f = 1$, on obtient:

$$\eta'' = \kappa^2(1 - \beta)\eta \Rightarrow \eta(s) \sim e^{-\kappa\sqrt{1-\beta}s} \quad (3.29)$$

et:

$$\frac{\eta'}{\eta} = -\kappa\sqrt{1-\beta} \quad (3.30)$$

ce qui nous donne:

$$\eta' + \kappa\sqrt{1-\beta}\eta = 0 \quad (3.31)$$

3.6 Changement vers une équation différentielle de différence

On ajoute les variables suivantes:

$$y_5 \equiv \eta, \quad y_6 \equiv \eta' \quad (3.32)$$

Le système final d'équations de différence devient, avec la même notation que dans la section 2.4 et avec $\alpha = \delta = 1$:

$$\frac{y_1(k) - y_1(k-1)}{\Delta} - \frac{t_2}{2} = 0 \quad (3.33)$$

$$\frac{y_2(k) - y_2(k-1)}{\Delta} + \frac{t_2}{X} - \frac{t_1}{2} \left(\frac{2m}{X} + \frac{\kappa t_3}{2} \right)^2 + \frac{\kappa^2 t_1}{2} \left(1 - \frac{t_1^2}{4} - \frac{t_5^2}{4} \right) = 0 \quad (3.34)$$

$$\frac{y_3(k) - y_3(k-1)}{\Delta} - \frac{t_4}{2} = 0 \quad (3.35)$$

$$\frac{y_4(k) - y_4(k-1)}{\Delta} + \frac{t_4}{X} - \frac{2t_3}{X^2} - \frac{t_1^2}{4} \left(\frac{2m}{\kappa X} + \frac{t_3}{2} \right) = 0 \quad (3.36)$$

$$\frac{y_5(k) - y_5(k-1)}{\Delta} - \frac{t_6}{2} = 0 \quad (3.37)$$

$$\frac{y_6(k) - y_6(k-1)}{\Delta} + \frac{t_6}{X} + \frac{\kappa^2 t_5}{2} \left(\beta - \frac{t_1^2}{4} - \frac{t_5^2}{4} \right) \quad (3.38)$$

3.7 Résultats numériques

Un point important à mentionner quant aux solutions est que β doit prendre une certaine valeur minimale critique (appelons-la β_c) pour que le noyau AF apparaisse. La Fig. 3-6 représente les courbes limitrophes de la phase SC, soient $\beta = \alpha$ et $\beta = \sqrt{\alpha/\delta}$. La courbe en croix + (calculée numériquement) sépare la région où apparaît un noyau AF (entre la courbe en croix et les courbes limitrophes) de celle où il est absent (sous la courbe en croix). Dans ce graphe, δ est fixé à 1 mais il serait possible de construire des graphes ayant d'autres valeurs; l'apparence générale ne

serait pas changée à un facteur d'échelle près et les courbes limitrophes se croiseraient à $\alpha = 1/\delta$ plutôt qu'à $\alpha = 1$.

Puisque nous fixerons $\alpha = \delta = 1$ pour la suite, cela reviendra à étudier le segment de l'espace des paramètres (α, β) situé à $\alpha = 1$ et avec $0 < \beta < 1$. Il ne faut pas perdre de vue que si $\beta = 0$, on retombe sur le modèle $SO(2)$, en ce qui concerne le type de solution que nous considérons³. D'autres paramètres peuvent influencer la valeur de β_c dans ce segment; le nombre d'enroulement m et le paramètre GL κ . Tel que vu au chapitre précédent, m est proportionnel à la taille du vortex. Intuitivement, on peut deviner que si on augmente m , la valeur de β_c sera plus petite (qui peut se traduire par l'importance du champ η par rapport au champ ϕ , qui devient moins prononcée) en raison du vortex plus grand qui facilite la présence du noyau AF. Nous allons maintenant voir deux méthodes pour l'obtention des courbes $\beta(m, \kappa)$, une par calcul variationnel et l'autre par résolution brute du système d'équations différentielles.

3.7.1 β_c par calcul variationnel

En étant donné le comportement de la fonction η au voisinage de β_c , il est possible d'exploiter une forme limite de l'équation différentielle pour η qui soit de la même forme qu'une équation

³Le comportement de ϕ est largement déterminé par la topologie: ce champ doit atteindre 0 à l'origine, par exemple. Par contre, le comportement de η ne subit pas la même contrainte. Si $\beta = 0$, il n'y a aucune raison pour η d'être différent de 0 (l'énergie du gradient et l'énergie potentielle sont minimisées par $\eta = 0$), donc, η sera nul! Dans un tel cas, l'équation du mouvement pour ϕ reprend la forme du modèle $SO(2)$. On pourrait cependant imaginer (ceci dépasse le cadre du mémoire) une situation dynamique où la valeur moyenne du champ η est nulle, telle que prévue par les équations différentielles qui traitent le cas statique, mais qui varie dans le temps; e.g. une onde cohérente dans le champ η .

de Schrödinger:

$$\left(-\eta'' - \frac{\eta'}{s}\right)\eta + \kappa^2(f^2 - \beta)\eta = 0 \quad (3.39)$$

qui est analogue à:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad (3.40)$$

mais où la fonction propre de (3.39) est infinitésimale, d'où la présence des termes linéaires exclusivement. La raison pour cela est simple: on veut se placer dans l'espace des paramètres où le noyau AF commence à faire son apparition, donc, la solution $\eta = 0$ est anticipée à cet endroit et les termes non-linéaires d'ordre supérieur sont négligeables.

On pose alors une forme devinée de solution avec un paramètre libre ρ (décrivant ici une largeur caractéristique de la fonction) qui minimisera la fonctionnelle décrite par l'hamiltonien de (3.39) à la valeur clé $\rho = \rho_0$:

$$\eta_\rho \simeq \sqrt{\beta}\text{sech}(s/\rho) \quad (3.41)$$

Il ne reste plus qu'à minimiser la fonctionnelle par rapport à ρ :

$$\langle \hat{H} \rangle (\rho) = \frac{\langle \eta_\rho | \hat{H} | \eta_\rho \rangle (\rho)}{\langle \eta_\rho | \eta_\rho \rangle (\rho)} = \frac{\int s \eta_\rho \{-\nabla^2 + \kappa^2(f^2 - \beta)\} \eta_\rho ds}{\int s \eta_\rho^2 ds} \quad (3.42)$$

Une fois minimisée, on obtient:

$$\langle \hat{H} \rangle (\rho_0) \geq E_0 \quad (3.43)$$

où l'égalité tiendrait si on utilisait la solution analytique de η , ce qui n'est pas le cas. Tout ce que nous pouvons obtenir est une borne supérieure de l'énergie du niveau fondamental. Lorsque la borne supérieure même tombe à 0 (donc, l'énergie fondamentale réelle est égale ou plus petite que 0), nous sommes assurés de se retrouver à l'endroit où notre solution infinitésimale considérée est à la limite de la *stabilité*. Un résultat *instable* de notre fonctionnelle signifie que le noyau AF n'est plus infinitésimal, c'est-à-dire qu'il est pleinement présent. Il y a cependant une différence avec la méthode de calcul variationnel habituelle de la mécanique quantique: dans notre situation, le

potentiel est lui aussi inexact, tel que défini par l'estimé de f vu précédemment:

$$f = \tanh^m \left(\frac{\sqrt{2}\kappa s}{m^{3/2} \log(10\sqrt{2}\kappa)} \right) \quad (3.44)$$

Ceci a pour conséquence que les résultats issus de la méthode variationnelle ne donneront pas une borne supérieure pour $\beta_c(m, \kappa)$ qui soit systématiquement au dessus des valeurs trouvées par la résolution du système d'équations différentielles (que l'on considère comme plus exacte que la méthode variationnelle, qui ne donne qu'une borne). La résolution directe du système d'équations différentielles sera discutée dans la prochaine section.

On peut voir à la Fig. 3-4 la courbe pour β_c lorsque f et η sont toutes deux estimées (3.41 et 3.44). On peut également demander que le potentiel de (3.39) soit le plus *exact* possible, c'est-à-dire que f soit issue des calculs numériques de résolution des équations différentielles. Évidemment, le fait de dépendre de la solution numérique pour f rend complètement inutile la méthode variationnelle puisqu'on se prive du raccourci de calcul qu'elle apporte normalement. On peut voir la différence entre les deux potentiels de l'équation de Schrödinger, estimé et numérique, dans la Fig. 3-5.

3.7.2 β_c par solution des équations différentielles

La dernière section montrait une façon élégante de trouver rapidement une idée de courbe pour $\beta_c(m, \kappa)$; nous allons maintenant examiner les résultats par résolution numérique des équations différentielles, qui sont plus exacts, bien que plus longs. On peut voir les courbes de β_c dans la Fig. 3-7 ainsi qu'une superposition des trois courbes trouvées de β_c avec $m = 1$, dans la Fig. 3-8. On voit clairement dans cette figure que le fait d'utiliser une fonction f issue des solutions numériques établit solidement la relation de borne supérieure. En comparant attentivement les Fig. 3-3 et 3-7, on remarque que la première figure montre la présence d'un noyau AF dans

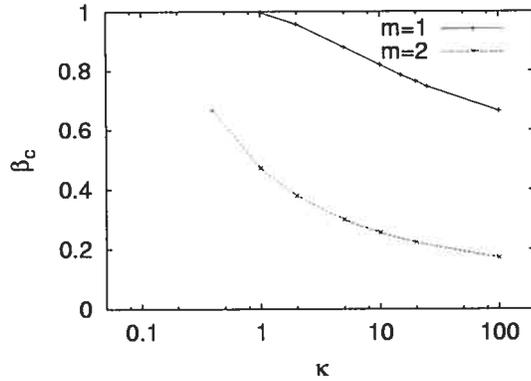


Fig. 3-4: Courbes de β_c obtenues par calcul variationnel.

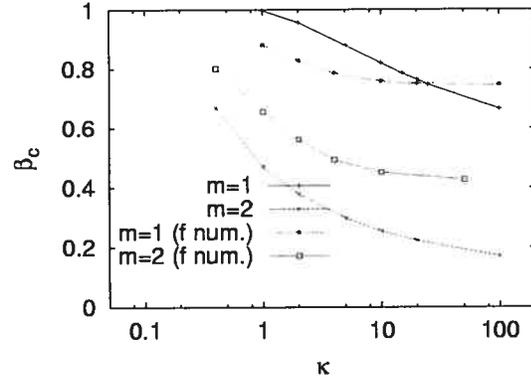


Fig. 3-5: Aux courbes de la Fig. 3-4 représentées ici, sont ajoutées les courbes obtenues par calcul variationnel en prenant les solutions numériques de f (courbes f num.).

l'estimé initial alors que $\beta = 0.2$, ce qui est bien en dessous de β_c si l'on observe la courbe $\beta(\kappa)$ pour $m = 1$ dans la deuxième figure. Il est tout simplement trop difficile d'écrire un estimé initial qui se comporte convenablement selon les valeurs de β_c , qui ont été trouvées entièrement de façon numérique. Il est parfois inévitable de devoir laisser travailler l'algorithme avec un point de départ initial grossier. Pour défendre cette carence particulière de précision, il suffit de constater que les solutions convergent quand même très rapidement. On peut voir la solution qu'atteint le programme à la Fig. 3-9 et on constate que le noyau AF est absent.

3.7.3 Formes des solutions vs. les paramètres

La seule nouveauté est le comportement du champ η par rapport aux changements de κ et m , que l'on peut voir aux Fig. 3-10 et 3-11, respectivement.

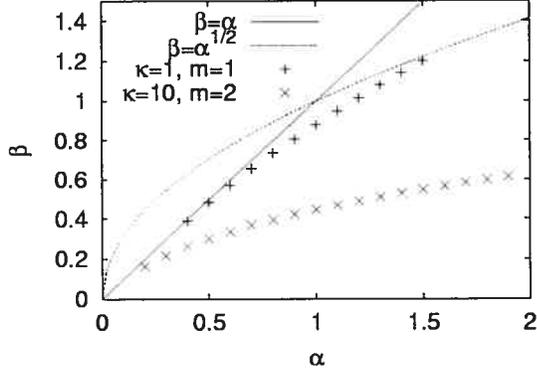


Fig. 3-6: $\delta = 1$. Le noyau AF apparaît pour une valeur de β suffisamment grande. La courbe avec $\kappa = 1$ et $m = 1$ a un petit espace où le noyau AF peut se développer. Si on augmente κ , m , ou les deux, cet espace devient plus grand comme on peut le voir avec la deuxième courbe, où $\kappa = 10$ et $m = 2$

3.7.4 Énergie libre du vortex

L'expression prête pour les traitements numériques est la suivante:

$$\begin{aligned}
 F = \int_{s=0}^{\infty} ds \frac{s}{2} & \left(\left(y_4 + \frac{y_3}{s} \right)^2 + \frac{y_2^2}{\kappa^2} + \frac{y_6^2}{\kappa^2} \right. \\
 & \left. + \frac{y_1^2}{\kappa^2} \left(\frac{m}{s} + \kappa y_3 \right)^2 - y_1^2 - \beta y_5^2 + \frac{y_1^4}{2} + \frac{y_5^4}{2} + y_1^2 y_5^2 + \frac{1}{2} \right) \quad (3.45)
 \end{aligned}$$

Il faut maintenant mentionner une différence claire avec la théorie conventionnelle GL des supraconducteurs. Dans cette théorie, κ est une quantité suffisante pour déterminer le comportement magnétique (type I ou II) du supraconducteur. Or, ce n'est plus le cas dans la théorie $SO(5)$. Les graphes 3-12 montrent la croissance ou décroissance de la fonction \mathcal{F}_m selon des valeurs de κ et β données. On constate d'abord que pour $\beta = 0$, la pente de \mathcal{F}_m croît pour les types I, est

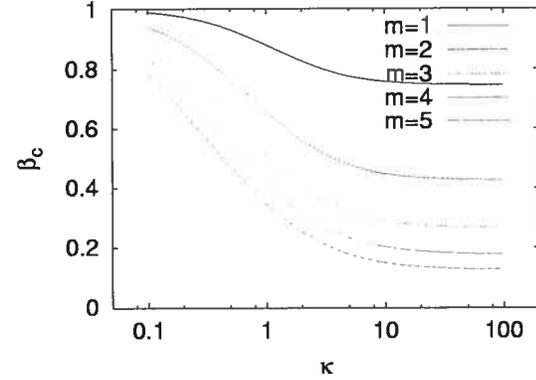


Fig. 3-7: β_c en fonction de κ ; indique à partir de quelle valeur minimale de β un noyau anti-ferromagnétique apparaît dans le vortex. On voit que plus le nombre d'enroulement m est grand, plus cette valeur diminue.

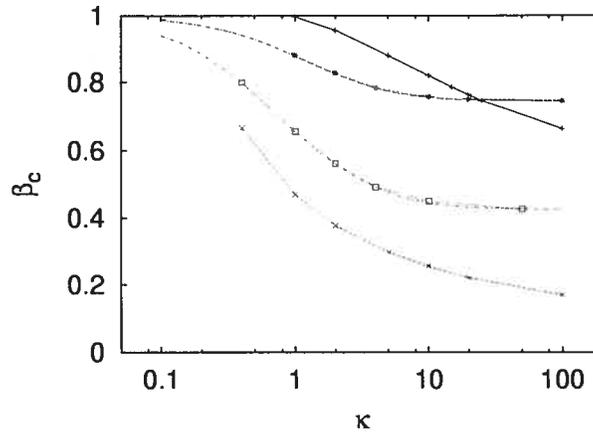


Fig. 3-8: Superposition des trois méthodes de recherche de β_c (voir les Fig. 3-4, 3-5 et 3-7 pour savoir à quelle méthode les courbes correspondent). On voit que la méthode de calcul variationnel avec f trouvé numériquement donne une borne supérieure systématique par rapport aux résultats par résolution du système d'équations différentielles.

nulle pour $\kappa_c = 1/\sqrt{2} \simeq 0.707107$ et décroît pour les types II, exactement comme dans le modèle $SO(2)$. Cette situation perdure tant que la condition suivante est satisfaite: $0 < \beta < \beta_c$, puisque le champ η reste nul pour ces valeurs et ne joue donc aucun rôle dans le modèle.

En revanche, dès que β dépasse sa valeur critique β_c (autrement dit, dès que les noyaux AF apparaissent), \mathcal{F}_m modère son comportement vers le type I. Dans le cas où \mathcal{F}_m subissait une décroissance, cette dernière devient maintenant plus accentuée. Dans le cas où \mathcal{F}_m subissait une croissance, cette dernière devient maintenant moins prononcée jusqu'à devenir nulle pour une certaine valeur β_0 et même négative pour les valeurs $\beta_0 < \beta < 1$. On observe clairement ce renversement de comportement dans les Fig. 3-12.b, c et d.

On peut saisir l'influence du noyau AF pour \mathcal{F}_m en comprenant son rôle au sein du potentiel du modèle $SO(5)$. Voici l'expression du potentiel avec tous les changements de variables

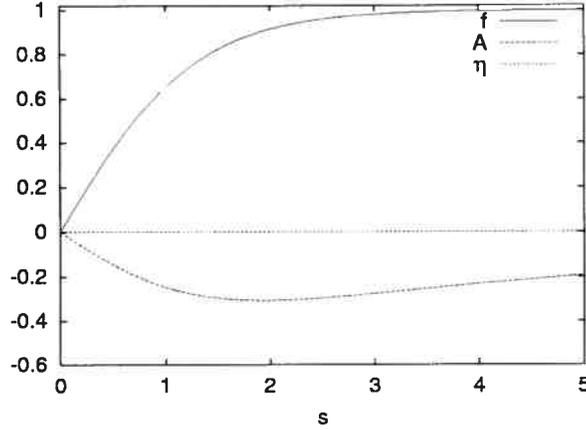


Fig. 3-9: Solutions finales convergentes atteintes par le programme en utilisant les estimés initiaux de la Fig. 3-3. $\kappa = 1$, $\beta = 0,2$ et $m = 1$

mentionnés auparavant:

$$V = -f^2 - \beta\eta^2 + \frac{f^4}{2} + \frac{\eta^4}{2} + f^2\eta^2 \quad (3.46)$$

Tout d'abord, la taille du vortex (qui est essentiellement caractérisée par une valeur nulle du champ f en son sein) est déterminée par le quanta de flux magnétique (m) et influencée par la valeur de κ . Lorsqu'un noyau AF se développe (ce qui est décidé dynamiquement), on voit clairement par l'expression (3.46) que cette présence contribue à diminuer l'énergie potentielle, et donc l'énergie libre. Cette diminution via le potentiel s'effectue dès que le noyau AF apparaît, quel que soit le type (I ou II) de SC. Plus un vortex contenant un noyau AF est large, plus ce dernier pourra avoir de l'influence sur le potentiel par l'entremise de ce noyau AF. C'est ce qui explique que l'influence de η continuera de vaincre la montée de \mathcal{F}_m pour des valeurs grandissantes de m dans les types II.

Ce que nous venons de découvrir est assez remarquable et surprenant. Naïvement on pourrait penser que κ suffit à déterminer le type du supraconducteur. Ce n'est pas le cas, puisque nous venons de voir que β joue un rôle important. Les valeurs de $\beta_0(\kappa)$ peuvent s'obtenir en examinant [11] les champs critiques H_{c1} et H_{c2} , ce qui nous donne l'expression analytique suivante (qu'on

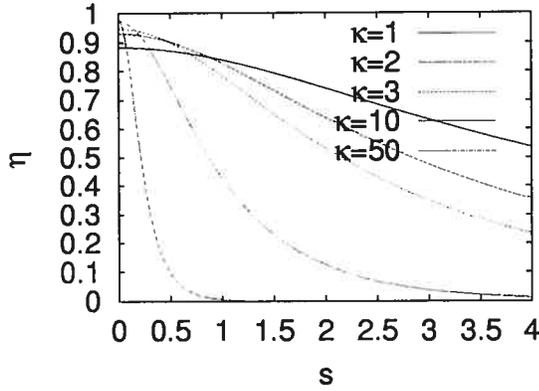


Fig. 3-10: $\beta = 0,99$. Effet de la variation de κ sur la solution η

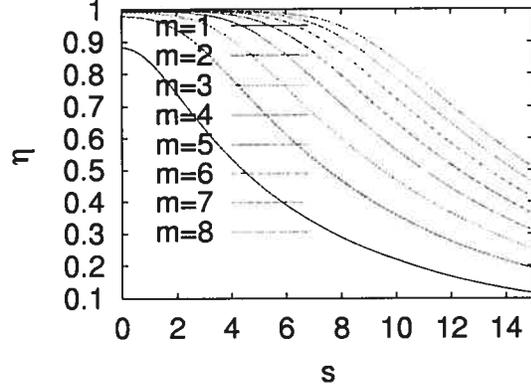


Fig. 3-11: $\beta = 0,99$. Effet du nombre d'enroulement sur la solution η .

β	$\kappa_0(\beta)$ (numérique)	$\kappa_0(\beta)$ (3.47)
0,3945	1	1,07
0,6620	1,5	1,57
0,9410	4	4,06
0,98	7,07	7,04
0,9998	70,7	70,71

Tableau 3-1: Comparaison entre les calculs numériques et la fonction analytique (3.47) pour $\kappa_0(\beta)$

peut inverser pour obtenir $\beta_0(\kappa)$:

$$\kappa_0(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(1 + \beta)/(1 - \beta)} \quad (3.47)$$

Comme on peut le voir au tableau 3-1, la concordance entre cette équation et les résultats numériques est très bonne.

Nous allons maintenant examiner l'importance pratique de notre résultat. Il faut noter que pour un supraconducteur à haute température T_c typique, la valeur de κ est élevée ($\kappa \sim 100$; voir

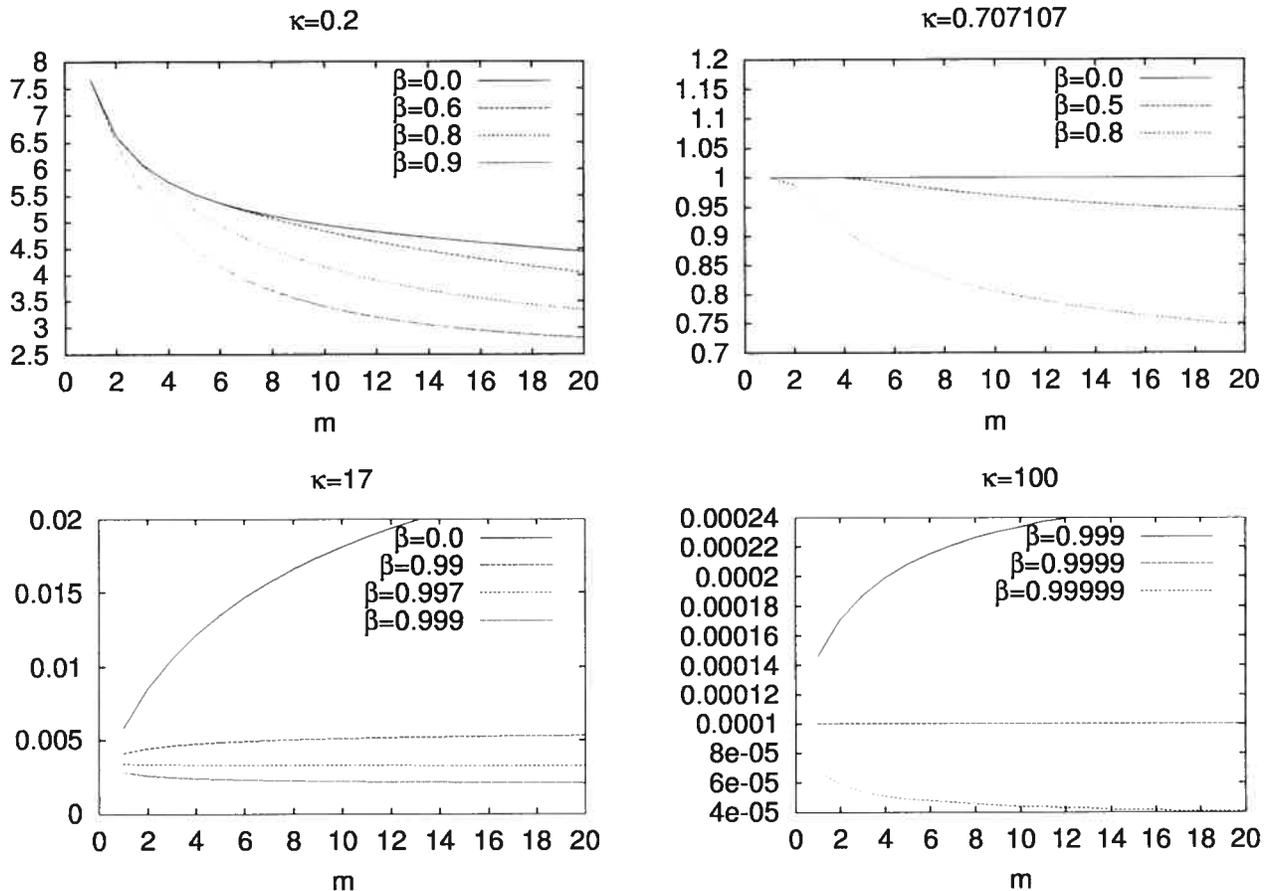


Fig. 3-12: Comportement de la fonction \mathcal{F}_m . Pour des valeurs suffisamment élevées de β , les types II se transforment en types I de la théorie GL classique

appendice A) et donc, il est nécessaire que β soit excessivement près du dopage critique entre les phases SC et AF comme on peut le constater dans la Fig. 3-12.d (e.g. $\beta \sim 0,9999$). Or, ceci est nécessaire que pour observer un renversement de comportement chez les types II. Pour un large intervalle de valeurs $\beta_c < \beta < \beta_0$, un changement quantitatif du caractère de \mathcal{F}_m devrait pouvoir se vérifier expérimentalement. Qui plus est, cet intervalle s'élargit lorsque κ augmente, ce qui nous aide dans notre examen des supraconducteurs à haute température. Donc, tout en augmentant la difficulté d'observer le renversement des types II avec un grand κ , on facilite l'observation

d'une diminution du caractère type II, du moins par hypothèse. En principe, en laboratoire, la rigidité du réseau de vortex chez les types I devrait en être affaiblie, donc, détectable. Une expérience récente [20] penche en ce sens, mais il n'est pas sûr que l'explication en termes du modèle $SO(5)$ soit suffisante, ni même nécessaire. Néanmoins, si le modèle $SO(5)$ en venait à être fortement validé, il faudrait revenir sur la façon dont on classe les supraconducteurs selon leur comportement magnétique. L'influence du dopage et sa proximité à la transition SC-AF a une influence définitive sur ce comportement.

Conclusion

Nous avons débuté ce mémoire en révisant la supraconductivité conventionnelle (brisure spontanée du groupe $U(1)$ représentant l'électromagnétisme) dans son application avec la configuration des vortex qui modélise l'effet Meissner. Nous avons d'abord posé les équations GL en unités bien connues de la physique du solide, pour ensuite réduire le nombre de paramètres libres en posant des unités sans dimensions. Nous avons ensuite examiné le comportement de la fonction $\mathcal{F}_m \equiv F(m)/m$ et son lien étroit avec le paramètre traditionnel GL κ (un autre lien peut être créé avec l'énergie de surface). Il existe donc une correspondance exacte pour ces deux objets dans leur façon de caractériser les types I et II.

Nous avons enchaîné avec une étude similaire, mais plus complexe du modèle $SO(5)$, dans lequel un nouveau paramètre d'ordre représentant l'anti-ferromagnétisme s'ajoute. De ce fait, doivent s'ajouter aux paramètres existants, de nouveaux paramètres qui établissent des valeurs relatives entre les *masses* des champs (pour tisser l'analogie forte avec la physique théorique des particules) et leurs interactions. Comme nous l'avons vu, il est possible de grandement simplifier deux de ces paramètres (α et δ , posés comme égaux à 1) sans changer l'aspect des résultats; seul le nouveau paramètre β , relié au dopage du matériau, est vraiment significatif, au sens où il permet à de nouveaux résultats d'émerger.

Le premier résultat notable amené par la théorie $SO(5)$ dans la modélisation de l'effet Meissner est l'apparition d'un noyau anti-ferromagnétique dans le vortex où pénètre le champ. Nous avons calculé de deux façons les conditions d'apparition de ce noyau: par calcul variationnel et

par résolution brute du système d'équations différentielles. Nous avons constaté que l'apparition du noyau (pour $\beta_c(\kappa, m) < \beta < 1$) est facilitée pour de grandes valeurs de κ (fortement type II) et de grandes valeurs de m .

La principale prédiction de ce travail se manifeste lorsque nous étudions à nouveau la fonction \mathcal{F}_m . Pour $0 < \beta < \beta_c$, le comportement de cette fonction n'est aucunement différent de celui du modèle $SO(2)$. Dans cette plage de valeurs de β , le paramètre GL κ a toujours la même utilité dans sa discrimination entre les types I et II. Or, comme nous avons vu, lorsque β passe à l'intervalle $\beta_c < \beta < \beta_0$, la pente de \mathcal{F}_m diminue pour les deux types de supraconducteur. Les types II, qui ont une fonction \mathcal{F}_m à pente croissante, verront cette dernière devenir nulle pour la valeur clé $\beta = \beta_0$ et devenir négative pour $\beta_0 < \beta < 1$. Pour cette dernière plage, le comportement est renversé, c'est-à-dire que le supraconducteur devient un type I. Nous concluons que ceci constitue une prédiction observable du modèle $SO(5)$, en raison de la diminution de la rigidité du réseau de vortex qu'entraîne la diminution de la pente de \mathcal{F}_m chez les types II.

Une analyse parallèle [11] à la présente discussion (voir aussi [21]), traitant de l'énergie de surface d'une interface SC-Normale, donne des résultats corroborants. Pour tenter de comprendre jusqu'à quel point l'énergie libre régit l'effondrement du réseau de vortex, une voie possible serait d'élargir le travail de Speight [22] au modèle $SO(5)$. Des correspondances entre l'énergie libre et les forces d'interaction des vortex dans l'approximation ponctuelle pourraient possiblement être établies.

Quoiqu'il en soit, il ne faut pas oublier qu'il est difficile, de parcourir l'espace des paramètres aussi facilement dans l'expérience que dans la théorie. Le dopage est une quantité très capricieuse à contrôler, ce qui ne facilite pas la réussite d'observer un renversement du comportement magnétique chez les types II. De plus, l'espace de phase (température, β) n'est pas strictement le même, du moins la forme générale, pour tous les supraconducteurs. Malgré les difficultés de vérification,

le modèle $SO(5)$ demeure une suggestion fort intéressante pour avancer dans la compréhension des supraconducteurs à haute température puisque la théorie BCS est insuffisante.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] H. K. Onnes, *Commun. Phys. Lab.* **12**, 120 (1911)
- [2] W. Meissner, R. Oschenfeld, *Naturwiss.* **21**, 787 (1933)
- [3] C. J. Gorter, H. B. G. Casimir, *Physica* **1**, 306 (1934)
- [4] C. J. Gorter, H. B. G. Casimir, *Phys. Z.* **35**, 963 (1934)
- [5] F. London, H. London, *Proc. Roy. Soc. A* **149**, 71 (1935)
- [6] F. London, H. London, *Physica* **2**, 341 (1935)
- [7] A. A., Abrikosov *Soviet Phys. JETP* **5**, 1174 (1957)
- [8] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity, Second Edition*, McGraw-Hill, New York (1996)
- [9] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957)
- [10] J. G. Bednorz, K. A. Müller, *Z. Phys.* **64**, 189 (1986)
- [11] M. Juneau, R. MacKenzie, M.-A. Vachon, *Annals of Physics*, **298**, 421 (2002)
- [12] S.-C. Zhang, *Science* **275**, 1089 (1997)
- [13] M. Greiter, *Physical Review Letters*, **79**, 4898 (1998)
- [14] P.W. Anderson, G. Baskaran, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **59 N 10-12**, 1780 (1998)

- [15] S.-C. Zhang, J.-P. Hu, E. Arrigoni, W. Hanke and A. Auerbach, *Phys. Rev. B*, **60**, 13070-13084 (1999)
- [16] S.-C. Zhang, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, (1997), **59**, 1774-1779 (1998)
- [17] H. J. de Vega, F. A. Schaposnik, *Physical Review D*, **14**, 1100 (1976)
- [18] E. B. Bogomol'nyi, *Sov. J. Nucl. Phys.*, **24**, 449 (1976)
- [19] D. P. Arovas, *et al.*, *Physical Review Lett.*, **79**, 2871 (1997)
- [20] J. E. Sonier, *et al.*, *Physical Review B*, **61**, R890 (2000)
- [21] M. Juneau, R. MacKenzie, M.-A. Vachon, *Physical Review B*, **65**, 140512(R) (2002)
- [22] J. M. Speight, *Physical Review D*, **55**, 3830 (1997)
- [23] C. P. Poole Jr. (éditeur), *Handbook of Superconductivity*, Academic Press, San Diego (2000)
- [24] William H. Press, *et al.*, *Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing, Second Edition*, Cambridge University Press, Cambridge (1992)

APPENDICE A

Données expérimentales sur les supraconducteurs

Matériau	T_c	ξ_{ab}	ξ_c	λ_{ab}	λ_c
	(K)	(nm)	(nm)	(nm)	(nm)
NbSe ₂	7,7	23	69	230	3,2
K _{0,33} (H ₂ O) _{0,66} TaS ₂	-	30	0,9	3400	71000
(La _{0,91} Sr _{0,09}) ₂ CuO ₄	30	3,3	-	283	-
YBa ₂ Cu ₃ O _{6,9}	83	-	-	142	>700

Tableau A-1: Longueurs caractéristiques (voir la source: [23]) pour certains supraconducteurs. Les indices ab dénotent le plan des couches alors que c est la direction perpendiculaire.

Matériau	T_c	B_{c1}	B_{c2}
	(K)	(mT)	(mT)
Ir (type I)	0,11	1,6	n/d
Ti (type I)	0,40	5,6	n/d
Al (type I)	1,18	10,5	n/d
Nb dopé Mo	7,8	158	-
YBa ₂ Cu ₃ O _{6,5}	62	8,3	87

Tableau A-2: Inductions magnétiques critiques (voir: [23]) pour certains supraconducteurs. Les types I ne possèdent pas de B_{c2} .

APPENDICE B

Méthode numérique de la relaxation

Le problème à résoudre est de solutionner un ensemble d'équations différentielles. Nous allons débiter par un survol de la méthode numérique principale employée lors de cette recherche. Il s'agit de la relaxation [24], qui utilise à sa base, un algorithme itératif multidimensionnel de la méthode de Newton. Le point de départ est un estimé numérique plus ou moins grossier des solutions et l'algorithme se charge de l'améliorer par étapes itératives, d'où le nom *relaxation*. La motivation principale qui nous amène à utiliser une méthode numérique pour solutionner nos équations différentielles d'un modèle Ginzburg-Landau est qu'il n'existe pas de solutions analytiques connues.

L'algorithme utilisé dans cette recherche exploite une version discrète des équations différentielles. Elles sont ensuite insérées dans une forme spéciale de matrice qui optimise le temps de calcul. Cette précaution devient rapidement nécessaire puisque la matrice s'étend sur MN colonnes et MN lignes, où M est le nombre de points sur lesquels les fonctions sont évaluées et N est le nombre d'équations différentielles ordinaires du premier ordre (par exemple, $N = 6$ et $M \sim 1000$ dans notre traitement du modèle $SO(5)$). Comme il est toujours préférable d'évaluer les fonctions sur un trop grand nombre de points plutôt qu'un trop petit nombre, M est relativement grand et devient un facteur principal dans le temps de calcul.

Dans ce travail, les équations différentielles que nous traiterons proviennent des équations d'Euler-Lagrange de notre système et sont du deuxième ordre. Dans un premier temps, nous allons nous pencher sur le cas réduit du groupe $SO(2)$ (deux équation du deuxième ordre) dans lequel le champ d'anti-ferromagnétisme est absent. Puis, nous allons l'inclure pour étudier le modèle $SO(5)$ (trois équations du deuxième ordre) qui nous intéresse ici. Le passage entre les ordres supérieurs des équations différentielles vers l'ordre 1 s'accomplit de manière tout à fait standard en posant la première dérivée de la variable indépendante comme étant égale à une nouvelle variable indépendante.

Comme dans toute résolution complète de système d'équations différentielles, il faut fournir un ensemble de conditions frontières. Celui-ci va naturellement comporter un nombre de conditions égal au nombre d'équations linéaires à résoudre. Dans notre méthode de relaxation, nous sommes libres de diviser ces conditions dans les deux points qui forment les extrémités.

B.1 Présentation générale de l'algorithme

Il y a bien sûr, de nombreuses variantes à l'une ou l'autre des étapes de cet algorithme. Une façon efficace de procéder passe par l'interpolation des valeurs des fonctions entre des points voisins immédiats, c'est-à-dire, partant d'équations différentielles:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (\text{B.1})$$

nous les transformons ensuite en des objets définis sur une grille de points (discrétisation du domaine):

$$y_k - y_{k-1} - (x_k - x_{k-1})f\left[\frac{1}{2}(x_k + x_{k-1}), \frac{1}{2}(y_k + y_{k-1})\right] = 0 \quad (\text{B.2})$$

La dérivée dy/dx du départ se transforme donc en un quotient de différence entre des points avoisinants en x et en y , ce qui est une bonne approximation puisque nous sommes implicitement

dans une limite où la distance entre deux points avoisinants est beaucoup plus petite que l'échelle de la solution (ce qui est garanti par un grand nombre M de points). La fonction f s'évalue en interpolant en poids égaux les valeurs des variables x et y en ces deux points k et $k - 1$.

Dans notre cas du modèle $SO(2)$ ($SO(5)$), nous aurons 4 (6) de ces équations pour chaque paire $(k, k - 1)$ de points. Il est utile de visualiser l'ensemble des équations dans un vecteur colonne:

$$\mathbf{E}_k \equiv y_k - y_{k-1} - (x_k - x_{k-1})\mathbf{f}_k[x_k, x_{k-1}, y_k, y_{k-1}] = 0 \quad k = 2, 3, \dots, M \quad (\text{B.3})$$

où l'indice k parcourt les points de la grille, donc, suivant les colonnes de la matrice par sauts de N colonnes. C'est-à-dire, dans l'exemple ci-haut, les N premières colonnes (ici $N = 2$) de la matrice partagent la valeur $k = 1$, les deux colonnes suivantes partagent $k = 2$ et ainsi de suite. Les conditions frontières \mathbf{E}_1 et \mathbf{E}_M ne dépendent que des paires de variables x_1, y_1 et x_M, y_M , respectivement.

Il faut maintenant révéler la nature du contenu de la matrice. Elle provient de l'expansion de Taylor des équations de différence jusqu'au premier ordre, autour de petits changements des variables dépendantes, $\Delta \mathbf{y}_k$. Pour les points intérieurs (qui servira à déterminer les éléments C), nous avons:

$$\mathbf{E}_k(\mathbf{y}_k + \Delta \mathbf{y}_k, \mathbf{y}_{k-1} + \Delta \mathbf{y}_{k-1}) \approx \mathbf{E}_k(\mathbf{y}_k, \mathbf{y}_{k-1}) + \sum_{n=1}^N \frac{\partial \mathbf{E}_k}{\partial y_{n,k-1}} \Delta y_{n,k-1} + \sum_{n=1}^N \frac{\partial \mathbf{E}_k}{\partial y_{n,k}} \Delta y_{n,k} \quad (\text{B.4})$$

Les éléments C^1 sont tout simplement:

$$C_{j,n} = \frac{\partial E_{j,k}}{\partial y_{n,k-1}} \quad C_{j,n+N} = \frac{\partial E_{j,k}}{\partial y_{n,k}} \quad (\text{B.5})$$

¹Les indices j et n sont des indices internes qui parcourent les N lignes et N colonnes de chaque moitié carrée des sous-blocs rectangulaires de la matrice. Ces dernières, les moitiés, contiennent de l'information sur leur point k respectif.

L'expression mathématique utilisée dans l'algorithme met donc en jeu, dans le membre gauche de l'équation, la matrice mentionnée ci-haut, qui multiplie un vecteur colonne où se réunissent les inconnus $\Delta y_{n,k}$ ² pour donner, dans le membre droit de l'équation matricielle, un vecteur colonne où se retrouvent \mathbf{E}_k . Ceci donne un système d'équations linéaires à résoudre, dont la solution donne les corrections à apporter à chacune des N variables dépendantes. Ceci est exactement le schème d'une itération de la méthode Newton.

Toutefois, il est utile d'apporter quelques modifications, puisqu'une relaxation impliquant plusieurs variables dépendantes peut facilement diverger lors de la tentative de relaxation. Il existe des moyens de freiner les variations trop brusques calculées par la méthode de Newton. D'une part, si ces changements sont trop grands, l'estimé itératif peut échapper à la région convergente qui contient la solution et peut même aboutir à une matrice singulière. D'autre part, si les corrections sont artificiellement réduites (par la multiplication d'un facteur approprié, par exemple), l'algorithme ne sera pas suffisamment rapide au point de vue pratique. Il y a donc un jeu de balancier entre la stabilité de l'algorithme et sa vitesse d'exécution.

Également, afin d'éviter que l'estimé n'erre dans des régions externes à celle(s) qui contient(ennent) la solution recherchée, les valeurs initiales des variables dépendantes doivent être raisonnablement proches d'une solution attendue. Il est difficile, voire impossible de poser des estimés qui soient généraux et qui fonctionnent en ce sens pour tous les paramètres qui sont possiblement contenus dans les équations différentielles. La meilleure façon de faire, qui malheureusement est loin d'être efficace, est de procéder par essais et erreurs afin de progressivement reconnaître des formes typiques de solutions pour des régions données de l'espace des paramètres. C'est pourquoi ce mémoire inclut (c.f. sections 2.7.1 et 3.7.3) des graphes qui démontre l'allure générale des solutions selon les variations des paramètres. Ces graphes n'ont pas été obtenus du premier coup en général; il a souvent fallu modifier l'estimé de départ afin d'atteindre une

²Il faut bien comprendre ici que les éléments de ce vecteur sont réunis en k paquets de N lignes chacun.

solution convergente. Après de nombreux tests, il est possible d'inclure un générateur d'estimé plus robuste, bien qu'imparfait.

Après une itération de la méthode de Newton, nous calculons une quantité pondérée qui révèle l'importance des corrections:

$$Imp = \frac{1}{MN} \sum_{k=1}^M \sum_{j=1}^N \frac{|\Delta y_{jk}|}{ch_j} \quad (\text{B.9})$$

où ch_j est une quantité définie pour chaque variable dépendante et qui pondère la somme obtenue. Ensuite, les corrections qui seront effectivement appliquées doivent d'abord passer par le filtre suivant:

$$y_{jk} \rightarrow y_{jk} + \frac{Frein}{\max(Frein, Imp)} \Delta y_{jk} \quad (\text{B.10})$$

où $Frein$ est une constante numérique. Donc, lorsque l'importance Imp des corrections dépasse la valeur de cette constante, seule une fraction $Frein/Imp$ des corrections calculées par la méthode de Newton s'applique. À l'inverse, lorsque Imp est plus petit, la totalité des corrections est appliquée. La façon de calculer Imp ainsi que la valeur $Frein$ est hautement dépendante du système particulier d'équations différentielles à résoudre. Par exemple, dans le programme particulier de ce mémoire, les facteurs ch ont été calculés à partir des longueurs caractéristiques des champs prévus par le choix des paramètres.

Notre méthode d'interpolation nous permet de solutionner l'équation matricielle très rapidement. Nous allons réviser les étapes qui mènent à une forme particulière pour la matrice, forme qui précède l'étape de substitution. D'abord, on diagonalise le premier sous-bloc frontière F de façon à avoir une sous-matrice identité à la gauche; ce qui reste à sa droite sera utilisé à l'étape de substitution, appelons-les les éléments S . Cette étape produit évidemment des éléments indésirables I (qui devront être éliminés) dans les lignes inférieures. Les éléments D forment les sous-matrices carrées à diagonaliser, alors que les A sont des éléments qui seront altérés pour devenir des S .

