



HAL
open science

Etude théorique du rôle des processus interchaînes dans des liquides de Luttinger couplés

Sylvain Capponi

► **To cite this version:**

Sylvain Capponi. Etude théorique du rôle des processus interchaînes dans des liquides de Luttinger couplés. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 1999. Français. NNT: . tel-00008091

HAL Id: tel-00008091

<https://theses.hal.science/tel-00008091>

Submitted on 17 Jan 2005

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

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

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER
TOULOUSE III

THÈSE

présentée
pour obtenir

le grade de Docteur en Sciences
Spécialité Physique Théorique

par

SYLVAIN CAPPONI

Étude théorique du rôle des processus interchaînes dans des
liquides de Luttinger couplés

Soutenue le 14 octobre 1999 devant la commission d'examen :

Monsieur Erik Sørensen	Président
Monsieur Claude Bourbonnais	Rapporteur
Monsieur Thierry Giamarchi	Rapporteur
Monsieur Didier Poilblanc	Directeur de thèse
Monsieur Leonardo Degiorgi	
Monsieur Denis Jérôme	

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Didier Poilblanc pour avoir dirigé cette thèse durant toutes ces années. Son enthousiasme, sa compétence scientifique et sa bonne humeur ont largement contribué à la réalisation de ce travail. Je lui suis également très reconnaissant pour m'avoir témoigné sa confiance en me permettant de voyager, ce qui a permis de nombreuses collaborations scientifiques qui, je l'espère, vont continuer.

Je remercie Jean Bellissard de m'avoir accueilli dans le laboratoire de physique quantique de l'université Paul Sabatier. L'ambiance du laboratoire de physique quantique a par ailleurs contribué à rendre ces trois années très agréables.

Messieurs Leonardo Degiorgi et Denis Jérôme ont accepté de participer au jury de thèse; monsieur Claude Bourbonnais et monsieur Thierry Giamarchi ont de plus endossé la fastidieuse charge de rapporteurs. Je les en remercie.

We thank IDRIS (Orsay) for allocation of CPU time on the C94 and C98 CRAY supercomputers.

Didier Poilblanc a bien voulu diriger mes travaux de thèse pendant ces trois dernières années. Sa disponibilité, son enthousiasme, sa compétence scientifique et sa gentillesse m'ont beaucoup apporté. Je lui en suis profondément reconnaissant.

Pour terminer, un petit bonjour aux compagnons de travail: Alexandre, André, Carine, Caroline, Christine, David, Fabien, Florent, Florent, Georges, Jean-Yves, Julien, Maja, Marc, Matthieu, Stéphane, Sylvaine, Sylvie,

Mes autres remerciements ne regardent que moi. . .

Computer...[...] if you don't open that exit hatch this moment I shall zap straight off to your major data banks and reprogram you with a very large axe, got that?

Douglas Adams, *The Hitch Hiker's Guide To The Galaxy*
(Le guide du routard galactique).

Table des matières

Préambule	11
I Revue expérimentale	15
1 Les conducteurs organiques	15
1.1 Les composés	16
1.2 Propriétés physiques	21
2 Autres systèmes quasi unidimensionnels	34
2.1 Composés inorganiques	34
2.2 Les fils quantiques	36
2.3 Les nanotubes de carbone	37
2.4 Les états de bord de l'effet Hall quantique	37
3 Les supraconducteurs à haute température critique	39
3.1 Propriétés physiques	39
3.2 Interprétation théorique	39
II Approche théorique des systèmes unidimensionnels	41
1 Le paradigme du liquide de Fermi	41
1.1 Généralités sur le liquide de Fermi	42
1.2 Échec du liquide de Fermi en une dimension	42
2 Le modèle de Tomonaga-Luttinger	44
2.1 Hamiltonien de Tomonaga-Luttinger	44
2.2 Cas des interactions vers l'avant	45
3 Bosonisation	46
3.1 Bosonisation du modèle de Tomonaga-Luttinger	46
3.2 Bosonisation des spins $1/2$	48
3.3 Bosonisation de fermions avec spin	49
3.4 Calcul des fonctions de corrélation	50
3.5 Le modèle de sine-Gordon	51
3.6 Le modèle de Thirring et la ligne de Luther-Emery	53
4 Le liquide de Luttinger	53
4.1 Propriétés physiques du liquide de Luttinger	54
4.2 Détermination des paramètres	56
4.3 Cas de l'interaction coulombienne	58
5 Au-delà : la transition dimensionnelle	58

III Méthodes numériques	61
1 Diagonalisation exacte	61
1.1 Principe	61
1.2 Algorithme de Lanczos	63
1.3 Exemples : modèle unidimensionnel	67
2 Méthode de Lanczos tronqué	76
2.1 Motivation	76
2.2 Exemple : modèle de Heisenberg bidimensionnel anisotrope	78
2.3 Conclusions et perspectives	82
3 Monte-Carlo Quantique	82
3.1 Bases du Monte-Carlo classique	82
3.2 Version quantique	83
3.3 Calcul des fonctions de corrélation dynamiques	85
IV Étude de systèmes de chaînes de fermions couplées	87
1 Problématique	88
1.1 Pertinence des termes de saut	89
1.2 Diagramme de phase	93
1.3 Concept de cohérence	95
2 Différentes approches analytiques	96
2.1 Modèle exactement soluble avec $\alpha = 0$	97
2.2 Modèle exactement soluble avec $\alpha \neq 0$	98
2.3 Groupe de renormalisation	98
2.4 Réponse linéaire	101
2.5 Bosonisation en dimension $d > 1$	102
2.6 Approche diagrammatique	103
3 Étude numérique de la pertinence de t_{\perp}	107
3.1 Modèle microscopique	107
3.2 Évolution de la fonction d'occupation	110
4 Diagramme de phase de deux chaînes	119
4.1 Relation de dispersion	119
4.2 Diagramme de phase	120
5 Propriétés spectrales d'une échelle de fermions sans spin	120
5.1 Cas des couches fermées	122
5.2 Cas des couches ouvertes	124
5.3 Discussion	127
6 Échelle de Hubbard : rôle du spin	127
6.1 Hamiltonien	127
6.2 Critère de cohérence	127
6.3 Résultats	129
7 Étude de la cohérence dans une géométrie particulière	133
7.1 Cas sans interactions	134
7.2 Effet des interactions	136
7.3 Conclusion	138
7.4 Perspective expérimentale	139

8 Étude numérique du transport transverse	139
8.1 Transport transverse	139
8.2 Étude du poids du pic de Drude transverse	140
8.3 Règle de somme	145
8.4 Étude de la conductivité en fréquence	146
8.5 Conclusion sur le transport	149
 Conclusion	 151
 Publications	 153
 Bibliographie	 156

Préambule

La physique des solides est un terrain d'étude privilégié à la fois pour les théoriciens et les expérimentateurs. Il s'agit de comprendre des effets quantiques *macroscopiques* qui sont la conséquence des effets à N corps. Ce problème, qui paraissait insoluble au départ vu la complexité et le grand nombre de particules, a extraordinairement progressé en bénéficiant de tous les outils de la physique théorique. Du point de vue expérimental, il existe aujourd'hui d'innombrables techniques qui permettent de sonder avec précision les propriétés de ces matériaux.

En 1957, LANDAU [1] propose le modèle du liquide de Fermi pour expliquer les propriétés électroniques des solides. Grossièrement, elles sont qualitativement les mêmes que celles du gaz d'électrons sans interactions. Ces prédictions sont vérifiées dans un très grand nombre de matériaux. Les transitions de phase accompagnées de brisures de symétrie qui apparaissent à basse température sont également bien comprises dans de nombreux cas (par exemple, citons le succès de la théorie BCS pour expliquer la supraconductivité à basse température [2]).

Dans les années 50 et 60, les théoriciens TOMONAGA et LUTTINGER s'intéressent au cas du gaz d'électrons en une dimension. Il s'agit alors d'un problème théorique uniquement : il apparaît que le liquide de Fermi est instable en une dimension et devient un liquide de Luttinger. Nous préciserons dans la thèse les propriétés physiques de cet état mais disons brièvement qu'il n'existe pas de quasi-particules et que les excitations sont des modes collectifs de charge et de spin. En outre, les fonctions de corrélation décroissent en lois de puissance avec des exposants qui ne dépendent que d'un seul paramètre.

Mais, avec la découverte des premiers conducteurs organiques quasi unidimensionnels TTF-TCNQ et $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, on a obtenu des réalisations expérimentales dans lesquelles des écarts à la théorie du liquide de Fermi peuvent être observés. Il s'ensuivit dès lors un véritable développement à la fois des méthodes de calcul et des techniques expérimentales pour mieux comprendre ces composés de basse dimensionnalité. Les effets conjugués des corrélations fortes et de la basse dimensionnalité sont responsables d'un grand nombre d'instabilités qui rendent les diagrammes de phase très riches. Toutefois, alors qu'il existe un accord qualitatif entre théorie et mesures dans de nombreux cas, une explication quantitative n'est pas toujours trouvée. Ce désaccord pourrait provenir de termes qui ne sont pas pris en compte dans l'approche strictement unidimensionnelle tel que le couplage interchaîne que nous étudions. En effet, ce type de couplage est pertinent au sens du groupe de renormalisation et la nature du nouveau point fixe n'est toujours pas clairement établie à l'heure actuelle.

Le problème qui nous intéresse dans cette thèse a trait au changement de régime qui

se produit dans ces systèmes qui ne sont pas strictement unidimensionnels. D'un point de vue formel, il s'agit d'étudier l'effet d'une perturbation sur un liquide de Luttinger; et, en pratique, il faut comprendre comment se produit le changement de régime (ou *crossover* en anglais) entre le comportement de liquide de Luttinger qui existe à haute température et une physique tridimensionnelle à basse température.

Cette étude a été remise à l'ordre du jour depuis la découverte des supraconducteurs à haute température critique en 1986. En effet, ces matériaux sont quasi bidimensionnels et ils présentent des déviations au liquide de Fermi dans leur phase normale. Il a donc été proposé par ANDERSON l'existence d'un nouveau type de comportement pour un gaz d'électrons fortement corrélés en dimension deux qui serait similaire au liquide de Luttinger. Si cela s'avérait exact, il faudrait là encore comprendre la transition dimensionnelle qui existe à cause du couplage entre ces plans.

Afin de débattre cette question, l'effet du couplage interchaîne a été analysé dans des modèles de deux liquides de Luttinger couplés. Nous discuterons de ces résultats dans la thèse mais disons qu'une motivation supplémentaire est apparue lorsqu'a été prédit, pour une échelle de spin, l'existence d'un gap de spin et la possibilité d'avoir, en dopant ce système, des fluctuations supraconductrices dans un modèle ne contenant que des interactions électroniques répulsives. Ces idées ont d'abord été introduites dans les études phénoménologiques de la physique des supraconducteurs puisqu'il existe un pseudo-gap, souvenir du gap de spin des composés non dopés, et on sait que les interactions électroniques sont cruciales dans ces matériaux. Ainsi, il est probable que l'étude théorique des modèles plus simples que sont les échelles permettra une meilleure compréhension de la physique des systèmes fortement corrélés en basse dimension.

En outre, ces échelles qui sont au départ des jouets de théoriciens connaissent une nouvelle raison d'être depuis la synthèse de composés $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ qui ont des structures d'échelles. En particulier, mentionnons le cas de $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ dopé au calcium qui devient supraconducteur sous pression (30 kbar) avec une température critique $T_C = 10\text{K}$.

Le plan que nous allons suivre consiste tout d'abord à décrire les systèmes expérimentaux unidimensionnels et bidimensionnels ainsi que leurs propriétés spécifiques en insistant principalement sur les sels de Bechgaard et leurs analogues au soufre qui sont des conducteurs organiques quasi unidimensionnels pour lesquels la transition dimensionnelle n'est toujours pas comprise. Puis, nous rappelons les méthodes mises en œuvre dans l'étude des modèles de fermions unidimensionnels et nous explicitons les caractéristiques physiques du comportement de liquide de Luttinger. Ensuite, nous discutons diverses méthodes numériques qui ont été appliquées avec succès aux problèmes de fermions en interaction et qui sont largement utilisées dans cette thèse. Nous procédons alors à une revue des résultats proposés concernant le comportement de chaînes fermioniques couplées que nous comparons à des simulations numériques faites à partir de modèles réalistes. Nous dégagerons les concepts de pertinence du couplage interchaîne et de sa cohérence. Nous montrerons comment un système de deux chaînes peut exhiber des lois de puissance anormales du fait des interactions sur les chaînes et comment cela peut modifier à la fois ses propriétés spectrales et thermodynamiques. En particulier, la valeur du couplage interchaîne est modifiée de manière effective par les interactions en accord avec diverses prédictions analytiques faites pour un grand nombre de chaînes

et il apparaît spontanément des processus de sauts de paires d'électrons qui sont probablement pertinents dans la discussion des résultats expérimentaux. Nous étudierons alors la cohérence du saut interchaîne dans une géométrie particulière. Enfin, nous parlerons des propriétés de transport transverse pour lesquelles les expériences sont encore discutées.

Chapitre I

Revue expérimentale

L'intérêt porté aux systèmes de basse dimensionnalité vient du fait que les fluctuations quantiques sont très importantes dans de telles situations. En effet, on sait grâce au théorème de MERMIN-WAGNER [3] que les fluctuations empêchent la formation d'un ordre à longue distance en une dimension quelle que soit la température et à deux dimensions à température finie. Il en résulte des compétitions entre divers ordres et des diagrammes de phase variés qui rendent la physique de ces systèmes très intéressante.

Ces systèmes sont également très attractifs pour le théoricien puisqu'il est plus facile de traiter des modèles de basse dimension à la fois analytiquement et numériquement. Toutefois, il reste de nombreux points obscurs dans la compréhension de ces modèles.

Bien entendu, ces études auraient un intérêt bien moindre si il n'existait pas de réalisations expérimentales susceptibles de les valider ou non et, dans ce premier chapitre, nous allons détailler plusieurs systèmes physiques quasi unidimensionnels ou bi-dimensionnels qui sont de bons terrains d'étude de la physique des électrons fortement corrélés en basse dimensionnalité.

L'anisotropie de ces systèmes résulte soit de leur structure géométrique (fil quantique, états de bord de l'effet Hall), soit d'effets de recouvrements d'orbitales préférentiels selon certaines directions (composés organiques, inorganiques etc.).

1 Les conducteurs organiques

Les premiers conducteurs organiques ont été synthétisés dans les années 1960. Ils sont constitués d'empilements de grosses molécules organiques séparées par des contre-ions. Cette intense activité provenait de la suggestion de LITTLE selon laquelle le couplage électron-phonon en une dimension était très important et pouvait conduire à des états supraconducteurs avec des températures critiques élevées [4]. En réalité, parmi ces composés, certains sont effectivement supraconducteurs mais avec des températures critiques de l'ordre de 1 K. Heureusement, le caractère unidimensionnel de ces matériaux augmente les fluctuations et, de manière générale, en une dimension, un système électronique sur réseau est instable et forme une Onde de Densité de Charge (ODC) ou de spin (ODS) : il s'agit de l'instabilité de PEIERLS [5]. Il en résulte des diagrammes de phase particulièrement riches puisqu'on y trouve des phases d'Ondes de Densité, métalliques, supraconductrices, ODS induites sous champ, phases de Hall etc.

Nous allons présenter les divers composés puis nous discuterons en détail les propriétés des sels de Bechgaard qui sont très intrigantes puisqu'on peut étudier le changement de régime entre le comportement unidimensionnel à haute température qui devient tridimensionnel à basse température.

1.1 Les composés

i) TTF-TCNQ

Il s'agit d'un conducteur organique qui présente une transition de Peierls au-dessous de $T_P = 54$ K, puis vers une phase isolante au-dessous de 38 K. L'état fondamental à température nulle comporte une Onde de Densité de Charge.

L'intérêt pour ce composé est d'avoir été le premier matériau organique à exhiber des propriétés liées à son caractère unidimensionnel. En 1976, POUGET *et coll.* observent une composante à $4k_F$ dans les corrélations électroniques par diffusion diffuse de rayons X [6, 7]. À 60 K, ils observent bien l'anomalie de Kohn à $2k_F$ qui est un précurseur de la transition de Peierls vers l'Onde de Densité de Charge. Celle-ci coexiste avec une composante à $4k_F$. Cependant, la partie à $4k_F$ persiste jusqu'à 150 K alors que celle à $2k_F$ a disparu. Il s'agit donc d'une propriété intrinsèque du gaz d'électrons qui s'interprète naturellement, dans une théorie unidimensionnelle, par les processus *Umklapp* liés aux interactions et rendus possibles pour des remplissages commensurables¹ [7].

Mais, contrairement aux expériences de photoémission dans d'autres composés, on observe la présence de bandes qui dispersent [8]. En outre, le couplage interchaîne étant du même ordre de grandeur que la température de transition de Peierls, ce composé peut tout à fait être décrit par une théorie unidimensionnelle [8].

ii) Les sels de Bechgaard : $(\text{TMTSF})_2\text{X}$

Ces matériaux ont été synthétisés en 1980 par BECHGAARD *et coll.* [9] et nous les noterons $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ où X désigne l'anion (pour citer quelques exemples : AsF_6^- , PF_6^- , SbF_6^- , NO_3^- , Br^- , ReO_4^- ou ClO_4^-) et TMTSF est l'abréviation pour tétraméthyltétrasélénafulvalène représenté sur la figure I.1.

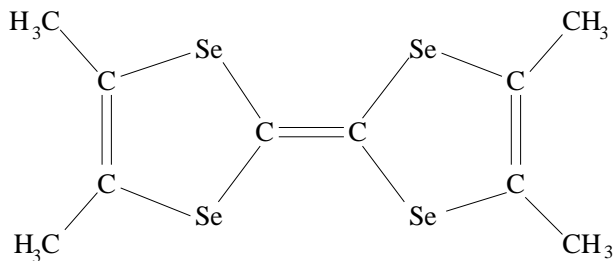


FIG. I.1 – Molécule TMTSF.

Comme on le voit sur la figure I.2, ces molécules organiques s'organisent en empilements. Les orbitales π de ces molécules étant perpendiculaires au plan des molécules, on a un très bon recouvrement le long de la direction perpendiculaire à ce plan qui

1. Ces processus de diffusion ne conservent l'impulsion que modulo un vecteur du réseau réciproque.

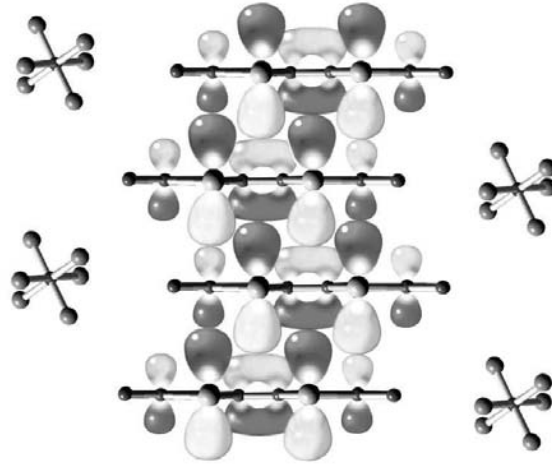


FIG. I.2 – Arrangement des molécules TMTSF. Les orbitales π schématisées donnent lieu à un transport unidimensionnel selon l'axe a perpendiculaire au plan des molécules (figure extraite de la référence [10]).

forme un axe de conduction privilégié noté a . En outre, il existe une dimérisation de l'ordre du % selon cet axe, assez faible pour $(\text{TMTSF})_2\text{X}$, et cela est responsable de nombreuses propriétés puisque ces composés, bien qu'étant quart-remplis du point de vue stœchiométrique, sont au demi-remplissage effectif.

Le conducteur $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ possède un groupe d'espace triclinique $P\bar{1}$ avec $a = 7,29\text{\AA}$, $b = 7,71\text{\AA}$ et $c = 13,52\text{\AA}$. En outre, la présence des contre-ions entre les molécules rend encore plus difficile le transport entre les chaînes et ces composés sont donc susceptibles de présenter des propriétés physiques unidimensionnelles. Cela se manifeste par des intégrales de saut dans un rapport $1/0,1/0,005$ selon les différents axes de conduction (axe a : plus grande conduction ; axe c : moins bonne conduction). Or, puisque $t_a \sim 0,3\text{ eV}$ et $t_c \sim 1\text{ meV}$, on devrait observer un comportement bidimensionnel pour des températures supérieures à 5 K. Pour le couplage selon b , la situation est moins claire. La valeur du couplage nue est de l'ordre de $t_b \sim 20\text{ meV}$ et cela va induire des effets pour des températures comprises entre 100 et 300 K. Toute la question est de savoir si dans ces gammes de température, le composé qui n'est pas strictement unidimensionnel peut présenter des propriétés physiques caractéristiques des systèmes purement unidimensionnels et nous allons donc étudier le changement de régime (c'est-à-dire de dimensionnalité) en fonction de la température ou d'autres paramètres extérieurs.

Bien entendu, les valeurs de ces intégrales de saut sont issues de calculs de bande qui ne prennent pas en compte l'interaction qui, même si elle est écrantée, est de l'ordre de 0,1 eV, ce qui est tout à fait comparable à la largeur de bandes et donne un caractère fortement corrélés à ces matériaux. En outre, l'écrantage étant assez bon, on peut modéliser les interactions par un terme de type Hubbard et proposer le hamiltonien

suivant

$$H = - \sum_{\mu=a,b,c} t_{\mu} \sum_{i,\sigma} (c_{i+\mu,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (\text{I.1})$$

Dans ce composé, les effets d'interactions fortes vont se manifester par une transition vers un état Onde de Densité de Spin au-dessous de 10 K. L'intérêt pour ces composés vient aussi du fait que JÉROME *et coll.* ont observé que $(\text{TMTTF})_2\text{PF}_6$ devient supraconducteur sous pression [11] ($T_c = 0,9$ K sous 12 kbar) tandis que $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ possède une température critique de 1,2 K à pression ambiante. En fait, en variant la composition de l'anion, on modifie la pression chimique, ce qui revient grossièrement à se déplacer dans le diagramme de phase. On peut bien entendu modifier directement la pression ou bien appliquer un champ magnétique qui renforce le caractère unidimensionnel etc. Ainsi, on obtient le diagramme de phase de la figure I.4.

L'apparition de ces différentes phases est tout à fait en accord avec une description unidimensionnelle en présence de fortes interactions. Bien entendu, les températures de transition finies sont dues au caractère tridimensionnel du cristal puisque en dimension un et deux, il ne peut exister d'état ordonné à température finie en vertu du théorème de MERMIN-WAGNER [3]. Avant d'expliquer les mécanismes qui mènent à ces transitions, nous passons à des composés analogues.

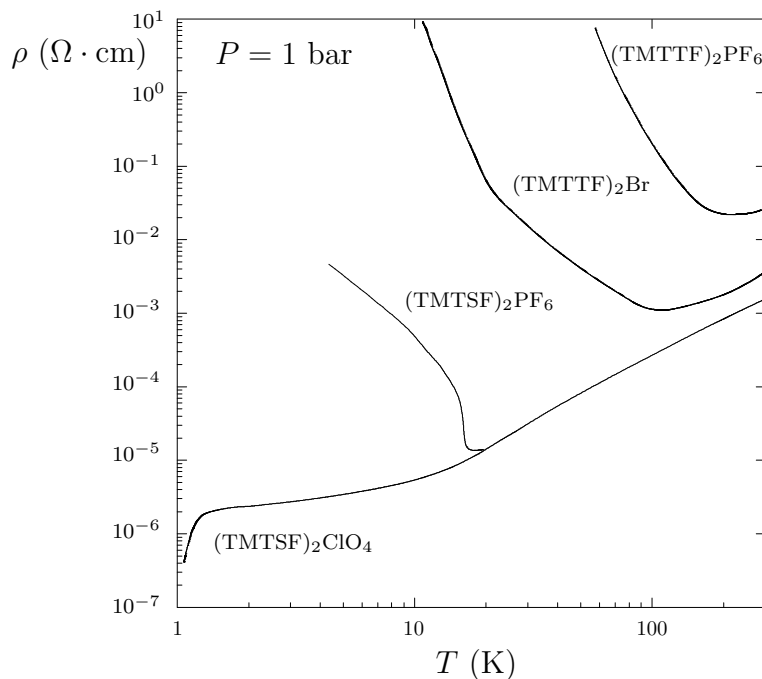


FIG. I.3 – Résistivité longitudinale en fonction de la température pour divers composés organiques (figure extraite de la référence [10]).

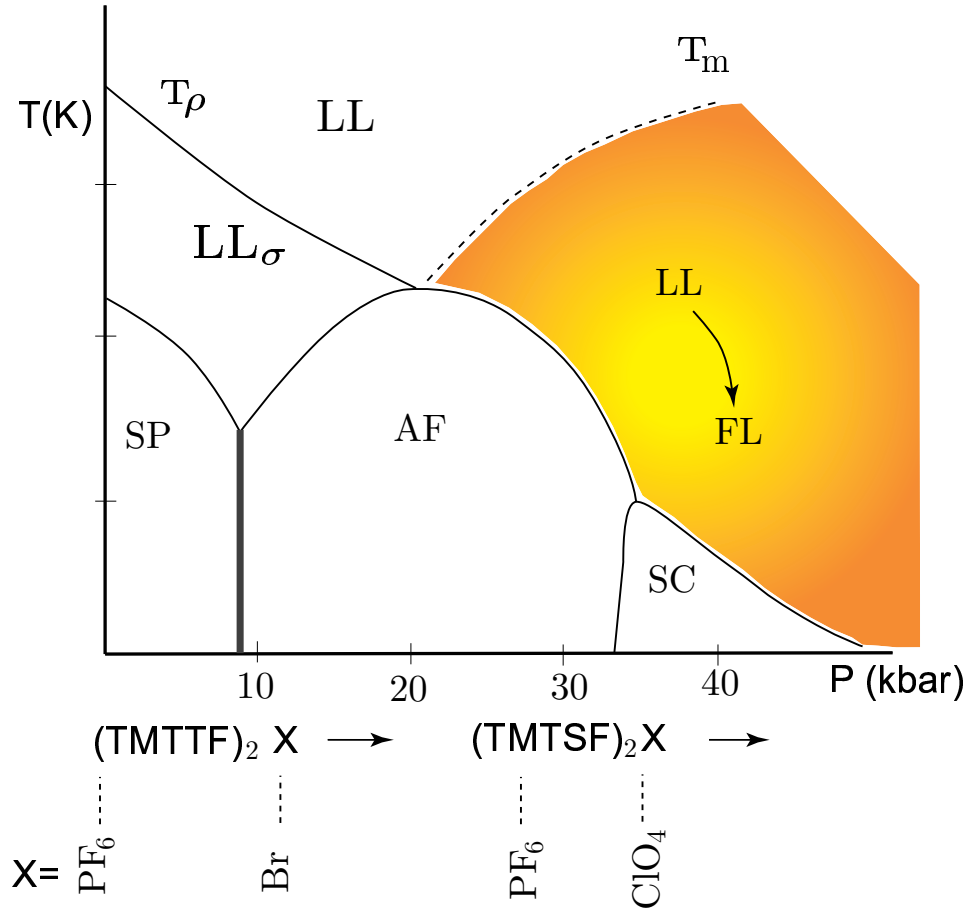


FIG. I.4 – Diagramme de phase schématisé des sels de Bechgaard en fonction de la pression appliquée ou chimique. À gauche : les composés au soufre se comportent comme un Liquide de Luttinger (LL) à haute température et présentent une localisation de charge à T_ρ , puis une transition soit vers une phase Spin-Peierls (SP) soit vers une phase antiferromagnétique (AF) à basse température. À gauche : les composés au soufre sous pression ou bien ceux aux sélénium présentent une phase de liquide de Fermi (FL) avant d'avoir une transition AF ou bien supraconductrice (SC) à basse température. En dégradé, la zone de transition entre un régime de type Luttinger et un liquide Fermi n'est que partiellement comprise (figure extraite de la référence [10]).

iii) (TMTTF)₂X

TMTTF est une molécule dont la structure est identique à celle de TMTSF dans laquelle le soufre remplace le sélénium et X désigne également un anion [7, 12]. Ces matériaux sont décrits comme des isolants de Mott. En effet, à basse température, ils présentent une résistivité activée (voir la figure I.3) caractéristique d'un isolant. Or, la théorie des bandes prédit un comportement métallique et par conséquent, cette transition métal-isolant est due aux interactions en une dimension [13, 14].

Ces composés présentent indéniablement des caractéristiques unidimensionnelles puisqu'il se produit une localisation de la charge entre 100 et 250 K due aux fortes interactions et aux processus *Umklapp*. En même temps, la susceptibilité statique ne montre aucun changement (figure I.5) ce qui n'est pas sans rappeler la séparation spin-charge qui existe en une dimension comme nous le verrons plus loin.

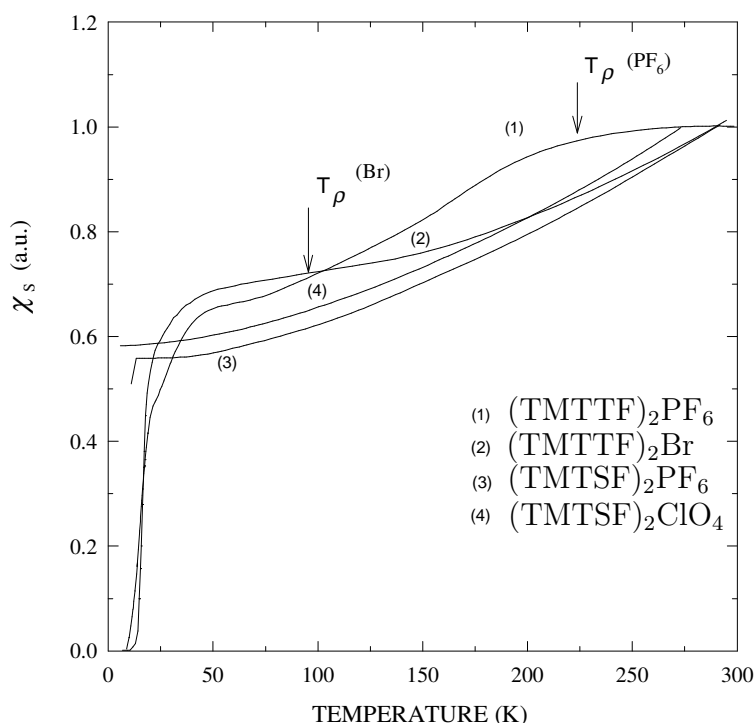


FIG. I.5 – Susceptibilité statique en fonction de la température pour plusieurs conducteurs organiques. D'après [10].

Dans la phase isolante, les spins sont localisés et on observe effectivement une phase antiferromagnétique. À plus basse température, une instabilité de type Peierls, déjà évoquée pour un système métallique, a lieu: il s'agit d'une transition de type spin-Peierls. Une vision simple consiste à dire que le réseau va se dimériser et, d'un point de vue énergétique, la diminution de l'énergie élastique est compensée par le gain d'énergie magnétique. Ainsi, des singulets de spin se forment sur les liens forts et le système présente un gap de spin [15].

Jusqu'à présent, nous observons qu'une théorie purement unidimensionnelle peut rendre compte des expériences. Or, nous savons qu'à basse température, les effets tridi-

mensionnels devraient apparaître. Cependant, dans le cas de ces composés, le couplage interchaîne est plus petit que le gap de localisation et par conséquent, il ne va pas induire d'effets et ne va pas être pertinent². Ainsi, une description purement unidimensionnelle en termes d'isolant de Mott est appropriée.

Nous allons maintenant présenter les propriétés observées expérimentalement en nous concentrant sur les composés au sélénium pour lesquels la compréhension est moins globale.

1.2 Propriétés physiques

Il existe un très grand nombre de résultats expérimentaux qui ont permis de caractériser le diagramme de phase pour de nombreux composés de cette famille et nous allons présenter les résultats les plus marquants ou les plus troublants en suivant la revue écrite récemment sur le sujet par BOURBONNAIS et JÉROME [10]. On pourra consulter également [7, 12, 17].

i) Susceptibilité statique

Dans la phase de température intermédiaire où les composés sont quasi bidimensionnels, on s'attend à avoir le comportement d'un liquide de Fermi qui est le modèle générique en deux dimensions. En particulier, la susceptibilité statique qui est la réponse à un champ uniforme et constant peut être mesurée. Dans un liquide de Fermi, cette quantité est une constante renormalisée par les interactions [18] alors qu'expérimentalement, on observe sur la figure I.5 une variation en fonction de la température.

En outre, on peut estimer l'ordre de grandeur des interactions en calculant le coefficient de Landau qui renormalise cette susceptibilité et en le reliant à l'interaction U dans une approximation de phase stationnaire statique. Ce calcul prédit une valeur $U/4t \sim 0,3 - 0,4$ qui est bien en deçà d'autres estimations.

ii) Chaleur spécifique

Dans la théorie du liquide de Fermi, la chaleur spécifique électronique varie linéairement avec la température $C_e(T) = \gamma T$ et le coefficient est la constante de Sommerfeld qui dépend de la densité d'états au niveau de Fermi [18]

$$\gamma = \frac{2}{3} \pi^2 N(E_F^*)$$

Effectivement, les mesures dans la phase normale de $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ [19] indiquent un comportement linéaire de la contribution électronique à basse température (figure I.6).

On définit également le rapport dit de Wilson [20] de la susceptibilité à la chaleur spécifique normalisé de telle sorte à valoir 1 en l'absence d'interactions

$$R_W = \frac{\pi^2}{3\mu_B^2} \frac{\chi_s}{\gamma} = \frac{1}{1 + F^a}$$

2. un calcul plus précis montre qu'il faut comparer les valeurs du gap et du couplage renormalisé [16] mais nous y reviendrons plus tard.

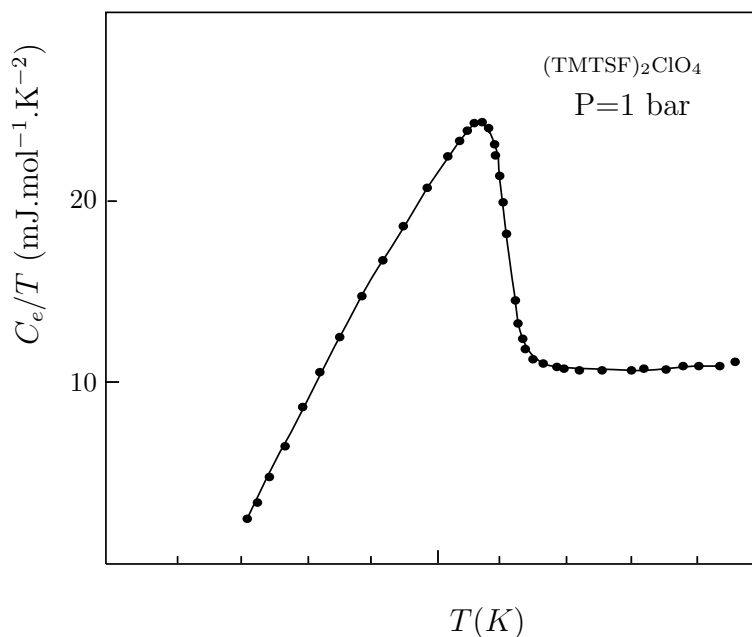


FIG. I.6 – Chaleur spécifique mesurée en fonction de la température dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$. On observe un comportement linéaire dans la phase métallique, au-dessus de la température de transition supraconductrice. Le saut à la transition correspond à la valeur BCS. D'après la référence [19].

où F_a est un des coefficients de Landau [18].

iii) Résonance Magnétique Nucléaire

La technique de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) donne accès de manière très précise aux propriétés locales de spin nucléaire. Par l'intermédiaire du couplage hyperfin entre les spins nucléaires et électroniques, cette technique renseigne sur la fonction de corrélation spin-spin des électrons. Elle comporte deux paramètres : déplacement de Knight et temps de relaxation, qui sont reliés respectivement aux propriétés statique et dynamique de spin.

Le déplacement de Knight donne accès à la susceptibilité statique tandis que le temps de relaxation est donné par la formule de Moriya [21]

$$T_1^{-1} = 2\gamma_N^2 |A|^2 T \int d^d q \chi''_{\perp}(\vec{q}, \omega_N) / \omega_N$$

en unités $\hbar = k_B = 1$ (ce qui sera toujours le cas dans la suite sauf mention contraire) avec γ_N qui est le rapport gyromagnétique, ω_N la fréquence de Larmor du spin nucléaire et $|A|$ le couplage hyperfin. On peut relier cette quantité à la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation de spin.

Pour un liquide de Luttinger, on verra que seules les excitations dont les impulsions sont proches de $q \sim 0$ et $q \sim 2k_F$ donnent des contributions à basse énergie et on en déduit la relation [22]

$$T_1^{-1} = C_0 T \chi_S^2(T) + C_1 T^{K\rho} \quad (\text{I.5})$$

où K_ρ est l'exposant non universel qui détermine les comportements de toutes les fonctions de corrélation à longue distance et χ_S est la susceptibilité statique. Il s'agit d'un exemple de déviation au comportement d'un liquide de Fermi pour lequel le temps de relaxation suit la loi de Korringa $1/T_1 \propto T$.

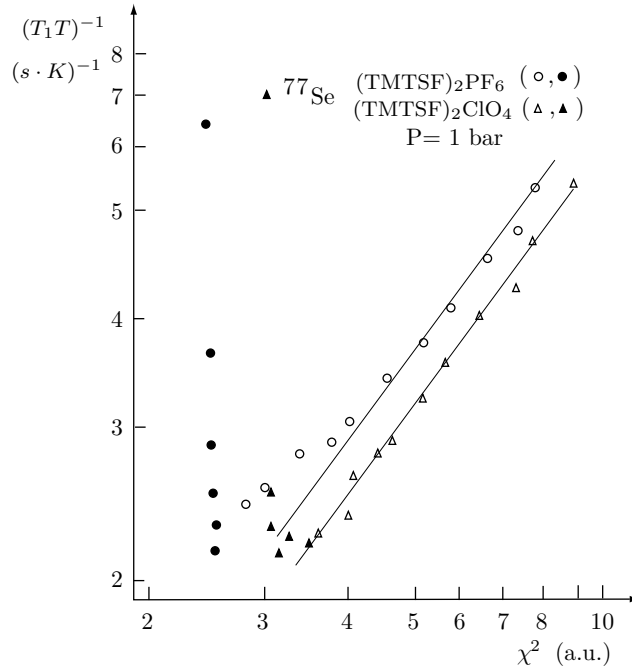


FIG. I.7 – Variation du taux de relaxation RMN de ^{77}Se dans $(\text{TMTSF})_2X$ en fonction du carré de la susceptibilité statique. Les fortes déviations au régime Korringa indiquent un caractère unidimensionnel (figure extraite de la référence [10]).

Expérimentalement, des mesures RMN sur le noyau ^{77}Se dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ [24] montrent effectivement (voir la figure I.7) un comportement du type

$$T_1^{-1} = C_0 T \chi_S^2(T) + C_1$$

Sur la figure I.7, la relaxation du type liquide de Fermi est bien vérifiée dans un large domaine de la phase normale mais cela n'implique pas nécessairement qu'il s'agisse d'un liquide de Fermi puisque les modes à $q = 0$ d'un liquide de Luttinger conduisent à la même relation. Cependant, du fait du comportement anormal de la susceptibilité statique en fonction de la température (voir figure I.5), on observe ici encore des déviations à loi de Korringa dont l'explication la plus simple est donnée par les fluctuations à $2k_F$ qui sont essentielles dans la physique unidimensionnelle.

Les plus fortes déviations à la loi de Korringa sont observées dans une gamme de température bien au-delà de la transition ODS (figure I.8) : il s'agit de la plus forte anomalie par rapport à un comportement du type liquide de Fermi et un ajustement effectué à l'aide de la formule (I.5) conduit à un exposant $K_\rho = 0,25$ dont la valeur est très faible puisque, pour des interactions répulsives, $0 < K_\rho < 1$, $K_\rho = 1$ correspondant au cas sans interactions.

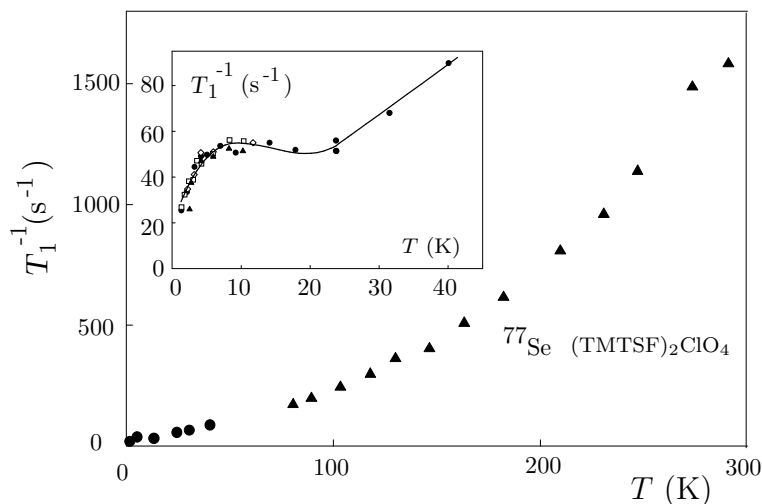


FIG. I.8 – Taux de relaxation spin-réseau obtenu par RMN des noyaux ^{77}Se en fonction de la température pour $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ et pour différents champs. En insert, un agrandissement à basse température montrant un écart à la loi de Korringa (figure extraite de la référence [23, 22]).

En plus des informations sur la statique et la dynamique de spins, l'étude sous champ magnétique permet d'accéder à la dimensionnalité du système de spins puisque l'on a les relations suivantes entre le temps de relaxation RMN et celui de diffusion (ω_e étant la fréquence de Larmor électronique)

$$T_1^{-1} \sim (\omega_e \tau)^{-1/2} \quad (D = 1) \quad (\text{I.7})$$

$$T_1^{-1} \sim \ln(\omega_e \tau) \quad (D = 2) \quad (\text{I.8})$$

$$T_1^{-1} \sim \text{Cst} \quad (D = 3) \quad (\text{I.9})$$

Les résultats des expériences menées dans la phase normale de $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ montrent un comportement caractéristique d'une dynamique unidimensionnelle (voir la figure I.9) qui disparaît pour des champs trop faibles à cause de processus qui ne conservent plus le spin [10]. Il faut noter que cette dépendance en champ disparaît également au-dessous de 150 K, indiquant soit un changement de dimensionnalité, soit un changement de régime.

iv) Photoémission

La spectroscopie par photoémission résolue en angles permet d'avoir accès directement à la fonction spectrale à une particule $A(\vec{k}, \omega)$, c'est-à-dire la partie imaginaire de la fonction de Green. Pour un liquide de Fermi, rappelons qu'elle est constituée d'un pic delta à la fréquence $\omega = \varepsilon(\vec{k})$ avec une largeur s'annulant de manière quadratique à basse température.

Au contraire, dans un liquide de Luttinger, la fonction spectrale au niveau de Fermi se comporte en loi de puissance [25, 26] $A(k_F, \omega) \sim \omega^{\alpha-1}$ avec un exposant $\alpha = (K_\rho + 1/K_\rho - 2)/4$ et, en intégrant sur les impulsions, on définit la densité d'états

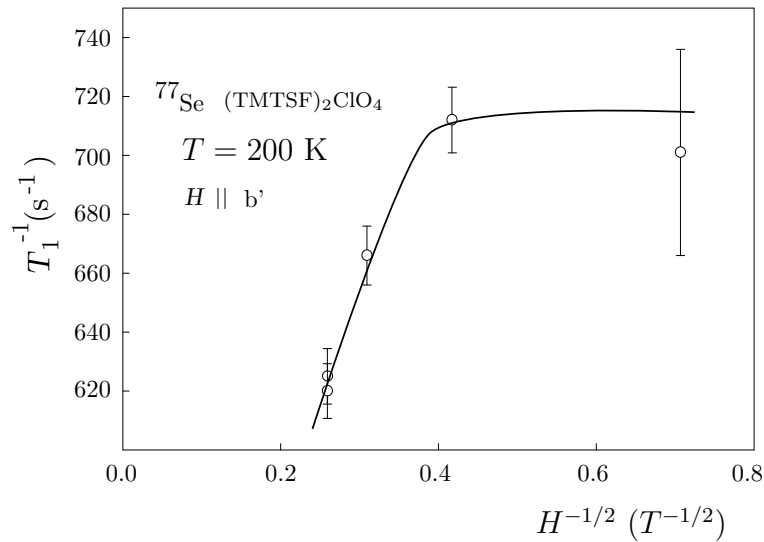


FIG. I.9 – Dépendance en fonction du champ magnétique du taux de relaxation RMN des noyaux ^{77}Se dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ indiquant un régime unidimensionnel d'après (I.7) (figure extraite de la référence [10]).

intégrée qui varie comme

$$N(\omega) \sim |\omega|^\alpha. \quad (\text{I.10})$$

Il s'agit là encore d'une différence essentielle par rapport à un liquide de Fermi où la fonction de distribution présente un saut au niveau de Fermi. Ainsi, une expérience de photoémission résolue en angles [27] ou non [23], devrait permettre de trancher entre les deux comportements.

Effectivement, des mesures de photoémission intégrée sur les angles effectuées à 50 K [23] sont compatibles avec l'absence de poids spectral au niveau de Fermi et un paramètre K_ρ très faible ($K_\rho \sim 0,15$, c'est-à-dire $\alpha > 1$). Ce résultat est également observé dans des expériences résolues en angles (voir la figure I.10). Cette valeur est difficile à interpréter puisque un modèle réaliste tel que celui de Hubbard (I.1) ne permet pas d'avoir des valeurs de K_ρ inférieures à $1/2$. L'alternative consisterait soit à considérer des interactions à plus longue portée comme nous le ferons dans notre étude, soit à tenir compte des phonons qui peuvent diminuer de manière effective la valeur de K_ρ [28].

Toutefois, ces expériences sont sujettes à caution car, dans les données résolues en angles, on n'observe pas la dispersion transverse attendue et, en outre, le comportement en loi de puissance de la densité d'états est observé sur plus d'un eV [27] ce qui est très étonnant si on se rappelle que le modèle de Luttinger n'est valable qu'à basse énergie devant la largeur de bandes. En outre, la présence d'un gap de dimérisation mesuré optiquement (de l'ordre de 5-10 meV) indique que le régime de Luttinger devrait être limité aux énergies inférieures à ce gap contrairement à ce qui est observé.

En fait, cette technique ne permet de sonder que les propriétés des électrons de surface ce qui rend l'interprétation des données difficile puisque, dans ce cas, un désordre

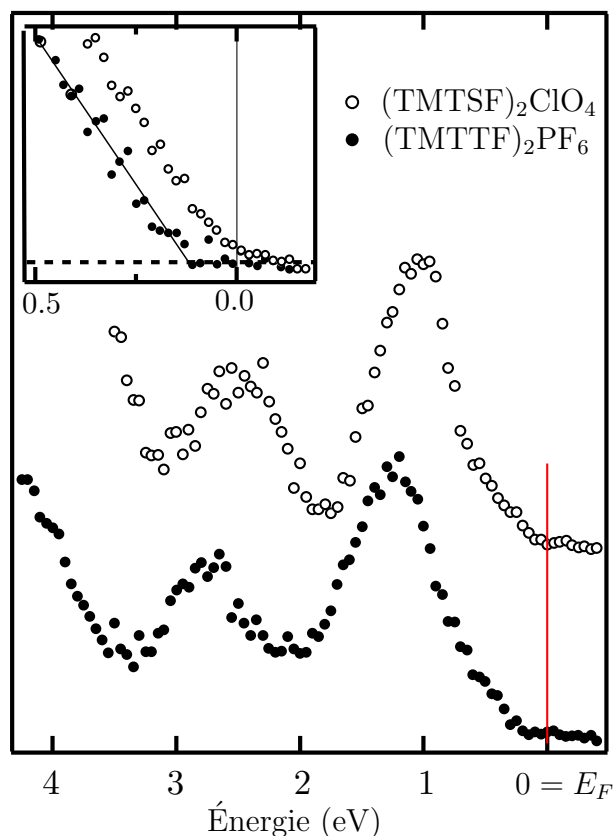


FIG. I.10 – Spectres obtenus par photoémission résolue en angles de deux conducteurs organiques, l'un métallique et l'autre isolant. En insert, un agrandissement montre le gap de charge dans $(\text{TMTTF})_2\text{PF}_6$ (figure extraite de la référence [27]).

même très faible³ pourrait parvenir à localiser les électrons ce qui expliquerait l'absence de dispersion et la renormalisation des interactions.

v) Propriétés de transport

Résistivité

Dans un liquide de Fermi, la résistance est donnée par $\rho(T) \sim \tau^{-1} \sim T^2$. Les expériences destinées à mesurer cette quantité sont très délicates à interpréter puisqu'elles sont effectuées à pression constante alors que les prédictions théoriques sont faites à volume constant. Il faut donc faire une conversion des données et cette procédure n'est pas parfaitement contrôlée.

Au vu des couplages interchaînes, on peut étudier successivement les différents régimes de température.

À haute température où on attend un régime unidimensionnel, on peut appliquer les formules obtenues en considérant les processus *Umklapp* notés g , qui sont responsables

3. En effet, les auteurs de [27] ont analysé l'état de la surface par microscopie tunnel et ne voit pas de traces de détériorations.

de la dissipation dans le gaz d'électrons [29] :

$$\begin{aligned}\rho_a(T) &\sim g_{1/2}^2 T^{4K_\rho-3} && \text{au demi - remplissage} \\ \rho_a(T) &\sim g_{1/4}^2 T^{16K_\rho-3} && \text{au quart - remplissage,}\end{aligned}$$

qui correspondent soit à prendre une répulsion sur site très grande et donc un demi-remplissage effectif, soit à considérer que le solide est bien décrit comme un système quart-rempli d'après sa stœchiométrie. En injectant la valeur de K_ρ estimée par RMN et photoémission, on obtient les comportements $\rho_a(T) \sim T^{-1}$ et $\rho_a(T) \sim T$ respectivement. Les expériences suggèrent plutôt un accord avec le modèle quart-rempli puisque les données corrigées montrent un comportement légèrement sous-linéaire ($\rho_a(T) \sim T^{0,93}$) [10] c'est-à-dire une forte déviation au liquide de Fermi.

Pour la contribution transverse, plusieurs auteurs ont estimé la conductivité selon l'axe c [30, 31, 32] et ils trouvent

$$\rho_c(T) \sim T^{-2\alpha}, \tag{I.11}$$

qui est précisément la règle d'or de Fermi puisque la densité d'état sur chaque chaîne varie comme $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^\alpha$ (équation (I.10)) et, dans ce régime unidimensionnel, le transport transverse s'effectue par effet tunnel. Or, à haute température et en appliquant les conversions à volume constant, on trouve $\rho_c \sim T^{-1,4}$ ce qui implique $\alpha = 0,7$ [30] ou encore $K_\rho = 0,22$, valeur très proche de celles trouvées précédemment.

Cependant, en baissant la température, on observe un changement de régime d'abord pour ρ_a qui retrouve un comportement quadratique vers 150 K ce qui peut s'expliquer naïvement par l'émergence du terme t_b et une transition vers un état bidimensionnel liquide de Fermi ; puis, un maximum dans la courbe $\rho_c(T)$ apparaît à une température notée T_m de l'ordre de 80 K à pression ambiante.

Après la transformation à volume constant, on observe les dépendances en température suivantes selon les trois axes pour $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ à plus basse température [10, 30] :

$$\begin{aligned}\rho_a &\sim T^2 \\ \rho_b &\sim T \quad (T < 80 \text{ K}) \\ \rho_c &\sim T^{1,5}\end{aligned} \tag{I.12}$$

On a des comportements *qualitativement* différents selon la direction étudiée et, en particulier, il semble y avoir un transport incohérent diffusif dans la direction de moins bonne conduction. En outre, le rapport entre ρ_a et ρ_c dépend de la température et cela nous indique que l'anisotropie dans ces matériaux ne se résume pas à une réduction du transport dans certaines directions comme cela serait le cas dans un liquide de Fermi anisotrope, mais, au contraire, les mécanismes de conduction diffèrent selon les axes et il faut comprendre l'origine de cette différence de comportement.

Une première explication consiste à dire que la transition d'un état liquide de Luttinger vers un état bidimensionnel se produit pour une température $T_m \sim t_b$, ce qui est en bon accord. Par contre, la dépendance en pression de T_m est bien plus importante que celle de t_b et il faut donc proposer une autre explication. Comme nous l'expliquons plus loin, les fortes interactions présentes sur les chaînes sont responsables d'une

renormalisation du terme de saut et il faut donc considérer ce nouveau critère [33, 34]

$$T_m \sim t_b^* = t_a(t_b/t_a)^{1/(1-\alpha)}. \quad (\text{I.13})$$

En prenant la valeur de α déduite de nombreuses expériences, on obtiendrait T_m de l'ordre de 10 K en complet désaccord avec les observations. Dans cette thèse, nous allons essayer de mieux comprendre la renormalisation du couplage interchaîne du fait des interactions afin de proposer une explication à ce désaccord.

Conductivité optique longitudinale

La conductivité optique est très utile dans l'obtention des paramètres soit de bande, soit d'interactions. Expérimentalement, on peut soit procéder par photoréflexion, soit par transmission puisque la réflectivité et la conductivité peuvent être reliés l'une à l'autre par une transformation de Kramers-Kronig [2]. Du point de vue théorique, on se place dans le cadre de la réponse linéaire et la conductivité est alors donnée par la fonction d'autocorrélation de l'opérateur courant. En outre, il n'y a pas les problèmes de variations de volume rencontrés dans les mesures de résistivité.

Les mesures de réflectivité effectuées sur $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ permettent en premier lieu de calculer de manière indépendante les valeurs des intégrales de saut dans ce composé et un excellent accord est trouvé [36] avec les estimations des calculs de chimie quantique. Toutefois, cette conductivité présente des caractéristiques inhabituelles (figure I.11) : premièrement, le poids à fréquence nulle (pic de Drude) ne représente que 1% du poids total [36, 35] ; deuxièmement, on ne peut pas expliquer le comportement en fréquence par une formule de Drude, même modifiée [36]. En première approximation, une approche s'appuyant sur la théorie unidimensionnelle du liquide de Luttinger semble rendre compte de ces phénomènes mais la compréhension de tous les résultats n'est pas encore quantitative et nécessite probablement de tenir compte du couplage interchaîne.

Dans le régime unidimensionnel, on peut appliquer la même approche que pour le calcul de la résistivité en considérant l'effet des termes *Umklapp* sur un gaz d'électrons soit demi-rempli, soit quart-rempli et on obtient la relation suivante entre le comportement de la résistivité en température et celui de la conductivité en fréquence

$$\sigma(\omega) \sim \omega^{-\nu} \quad \rho(T) \sim T^{2-\nu}.$$

Effectivement, les différents sels de Bechgaard ont un comportement *universel* en loi de puissance (voir la figure I.12) et, à l'aide d'un ajustement, on en déduit la valeur du paramètre de Luttinger : en considérant un système demi-rempli, $K_\rho = 0,92$ alors qu'un système quart-rempli conduit à $K_\rho = 0,23$ qui est en bien meilleur accord avec les autres expériences.

Ainsi, une interprétation en termes d'isolant de Mott dopé semble satisfaisante mais il reste à comprendre pourquoi le pic de Drude contient si peu de poids et le rôle exact de la dimérisation existant dans ces composés qui, même si elle est moins importante que dans les composés au soufre, pourrait rendre compte des expériences [37]. Le problème de savoir si ces composés sont décrits par des modèles quart-remplis ou bien demi-remplis est donc toujours d'actualité.

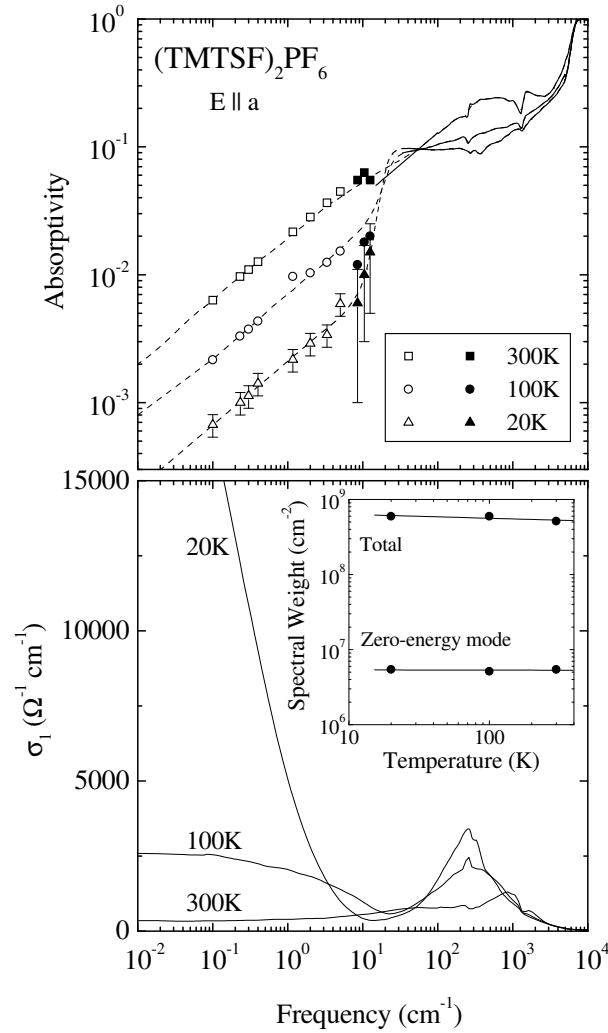


FIG. I.11 – Absorption et conductivité optique longitudinale en fonctions de la fréquence pour $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ à plusieurs température. En insert, le poids du pic de Drude comparé au poids total (figure extraite de la référence [35]).

Conductivité transverse

Dans la direction b, JACOBSEN *et coll.* ont les premiers mesuré l'anisotropie des sels de Bechgaard en observant l'apparition d'un transport cohérent sous 100 K avec un pic de Drude dans la direction perpendiculaire aux chaînes [38]. Cela conforte l'idée d'un régime de liquide de Fermi pour ces températures. En outre, l'obtention des intégrales de saut dans cette direction pour différents sels donne $t_b/t_a \simeq 0,1$ qui est en très bon accord avec les calculs de chimie quantique [12] et qui suggère que la transition dimensionnelle est gouvernée par la valeur nue de t_b et non celle renormalisée par les interactions t_b^* (I.13).

En ce qui concerne les sels $(\text{TMTTF})_2\text{X}$, la présence d'un gap de charge supérieur au couplage transverse rend celui-ci inopérant et les mesures de conductivité confirment cela puisqu'il n'y a pas de seuil plasma dans les directions b et c [39, 40].

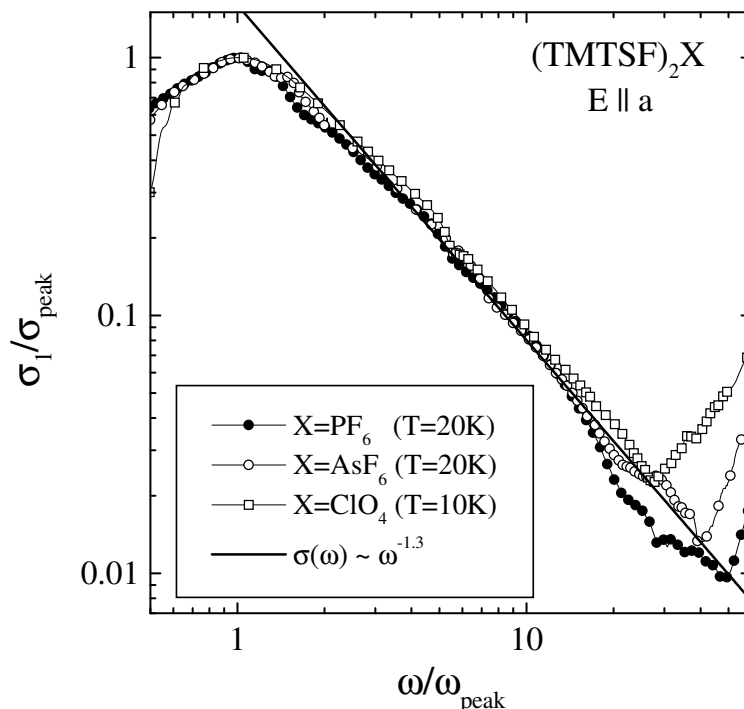


FIG. I.12 – Conductivité optique longitudinale tracée en fonctions de variables normalisées et en échelles logarithmiques pour plusieurs sels de Bechgaard. Le même comportement en loi de puissance est observé à haute énergie (figure extraite de la référence [35]).

vi) Magnétorésistance

Dans l'étude des composés anisotropes, l'ajout d'un champ magnétique peut être intéressant puisque cela réduit de manière effective la dimensionnalité de la surface de Fermi.

En particulier, pour des composés quasi unidimensionnels ou quasi bidimensionnels, l'existence d'une surface de Fermi ouverte implique qu'il n'existe pas d'orbites cyclotrons fermées susceptibles de produire du transport sous champ. La formation d'une ODS a été expliquée par GORKOV et LEBED [41] entre autres et nous rappelons brièvement l'argument.

La surface de Fermi est composée de deux feuillets déformés et il existe un emboîtement, même s'il n'est pas parfait, c'est-à-dire un vecteur \vec{Q} faisant coïncider une portion d'un feuillet avec une autre. Cette propriété permet d'expliquer la formation d'une onde de densité puisque la susceptibilité correspondante diverge quand on la calcule avec une approximation de phase stationnaire (RPA en anglais). Cet emboîtement est également à l'origine de la formation de petites poches de porteurs qui engendrent des orbites fermées responsables des propriétés de transport magnétique. En effet, la quantification des niveaux de Landau impose la valeur de \vec{Q} en fonction du champ; ainsi, en variant le champ, on modifie le vecteur de l'ODS et on assiste à une cascade de transitions entre plusieurs ODS (on consultera [42] par exemple pour des références

sur ce vaste sujet).

Dans la phase métallique, les effets du champ magnétique sont également significatifs et nous allons présenter successivement les différentes expériences selon l'orientation du champ et les effets qu'elles induisent c'est-à-dire les structures qui apparaissent en fonction de cette orientation.

Résonances de Lebed

Ce premier effet angulaire se produit lorsque le champ magnétique se situe dans le plan perpendiculaire aux chaînes (bc). Il a été prédit par LEBED [43, 44] et est appelé *effet d'angle magique* puisque un tel champ va introduire deux pulsations caractéristiques selon les axes b et c et, pour certains angles dits magiques, ces périodes vont être commensurables et le mouvement des électrons va donc devenir périodique. Cet effet de commensurabilité a effectivement été observée pour les sels de Bechgaard (voir la figure I.13).

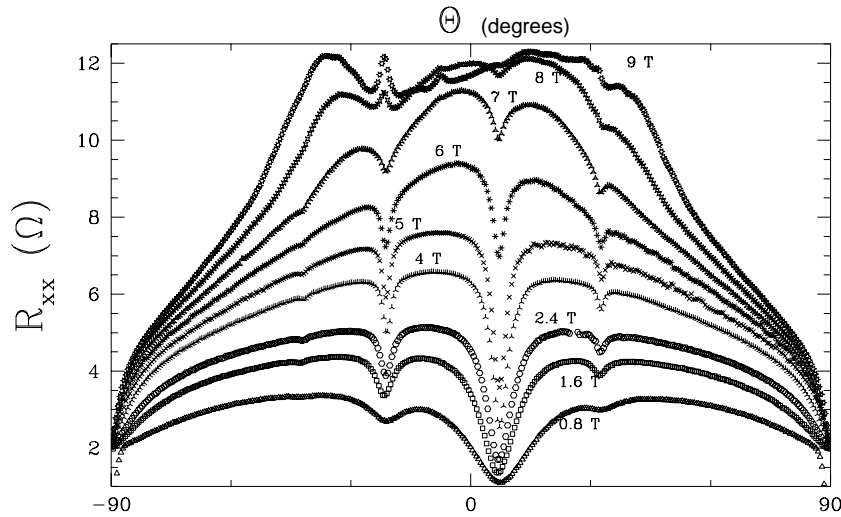


FIG. I.13 – Magnétorésistance de $(TMTSF)_2PF_6$ en fonction de l'orientation du champ magnétique (θ est l'angle entre le champ et l'axe c). On observe clairement les effets d'angle magiques (d'après [45]).

Par contre, on observe également une très forte anisotropie (figure I.13) puisque lorsque le champ magnétique est selon b, il n'y a quasiment pas de magnétorésistance alors qu'un champ selon c en produit une colossale. Ces phénomènes ne peuvent pas être interprétés par la structure de bandes de ce composé [45] et de nombreuses explications ont été proposées [46, 47]. STRONG, CLARKE et ANDERSON suggèrent qu'un champ magnétique transverse H_b renforce l'incohérence et, pour certaines valeurs, peut renormaliser t_c à 0 [47]. Or, dans l'hypothèse où les plans seuls possèdent un fondamental qui n'est pas un liquide de Fermi, ces auteurs proposent qu'un champ magnétique peut découpler les plans et nous permettre ainsi d'observer une physique nouvelle.

Les expériences mentionnées ci-dessus ainsi que [48] trouvent une interprétation

naturelle dans ce cadre, et, de surcroît, la présence d'un état bidimensionnel différent d'un liquide de Fermi permettrait d'expliquer à la fois le fait que les quantités mesurées ne dépendent que de la composante transverse aux plans ab (comme si ces plans étaient effectivement découplés, voir la figure I.14) ainsi que les exposants anormaux qui interviennent dans les lois d'échelle et qui ne sont pas compatibles avec un liquide de Fermi [48]

$$\Delta\rho_{xx} \sim H_{\perp}^{1/2} \quad \Delta\rho_{zz} \sim H_{\perp}^{3/2}$$

où H_{\perp} est la composante du champ perpendiculaire aux plans ab. On peut noter que si le champ magnétique est colinéaire à l'axe c, t_c ne va pas être renormalisé et le système va garder un comportement tridimensionnel, sans loi d'échelle ni comportement anormal.

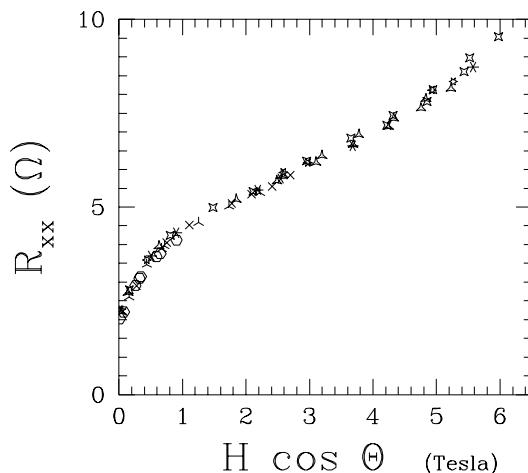


FIG. I.14 – Variation de la magnéto-résistance de $(TMTSF)_2PF_6$ selon x en fonction de la composante normale aux plans ab du champ magnétique pour plusieurs valeurs du champ et de l'orientation. On observe une très bonne loi d'échelle (figure extraite de la référence [47]).

Ces auteurs prétendent que cet effet, qui est également observé pour des champs situés dans le plan ac [48], est en faveur d'un comportement incohérent suivant la direction c mais MCKENZIE et MOSES soutiennent que cet effet angulaire s'explique aussi bien dans le cadre d'un transport transverse cohérent que incohérent, et donc que cette expérience ne permet pas de trancher [49]. Toutefois, il existe une différence entre les deux interprétations lorsque l'on place le champ magnétique dans une direction voisine de celle des chaînes. Dans ce cas, seule la théorie du transport cohérent est capable d'expliquer les pics observés expérimentalement dans $(TMTSF)_2ClO_4$ [50, 51].

En conclusion sur cet effet angulaire, une théorie semi-classique s'appuyant sur une surface de Fermi tridimensionnelle semble expliquer les observations; toutefois, il est certain que l'ajout d'un champ magnétique permet de modifier la dimensionnalité du système étudié et il n'est pas exclu d'obtenir de nouvelles informations sur les effets de couplages interchaînes par ces méthodes.

Troisième effet angulaire

Enfin, la dernière géométrie consiste à placer le champ magnétique dans le plan le plus conducteur. D'ailleurs, ce type d'expérience est plutôt destiné à l'étude des composés quasi bidimensionnels mais elle a donné des résultats intéressants pour le composé $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ [52] puisque la structure mesurée s'interprète également comme un effet semi-classique dû à la topologie de la surface de Fermi des systèmes quasi unidimensionnels.

vii) Conclusion sur les sels de Bechgaard

Les composés organiques présentent indubitablement des propriétés physiques différentes de celles d'un liquide de Fermi et il est tentant de les expliquer dans le cadre de la théorie du liquide de Luttinger qui est la théorie effective de basse énergie en une dimension. Malheureusement, même si un accord qualitatif existe, la compréhension quantitative des résultats n'est toujours pas satisfaisante. Il semble toutefois émerger de plusieurs expériences que le paramètre K_ρ caractérisant la force des interactions soit très petit, de l'ordre de 0,2 (c'est-à-dire que les interactions sont très fortes ou bien à longue portée).

L'autre débat soulevé par ces expériences concerne le changement de dimensionnalité en fonction de la température. Nous avons rappelé que le critère de pertinence du couplage interchaîne faisait intervenir une intégrale de saut effective renormalisée par les interactions (voir l'équation (I.13)). Or, en injectant la valeur de K_ρ citée précédemment, on prédit une température typique de l'ordre de 10 K qui est bien trop faible pour rendre compte des observations de résistivité mais qui concorde avec les mesures de RMN. Bien sûr, il ne s'agit pas d'une transition abrupte mais plutôt d'un changement de régime et on peut essayer de réconcilier les résultats en invoquant des préfacteurs numériques mais nous allons voir que plusieurs données expérimentales ne semblent pas consistantes avec un t_b renormalisé.

Un grand nombre de mesures permettent de définir une énergie caractéristique d'un gap. Pour les composés au soufre, il s'agit du gap de charge, et pour les sels métalliques on distingue une structure en plus du pic de Drude. Ce gap de corrélation est consistant avec les mesures optiques, celles de résistivité, les estimations de la constante diélectrique à 100 GHz ($\varepsilon = 1 + (\omega_p/E_{\text{gap}})^2$, ω_p étant la fréquence plasma) et les données de photoémission. Sur la figure I.15, le gap de corrélation est tracé pour différents composés (ce qui revient à modifier la pression chimique) et en fonction de la pression appliquée. Sur la même figure, les auteurs ont tracé la variation des intégrales de saut t_b en fonction de la pression.

Il ressort de cette figure que la transition métal-isolant se produit lorsque $t_b \simeq E_{\text{gap}}$ et, par conséquent, les expériences suggèrent qu'il faut utiliser la valeur du couplage *nue* tandis que les études théoriques montrent que c'est la valeur *effective* qui intervient.

Nous discuterons plus en détail ce paradoxe au cours de cette thèse mais pour l'instant, nous présentons d'autres systèmes quasi unidimensionnels susceptibles de faire avancer notre compréhension de la physique des liquides de Luttinger.

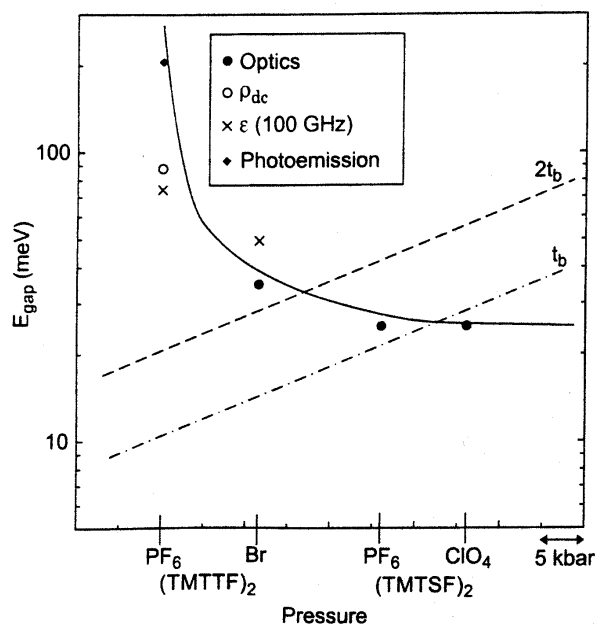


FIG. I.15 – Gap de corrélation estimé à partir des données optiques, de la résistivité, de la constante diélectrique ou encore de la photoémission en fonction des différents composés et de la pression appliquée. Les lignes hachurées indiquent la variation en pression de l'intégrale de saut selon b (figure extraite de la référence [40]).

2 Autres systèmes quasi unidimensionnels

2.1 Composés inorganiques

Des expériences de photoémission ont été réalisées pour d'autres composés inorganiques tels que $K_{0,3}MoO_3$ (« bronze bleu ») et $(TaSe_4)_2I$ [53].

Ils sont également quasi unidimensionnels puisque les rapports des résistivités selon les différents axes sont respectivement 1:20:2000 et 1:10. Ils possèdent également tous les deux une transition de type Peierls typique en une dimension vers une Onde de Densité de Charge au-dessous de 190 K et 300 K respectivement.

Les résultats des expériences montrent l'absence d'un quelconque saut au niveau de Fermi alors qu'une telle marche existe dans des composés bidimensionnels qui sont des liquides de Fermi [53] (figure I.16).

Cet effet s'explique bien dans le cadre de la théorie du liquide de Luttinger pour des systèmes électroniques unidimensionnels (voir (I.10)). Cependant, ces résultats suggèrent un comportement du type Luttinger sur un domaine de fréquence très supérieur à celui auquel on s'attendrait (en effet, la théorie du liquide de Luttinger est supposée être valide à basse énergie seulement) et on peut adresser les mêmes critiques que dans le cas des composés organiques.

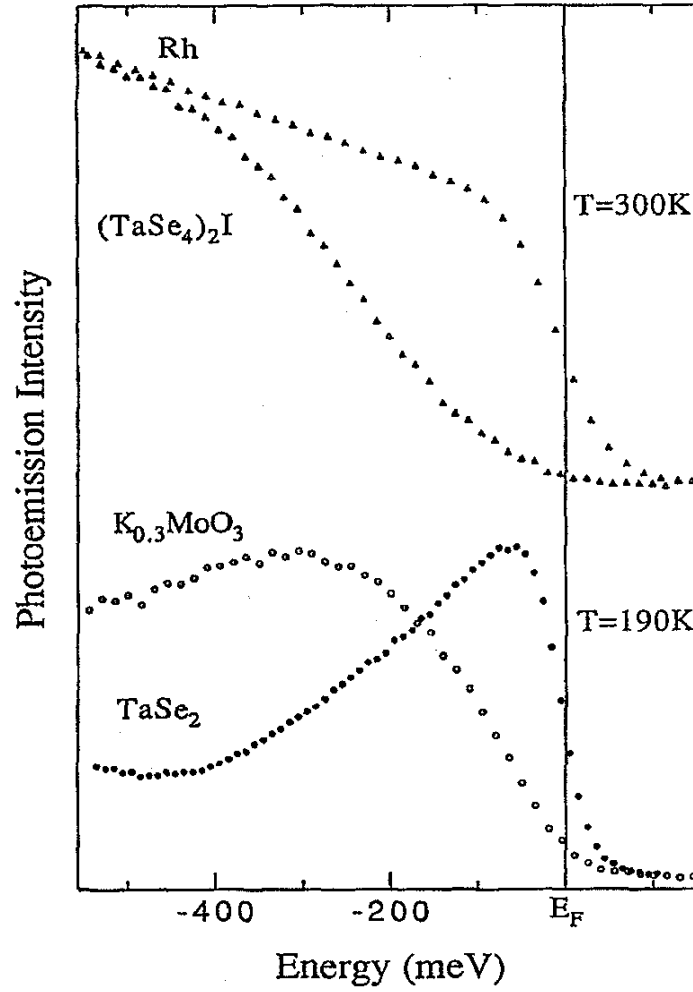


FIG. I.16 – Spectres de photoémission obtenus sur des composés quasi unidimensionnels $K_{0,3}MoO_3$ et $(TaSe_4)_2I$. À titre de comparaison, les spectres de photoémission de Rh (tridimensionnel) et de $TaSe_2$ (bidimensionnel) sont tracés. On voit que les composés unidimensionnels ne présentent pas de saut au niveau de Fermi. D'après DARDEL et coll. [53].

Test quantitatif

Bien que ces résultats suggèrent fortement que la phase métallique de ces composés n'est pas un liquide de Fermi, il apparaît difficile d'interpréter les données de manière quantitative.

Ainsi, NAKAMURA *et coll.* ont proposé d'interpréter leurs données de photoémission obtenues sur $BaVS_3$ [54] à l'aide de la formule

$$\rho(E) = (E - E_0(T))^{\alpha(T)} \quad (I.16)$$

issue de la théorie du liquide de Luttinger (I.10). Cela permet d'interpréter les données avec un bon accord comme on le voit sur la figure I.17.

Malheureusement, les valeurs du paramètre α ainsi obtenues varient entre 0,71 à

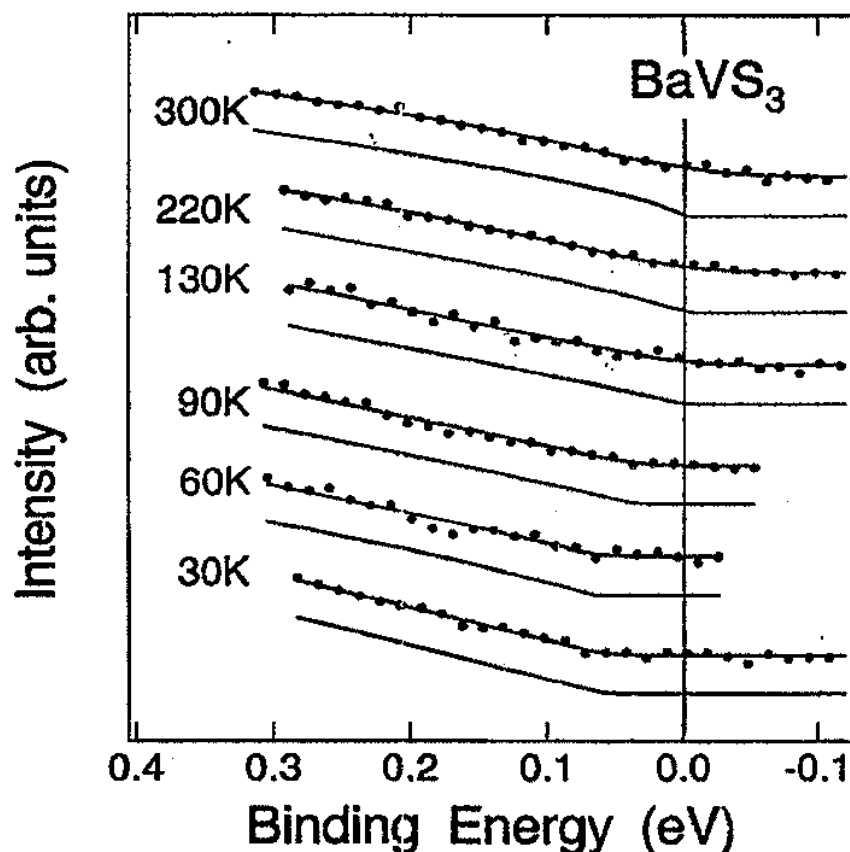


FIG. I.17 – Spectres de photoémission obtenus avec $BaVS_3$. Les points sont les données expérimentales, les lignes en traits pleins un ajustement par une formule déduite de la théorie du liquide de Luttinger (I.16). D'après NAKAMURA et coll. [54].

300 K et 0,85 à 130 K ce qui est très élevé et peut difficilement être expliqué de manière quantitative par un modèle avec une interaction écrantée de type Hubbard pour lequel la valeur de α ne peut excéder $1/8$.

Ainsi, même si les composés quasi unidimensionnels sont de bons candidats pour des phases différentes du liquide de Fermi, on ne peut pas expliquer quantitativement leurs propriétés par une théorie purement unidimensionnelle. Il apparaît donc crucial de pouvoir prendre en compte le couplage résiduel interchaîne pour comprendre la physique de ces matériaux.

2.2 Les fils quantiques

À l'aide de technique similaires à celles qui permettent d'obtenir un gaz d'électrons bidimensionnel, on peut depuis quelques années réaliser, par lithographie d'électrons ou de rayons X, des structures unidimensionnelles de quelques dizaines de nanomètres de largeur. Puisque cette largeur est de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi des électrons de conduction, on fabrique ainsi un gaz d'électrons unidimensionnel [55].

Ces dispositifs ont permis d'étudier les fluctuations universelles de conductance mais le comportement oscillatoire observé dans la conductance signale que ces systèmes sont

sensibles au désordre [55]. Il faut donc, pour les analyser, pouvoir traiter simultanément les effets d'interaction et de désordre en une dimension et nous renvoyons à [56] pour les références sur le sujet.

Là encore, il s'agit de bons candidats pour illustrer la physique unidimensionnelle mais cependant, la complexité est encore très grande puisque les effets de désordre sont importants ainsi que la possible présence d'interactions coulombiennes à longue portée [57]. En effet, même si certaines expériences peuvent s'interpréter en termes d'un exposant anormal K_ρ (comme, par exemple, la conductance qui varie en loi de puissance avec la température ou bien les caractéristiques courant-tension qui sont non linéaires), il n'existe pas d'autre confirmation indépendante pour ce paramètre.

2.3 Les nanotubes de carbone

Les nanotubes de carbone possèdent des diamètres de quelques distances atomiques alors que leur longueur peut atteindre plusieurs microns : ce sont des réalisations quasiment idéales de fils métalliques. Ils ont été synthétisés au début de cette décennie et intéressent autant les industriels que les physiciens de par leurs propriétés (on consultera [58] pour une revue).

Comparés aux fils quantiques formés par des hétérostructures et décrits précédemment, ces nanotubes possèdent d'énormes avantages : outre leur meilleure unidimensionnalité, ils peuvent être très propres et dopés. Les nanotubes isolés sont les meilleurs systèmes pour comprendre les propriétés électroniques.

Des expériences récentes montrent un effet de blocage coulombien pour un tube [59]. Cela conduit à des modélisations prenant en compte à la fois le caractère unidimensionnel et les interactions coulombiennes [60, 61]. On s'attend donc à des déviations fortes au comportement de liquide de Fermi : lois de puissance non linéaires de la résistivité avec un exposant non trivial etc.

Il est probable que ce domaine d'étude va se développer rapidement.

2.4 Les états de bord de l'effet Hall quantique

Parmi tous les systèmes mentionnés précédemment, l'existence d'une réalisation expérimentale d'un liquide de Luttinger n'est pas complètement établie. Les effets qui ne sont pas pris en compte sont d'une part le couplage entre les sous-systèmes purement unidimensionnels que nous étudions dans cette thèse et, d'autre part, les effets du désordre qui peuvent être très importants [56]. Or, il existe un système expérimental qui ne présente aucun de ces problèmes : les états de bord dans un liquide de Hall fractionnaire.

En effet, WEN a montré que ces états pouvaient être décrits par un modèle de Luttinger chiral, c'est-à-dire ne présentant qu'un type de fermions [62]. Cette propriété de chiralité implique qu'il n'existe pas de diffusion vers l'arrière et, par conséquent, les effets du désordre ne font que renormaliser certaines constantes sans modifier la physique. L'autre avantage énorme de ces systèmes est que la valeur du paramètre de Luttinger K_ρ est fixée par le remplissage ($K_\rho = \nu$) et donc on peut comparer les résultats expérimentaux aux prédictions théoriques sans avoir aucun paramètre ajustable.

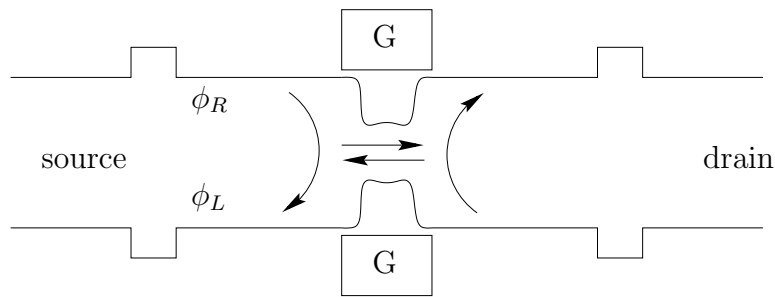


FIG. I.18 – Représentation schématique d'une barre de Hall dans laquelle sont placées des grilles G formant une constriction qui peut permettre aux charges soit d'être transmises par effet tunnel, soit d'être réfléchies.

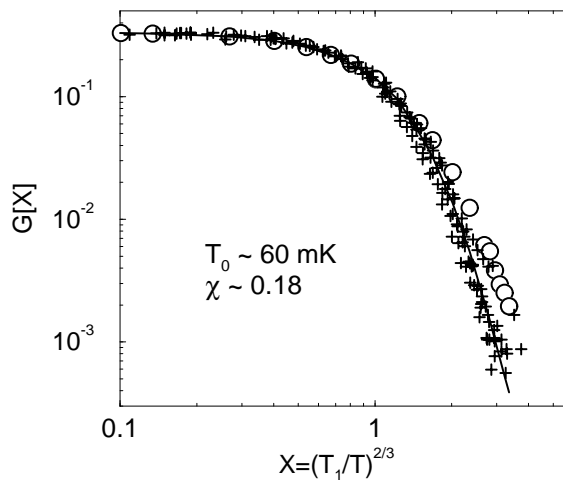


FIG. I.19 – Comportement de la conductance d'une constriction de Hall en fonction de la température pour un remplissage $\nu = 1/3$. Les données expérimentales (+) [63] sont confondues avec les résultats de simulations Monte-Carlo effectuées à partir d'une approche de type liquide de Luttinger (figure extraite de la référence [64]).

Effectivement, MILLIKEN *et coll.* ont mesuré la conductance dans une constriction d'un système de Hall avec un remplissage $\nu = 1/3$ [63] (voir le schéma I.18) qui s'interprète très bien par une théorie issue du liquide de Luttinger en incluant les effets d'interaction coulombienne à longue portée pour rendre compte des mesures à basse température [65, 64] (voir la figure I.19).

D'autres résultats sont encore compatibles avec la théorie du liquide Luttinger [66] : la conductance varie en T^4 pour un composé à $\nu = 1/3$ [63] etc.

3 Les supraconducteurs à haute température critique

3.1 Propriétés physiques

Depuis la découverte en 1986 par BEDNORZ et MÜLLER d'un composé à base d'oxyde de cuivre qui présentait des transitions vers des phases supraconductrices à des températures étonnamment élevées par rapport à celles d'autres matériaux [67], l'étude tant théorique qu'expérimentale de cette famille de composés a subi un véritable essor. Ainsi, de nombreux matériaux nouveaux ont été synthétisés et trouvent des applications aussi bien dans le monde de l'industrie que dans celui de la recherche. En effet, la propriété commune à ces composés est de contenir des plans CuO_2 faiblement couplés dans lesquels existent de fortes corrélations électroniques⁴. Cette propriété de basse dimensionnalité a naturellement relancé la discussion quant aux effets des corrélations dans ces systèmes que nous discutons dans cette thèse.

Il est maintenant bien établi que les phases normales des composés sous-dopés ou bien optimalement dopés ne correspondent pas à des liquides de Fermi. On peut citer par exemple le fait que les propriétés dans la phase normale de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ vis-à-vis de la conductivité sont métalliques dans les plans et non métalliques perpendiculairement aux plans [68]. De la même manière, on observe un comportement métallique dans les plans mais une conductivité typique d'un isolant dans la direction perpendiculaire pour les composés $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ et $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ [69].

Les expériences de conductivité optique perpendiculairement aux plans sont tout aussi troublantes puisqu'il n'existe pas de poids à fréquence nulle (pic de Drude) tant dans $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ [70] que dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [71].

La dépendance en température des propriétés transverses est également très forte au voisinage de la température critique alors que les calculs de chimie quantique estiment la valeur de l'intégrale de saut dans cette direction à 2000 K [72].

Le temps de vie des excitations s'annule linéairement au voisinage du niveau de Fermi ce qui se traduit par l'instabilité des quasi-particules de la théorie de Landau du liquide de Fermi, ou, plus formellement, un poids de quasi-particule $Z = 0$. Cette propriété d'un taux de diffusion inélastique est observée par des mesures infrarouges, de spectroscopie Raman et de photoémission résolue en angles (ARPES) (voir [73] par exemple pour une revue des résultats expérimentaux).

Enfin, la résistivité transverse semble se comporter en loi de puissance en accord avec le résultat de la règle d'or de Fermi pour des liquides de Luttinger couplés [32] (voir l'équation (I.11)).

3.2 Interprétation théorique

Il n'existe toujours pas de théorie satisfaisante rendant compte de tous les phénomènes mais il apparaît certain qu'on a affaire à un nouveau type de métal. En effet, comme nous allons le voir dans cette thèse, dans les composés fortement corrélés, les valeurs des intégrales de saut peuvent être très fortement renormalisées par rapport aux calculs *ab initio* du fait des fortes interactions. Cependant, dans le cas présent,

4. les composés purs sont des isolants de Mott du fait des interactions.

l'existence d'un couplage entre les plans même faible devrait conduire à la présence d'un pic de Drude. Il faut donc imaginer un état dans lequel le transport cohérent serait confiné dans les plans tandis que les électrons ne le seraient pas [74, 75].

Une explication possible avancée par ANDERSON [73] serait de considérer un état bidimensionnel qui ne possède pas de quasi-particules (une sorte d'analogie du liquide de Luttinger en deux dimensions) et, du fait des interactions fortes présentes dans les plans de ces matériaux, le couplage transverse pourrait être renormalisé à 0 suivant le même mécanisme qu'on sait exister en une dimension. Ainsi, on aurait un état différent du liquide de Fermi avec éventuellement des comportements des quantités physiques en lois de puissance avec des exposants non triviaux et, en particulier, cela expliquerait la différence qualitative observée entre le transport dans les plans et entre les plans. Toutefois, cette hypothèse nécessite de mettre en évidence un analogue du liquide de Luttinger pour un modèle bidimensionnel ce qui reste très difficile à faire avec des interactions réalistes.

Par contre, ce scénario s'appuie sur l'analogie qui existe avec des chaînes couplées pour lesquelles le problème est très bien posé et n'est toujours pas résolu. Nous allons dans cette thèse travailler dans ce cadre-là mais on peut espérer qu'une meilleure compréhension dans la physique des systèmes fortement corrélés et faiblement couplés pourra permettre d'orienter les recherches visant à comprendre la physique des supraconducteurs à haute température critique.

Chapitre II

Approche théorique des systèmes unidimensionnels

Dans ce chapitre, nous introduisons les principales méthodes théoriques qui traitent des fermions fortement corrélés à une dimension. Après avoir rappelé l'origine de l'instabilité du gaz d'électrons en une dimension, nous traitons le modèle soluble de Tomonaga-Luttinger qui est un hamiltonien de fermions sans spin relativistes avec des interactions à courte portée. La réécriture en termes des opérateurs de densité permet de résoudre ce modèle et il s'agit de la base de la technique de bosonisation. Nous mentionnons alors les cas des spins localisés ainsi que des fermions avec spin pour lesquels se produit le phénomène de séparation des modes de spin et de charge.

Nous exposons alors la notion de liquide de Luttinger introduite par HALDANE qui décrit tout système unidimensionnel en interactions possédant un spectre d'excitations linéaire sans gap. Il s'agit de l'analogue unidimensionnel du liquide de Fermi en trois dimensions. Nous soulignons que cette phase se caractérise par deux paramètres pour chaque mode : la vitesse u et un exposant K caractérisant les exposants de toutes les fonctions de corrélation (ce sont les analogues respectifs de la vitesse de Fermi et des coefficients de Landau pour le liquide de Fermi). En outre, ces quantités sont reliées simplement à des quantités thermodynamiques faciles à calculer tant analytiquement pour des modèles intégrables que numériquement pour n'importe quel hamiltonien microscopique.

Enfin, nous montrons brièvement la méthode du groupe de renormalisation qui permet d'analyser l'effet des perturbations sur le liquide de Luttinger et nous discutons le cas du liquide de Luther-Emery qui constitue un autre point fixe du gaz d'électrons.

1 Le paradigme du liquide de Fermi

Les propriétés macroscopiques de la majorité des métaux ont des comportements complètement analogues à ceux que l'on attendrait pour un gaz d'électrons sans interactions hormis certains préfacteurs numériques. Ce « miracle » a été compris par LANDAU [1, 18] et c'est ce qui est dénommé par *liquide de Fermi*.

1.1 Généralités sur le liquide de Fermi

En effet, les propriétés macroscopiques des solides ne vont dépendre que des excitations sur des échelles d'énergie, c'est-à-dire de température, très petites devant l'énergie de Fermi (typiquement de l'ordre de quelques eV). Par conséquent, on peut décrire ces excitations élémentaires comme des états dans lesquels des paires particules-trous sont excitées par rapport au fondamental du système. Ces excitations qui sont parfaitement définies en l'absence d'interactions évoluent continûment quand les interactions sont branchées de manière adiabatique¹. Ce sont les quasi-particules qui possèdent les mêmes propriétés que les électrons mis à part des facteurs de renormalisation.

En continuant cette analyse, on prédit les mêmes comportements en température que pour un gaz d'électrons soumis à des interactions résiduelles, mais en introduisant cependant de manière phénoménologique une masse effective etc. D'un point de vue plus formel, dans le cas isotrope, la fonction de Green du système peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned}
 G(\vec{k}, \omega) &= \frac{1}{\varepsilon_0(\vec{k}) - \omega - \Sigma(\vec{k}, \omega)} \\
 &= G_{inc}(\vec{k}, \omega) + \frac{Z_{\vec{k}}}{\omega - v(|\vec{k}| - k_F) + iu \operatorname{sgn}(|\vec{k}| - k_F)(|\vec{k}| - k_F)^2}
 \end{aligned}
 \tag{II.1}$$

où nous avons linéarisé le spectre des excitations au voisinage de la surface de Fermi.

1.2 Échec du liquide de Fermi en une dimension

Pour clarifier les idées, nous considérons le cas d'un gaz d'électrons sur réseau avec des termes de saut entre premiers voisins (modèle dit des liaisons fortes) et une interaction vers l'avant g . La relation de dispersion en l'absence d'interactions s'écrit : $\varepsilon(k) = -2t \cos(k)$ où t est l'amplitude du saut.

Après avoir mis en évidence l'importance des excitations particule-trou dans la physique de basse énergie d'un gaz d'électrons, il est temps de s'intéresser au cas particulier de la dimension un. En effet, alors qu'en dimension plus élevée, il existe de telles excitations pour des valeurs arbitraires de l'impulsion et de l'énergie, une des particularités de la dimension un est de contraindre les valeurs possibles (voir la figure II.1).

De surcroît, à une dimension, la « surface » de Fermi qui se résume aux deux points de Fermi possède une propriété dite d'emboîtement parfait, c'est-à-dire qu'il existe un vecteur \vec{q} égal à $2k_F$ (où k_F est le vecteur d'onde de Fermi) qui fait correspondre deux parties de cette surface avec la propriété suivante

$$\varepsilon(k + q) = -\varepsilon(k).$$

Il en résulte une divergence logarithmique des bulles de polarisation à basse fréquence et, par conséquent, une approximation de phase aléatoire prédirait la formation d'une Onde de Densité de Spin ou de Charge selon le signe de l'interaction. On voit une fois de plus que les systèmes unidimensionnels sont très enclins aux brisures de symétrie

1. Cette hypothèse exclut toute brisure de symétrie ou autre transition de phase.

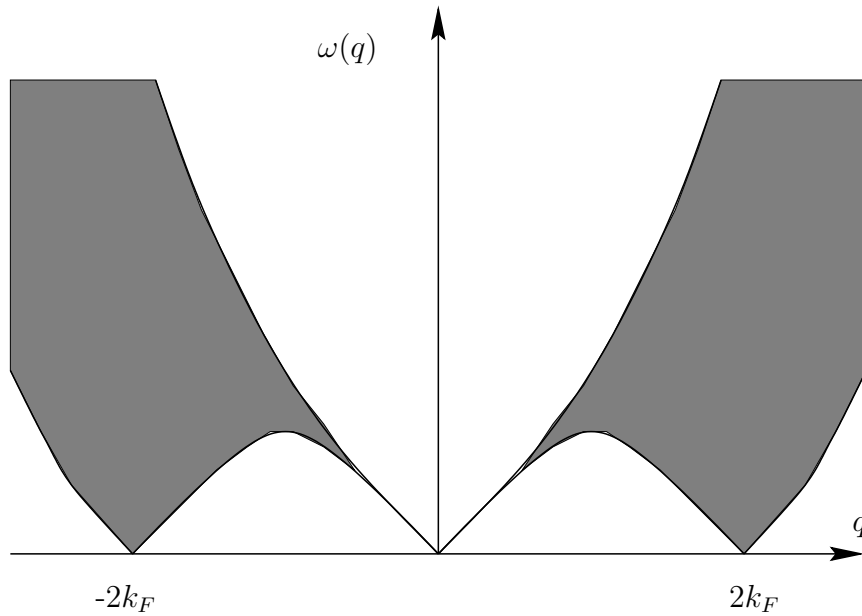


FIG. II.1 – En grisé, domaine d'existence des paires particule-trou en fonction de l'impulsion et de l'énergie en une dimension. Contrairement à ce qui arrive en dimension plus élevée, il n'existe pas d'excitations de basse énergie pour tous les vecteurs d'onde mais seulement pour q proche de 0 et $2k_F$.

et ce mécanisme d'instabilité a été découvert par PEIERLS [5]. Bien entendu, en vertu du théorème de MERMIN-WAGNER [3] qui stipule qu'il ne peut pas exister de brisure de symétrie en une dimension même à température nulle, ces transitions prédites au niveau du champ moyen vont être détruites par les fluctuations quantiques ; par contre, un couplage interchaîne, même infime, suffit à produire une vraie transition de phase à température finie.

Essayons de calculer les corrections à la fonction de Green aux premiers ordres en perturbation. Les techniques diagrammatiques standards [76] ramènent ce problème à l'évaluation de la *self-énergie* Σ qui est la somme de tous les diagrammes connexes (figure II.2). En outre, pour les propriétés de basse énergie qui nous intéressent, on peut linéariser la relation de dispersion au voisinage des points de Fermi.

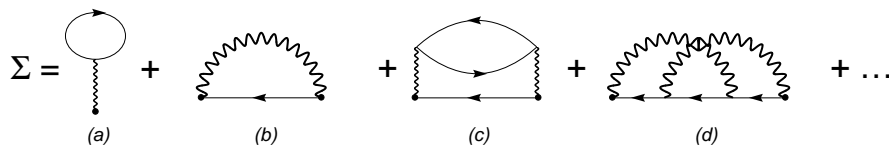


FIG. II.2 – Diagrammes de self-énergie jusqu'à l'ordre deux. Les lignes en trait plein sont des fonctions de Green sans interaction, les lignes ondulées représentent l'interaction g .

Pour des états de spin initiaux et finals identiques, les termes de Hartree (a) et de Fock (b) se compensent exactement à basse énergie. Pour des états de spin différents,

les diagrammes (b) et (d) n'existent pas, le diagramme (a) donne une constante qui renormalise le potentiel chimique et il reste à calculer (c).

La fonction de Green totale s'écrit d'après l'équation de Dyson [76]

$$G^{-1}(k, \omega) = G_0^{-1} - \Sigma = (\omega - v_F(k - k_F)) - \Sigma(k, \omega) \quad (\text{II.3})$$

et ses pôles sont donnés par

$$\omega = v_F \left(1 \pm \frac{g}{\sqrt{8\pi}} \right) (k - k_F)$$

Ainsi, on a l'existence de deux pôles à cet ordre. En poussant le calcul aux ordres supérieurs, on s'aperçoit qu'il apparaît de plus en plus de pôles qui vont former un continuum comme on le verra avec la solution exacte.

Par conséquent, les interactions ne renormalisent pas le moment de Fermi, qui reste constant en vertu du théorème de Luttinger, mais brisent la structure en pôle simple de la fonction de Green. C'est un premier indice de l'échec du liquide de Fermi et de la séparation spin-charge que nous allons étudier en détail avec le modèle de Tomonaga-Luttinger.

2 Le modèle de Tomonaga-Luttinger

Comme nous l'avons suggéré à l'instant, les hypothèses conduisant à un liquide de Fermi sont mises en défaut en une dimension. Il faut donc trouver une nouvelle image pour comprendre le gaz d'électrons unidimensionnel. Pour cela, nous allons revenir sur un modèle ancien introduit dans les années 50 et 60 par TOMONAGA [77] et LUTTINGER [78] respectivement, et qui peut être résolu exactement : le modèle de Tomonaga-Luttinger.

2.1 Hamiltonien de Tomonaga-Luttinger

Ce hamiltonien peut s'obtenir comme la limite continue d'un modèle sur réseau de fermions sans spin unidimensionnels en interaction à courte portée, par exemple le modèle t-V

$$H = -t \sum_i (c_{i+1}^\dagger c_i + h.c.) + V \sum_i n_i n_{i+1} \quad (\text{II.5})$$

À basse énergie, la relation de dispersion des électrons dans un modèle de liaison forte peut être linéarisée au voisinage des points de Fermi. Ensuite, on prolonge chaque branche jusqu'à l'infini, ce qui ne doit pas modifier les propriétés de basse énergie, et cela nous ramène à l'étude de deux types de fermions qui se déplacent avec $\pm v_F = 2t \sin(k_F)$ (droits et gauches respectivement). Le terme cinétique se réduit alors à

$$H_0 = v_F \sum_k (k - k_F) a_k^\dagger a_k + (-k - k_F) b_k^\dagger b_k$$

où a et b représentent les deux types de fermions.

L'importance des excitations particule-trou nous incite à réécrire ce hamiltonien en fonction des opérateurs densité

$$\rho_+(q) = \sum_k a_{k+q}^\dagger a_k \quad \rho_-(q) = \sum_k b_{k+q}^\dagger b_k$$

qui vérifient les relations de commutation suivantes

$$\begin{aligned} [\rho_+(q), \rho_-(q')] &= 0 \\ [\rho_+(q), \rho_+(q')] &= -\frac{Lq}{2\pi} \delta_{q,q'} \\ [\rho_-(q), \rho_-(q')] &= \frac{Lq}{2\pi} \delta_{q,q'} \end{aligned}$$

où L désigne la longueur de la chaîne.

On peut dès lors calculer facilement les commutateurs de ces opérateurs et du hamiltonien cinétique

$$\begin{aligned} [H_0, \rho_+(q)] &= v_F q \rho_+(q) \\ [H_0, \rho_-(q)] &= v_F q \rho_-(q) \end{aligned}$$

et, à partir de ces relations et en remarquant que les opérateurs $\rho_+(q)$ et $\rho_-(-q)$ annihilent le fondamental lorsque $q > 0$

$$\rho_+(-q)|0\rangle = \rho_-(-q)|0\rangle = 0,$$

on montre que la partie cinétique s'écrit

$$H_0 = \frac{2\pi v_F}{L} \sum_{q>0} [\rho_+(q)\rho_+(-q) + \rho_-(-q)\rho_-(q)] \quad (\text{II.9})$$

Outre cette réécriture, on peut montrer que les fonctions de partition des bosons et des fermions sont identiques ce qui implique une totale équivalence entre les deux représentations. Jusqu'ici, on n'a considéré que le terme quadratique qui est soluble mais l'intérêt principal de cette transformation réside dans le fait qu'on va pouvoir introduire des interactions non triviales qui vont laisser le hamiltonien sous forme quadratique en terme d'opérateurs de boson, et donc toujours soluble.

2.2 Cas des interactions vers l'avant

On introduit des termes de diffusion vers l'avant $(k_F; -k_F) \rightarrow (k_F; -k_F)$ et $(k_F; k_F) \rightarrow (k_F; k_F)$ qui sont schématisés sur la figure II.3. Ces interactions s'écrivent en termes des opérateurs densité :

$$H_{int} = \frac{1}{2L} \sum_q 2g_2(q)\rho_+(q)\rho_-(-q) + g_4(q)[\rho_+(q)\rho_+(-q) + \rho_-(-q)\rho_-(q)]$$

Si nous sommes partis d'une interaction microscopique densité-densité, les paramètres g_2 et g_4 sont égaux, et si les interactions sont à courtes portées, on peut prendre les limites des coefficients de Fourier lorsque l'impulsion tend vers 0.

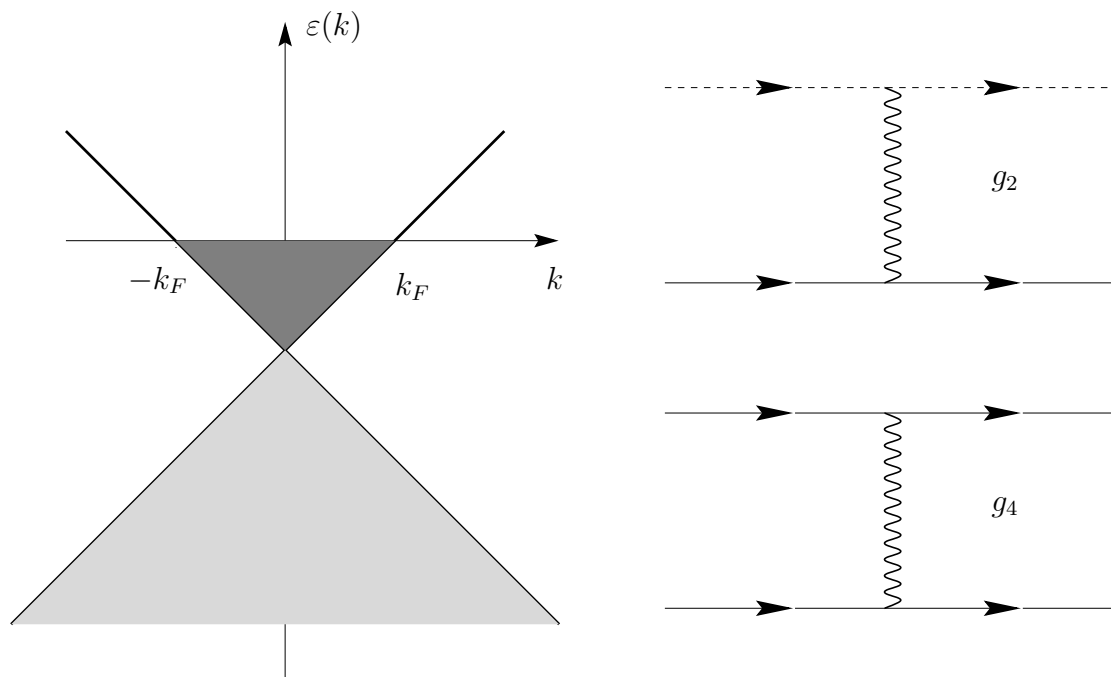


FIG. II.3 – À gauche : relation de dispersion et mer de Fermi pour le modèle de Tomonaga-Luttinger. À droite : les deux types d'interactions vers l'avant, des lignes différentes symbolisent des types de fermions différents.

Le hamiltonien global ainsi obtenu représente le modèle de Tomonaga-Luttinger et, puisqu'il est quadratique, il peut être résolu par une transformation de Bogoliubov. On obtient par exemple le spectre des excitations qui est linéaire si on oublie la dépendance en q des constantes de couplage et dont l'expression est

$$\omega(q) = |q|[(v_F + g_4(0)/(2\pi))^2 - (g_2(0)/2\pi)^2]^{1/2}. \quad (\text{II.11})$$

Les interactions ont pour seul effet de renormaliser la vitesse de phase des excitations élémentaires du système.

Pour aller au-delà et calculer des fonctions de corrélations, il faut compléter l'équivalence et exprimer les opérateurs fermioniques en fonctions d'opérateurs bosoniques. C'est ce qui est dénommé par la procédure de bosonisation.

3 Bosonisation

3.1 Bosonisation du modèle de Tomonaga-Luttinger

Dans cette partie, nous allons suivre la présentation faite par HALDANE [79] ainsi que les différentes revues sur le sujet [13, 80].

Nous allons introduire des opérateurs qui sont des combinaisons linéaires des opé-

rateurs de densité :

$$\phi(x) = -\frac{i\pi}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p} e^{-\alpha|p|/2 - ipx} [\rho_+(p) + \rho_-(p)] - N \frac{\pi x}{L} \quad (\text{II.12})$$

$$\Pi(x) = \frac{1}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p} e^{-\alpha|p|/2 - ipx} [\rho_+(p) - \rho_-(p)] + J/L \quad (\text{II.13})$$

Ces opérateurs sont conjugués et on montre à partir des relations de commutation des opérateurs densité qu'ils vérifient les relations de commutation canoniques

$$[\phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x - y) \quad (\text{II.14})$$

On a introduit dans ces définitions un paramètre de régularisation α pour obtenir des quantités bien définies ; il existe plusieurs méthodes pour régulariser cette théorie des champs comme la méthode *point-splitting*, l'introduction d'un paramètre de coupure, la procédure d'ordre normal etc. qui toutes donnent des résultats similaires [81]. Le schéma employé peut être justifié en rappelant que le modèle de départ est défini sur réseau et le paramètre de coupure α peut justement être pris égal à la maille du réseau.

Après les tentatives faites pour exprimer les opérateurs fermioniques en termes de ceux de densité [82] à l'aide de la formule

$$\psi_{\pm} = \exp\left(\int dq \frac{\rho_{\pm}(q)}{q} e^{iqx}\right)$$

qui ne vérifiaient pas les bonnes relations d'anticommutation, il a fallu attendre HALDANE [79] ainsi que HEIDENREICH *et coll.* [83] pour montrer de manière rigoureuse qu'on pouvait retrouver les bonnes relations d'anticommutation en introduisant des opérateurs de fermions de Majorana η_{\pm} tels que

$$\begin{aligned} \eta_+^2 &= \eta_-^2 = 1 \\ \eta_+ \eta_- + \eta_- \eta_+ &= 0 \end{aligned}$$

et en écrivant les opérateurs fermioniques à l'aide des champs bosoniques définis cidessus

$$\psi_{\pm}(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} U_{\pm} \exp[\pm ik_F x \mp i\phi(x) + i\theta(x)] \quad (\text{II.16})$$

dans laquelle les signes + et - se réfèrent aux fermions droits et gauches respectivement et où on a introduit une primitive du champ Π

$$\theta(x) = \pi \int^x \Pi(x') dx' = \frac{i\pi}{L} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{p} e^{-\alpha|p|/2 - ipx} [\rho_+(p) - \rho_-(p)] \quad (\text{II.17})$$

En outre, les opérateurs U réduisent le nombre de particules d'une branche de une unité puisque les opérateurs de boson conservent le nombre de particules et incluent les opérateurs de fermions de Majorana afin de donner les bonnes relations d'anticommutation. Cette formule est en réalité une identité d'opérateurs et elle va être très utile puisqu'elle permet de relier les approches fermioniques et bosoniques.

Par exemple, le hamiltonien global peut se réécrire en termes d'opérateurs bosoniques

$$H = \int \frac{dx}{2\pi} [uK(\pi\Pi(x))^2 + \frac{u}{K}(\partial_x\phi(x))^2] \quad (\text{II.18})$$

On reconnaît tout simplement le hamiltonien d'une chaîne élastique dont les modes propres correspondent à des modes collectifs d'ondes de densité de charge du liquide de fermions. En particulier, il n'y a pas d'excitations à une particule dans ce modèle. Avec le type d'interactions que l'on a choisi, on peut relier les paramètres u et K aux paramètres d'interactions microscopiques

$$u = [(v_F + g_4/(2\pi))^2 - (g_2/(2\pi))^2]^{1/2} \quad K = \left[\frac{2\pi v_F + g_4 - g_2}{2\pi v_F + g_4 + g_2} \right] \quad (\text{II.19})$$

où les paramètres d'interaction sont pris à impulsion nulle puisque l'on s'intéresse aux propriétés de basse énergie. Il faut noter que pour des interactions à longue portée, les transformées de Fourier sont singulières pour des impulsions nulles et cela donne lieu à un comportement différent que nous discuterons plus loin.

L'intérêt de ce modèle est bien sûr d'être soluble pour des interactions même très grandes. Par contre, la solution reste limitée à des interactions vers l'avant et on doit supposer que la relation de dispersion est strictement linéaire. Dans les années 80, HALDANE a montré par des arguments de groupe de renormalisation qu'en intégrant les degrés de liberté de haute énergie de n'importe quel système unidimensionnel de fermions en interaction, on aboutissait à un hamiltonien effectif du type (II.18) avec éventuellement des termes correctifs et avec des paramètres u et K qui ne peuvent être déduits que de la résolution globale des équations de renormalisation [79]. La présence de modes collectifs et plus généralement ce que l'on appelle le **liquide de Luttinger** est le comportement générique des systèmes unidimensionnels qui ne possèdent pas de gap. Cette conjecture s'appuie sur le comportement de modèles solubles par *Ansatz* de BETHE et a pu être vérifiée dans de nombreux problèmes grâce à des simulations numériques. Nous reviendrons sur ce point plus tard.

3.2 Bosonisation des spins 1/2

L'étude de chaînes de spins 1/2 couplées est également pertinente puisque, dans le cas du hamiltonien de Heisenberg, elle permet de comprendre un exemple de transition dimensionnelle entre un système critique unidimensionnel et un système bidimensionnel ordonné à température nulle. En outre, cette transition n'est pas du tout triviale puisque les propriétés physiques dépendent fortement du nombre de chaînes : on peut montrer rigoureusement qu'un système constitué d'un nombre impair de chaînes de spin 1/2 ne présente pas de gap alors que dans le cas d'un nombre pair, des études théoriques et numériques montrent l'ouverture d'un gap pour un couplage transverse arbitrairement petit. Enfin, de nombreux matériaux récemment synthétisés sont de très bonnes réalisations expérimentales de ces systèmes.

Là encore, la procédure de bosonisation permet d'obtenir des résultats et elle particulièrement simple pour des spins 1/2 puisque, comme l'ont montré JORDAN et WIGNER [84], un système de spins 1/2 unidimensionnels est équivalent à des fermions sans spins.

Écrivons le hamiltonien XXZ pour des spins qui est une généralisation du hamiltonien de Heisenberg pour des systèmes anisotropes

$$H = \frac{J}{2} \sum_i (S_{i+1}^+ S_i^- + h.c.) + J_z \sum_i S_{i+1}^z S_i^z \quad (\text{II.20})$$

La transformation de Jordan-Wigner consiste à remplacer les opérateurs de spin par des opérateurs de fermions en introduisant un terme supplémentaire qui donne les bonnes relations de commutation.

$$\begin{aligned} S_i^+ &= (-1)^i c_i^\dagger \exp\left(i\pi \sum_{j=0}^{i-1} c_j^\dagger c_j\right) \\ S_i^- &= (-1)^i \exp\left(-i\pi \sum_{j=0}^{i-1} c_j^\dagger c_j\right) c_i \\ S_i^z &= c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Elle transforme le hamiltonien de spin (II.20) en celui du modèle t-V (II.5) avec des paramètres

$$t = \frac{J}{2} \quad V = J_z \quad (\text{II.21})$$

La valeur nulle de l'aimantation se traduit par le demi-remplissage.

En remplaçant les opérateurs de fermions par leurs expressions bosoniques, on peut alors obtenir aisément les opérateurs de spin bosonisés

$$\begin{aligned} S^+(x) &= \frac{e^{-i\theta(x)}}{\sqrt{2\pi\alpha}} \left(e^{-i\pi x\alpha} + \cos(2\phi(x)) \right) \\ S^z(x) &= -\frac{1}{\pi} \partial_x \phi(x) + e^{i\pi x\alpha} \frac{\cos(2\phi(x))}{\alpha\pi} \end{aligned} \quad (\text{II.22})$$

Ces formules permettent alors de calculer par exemple les fonctions de corrélation comme nous allons le voir, et cela permet d'interpréter très bien les résultats expérimentaux ou numériques.

3.3 Bosonisation de fermions avec spin

Bien évidemment, il est possible d'appliquer cette procédure de bosonisation au cas physiquement intéressant des fermions avec spin. Dans ce cas, il existe en plus des interactions précédentes, des interactions du type $(k_F, s_1; -k_F, s_2) \rightarrow (-k_F, s_1; k_F, s_2)$ où s_1 et s_2 sont des états de spin différents. Toutefois, on peut encore écrire le hamiltonien sous la même forme :

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{k,\sigma} v_F(k - k_F) a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} v_F(-k - k_F) b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} \\
 &+ \frac{1}{L} \sum_{k_1, k_2, p} \sum_{\alpha, \beta} (g_{2\parallel} \delta_{\alpha, \beta} + g_{2\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) a_{k_1, \alpha}^\dagger a_{k_1 - p, \alpha} b_{k_2, \beta}^\dagger b_{k_2 + p, \beta} \\
 &+ \frac{1}{2L} \sum_{k_1, k_2, p} \sum_{\alpha, \beta} (g_{4\parallel} \delta_{\alpha, \beta} + g_{4\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) (a_{k_1, \alpha}^\dagger a_{k_2, \beta}^\dagger a_{k_2 + p, \beta} a_{k_1 - p, \alpha} + b_{k_1, \alpha}^\dagger b_{k_2, \beta}^\dagger b_{k_2 + p, \beta} b_{k_1 - p, \alpha}),
 \end{aligned} \tag{II.23}$$

où les coefficients g_2 et g_4 peuvent dépendre des états de spin et de l'impulsion transférée p .

Ce hamiltonien peut être réécrit en fonction des opérateurs densités et, de par sa forme quadratique, diagonalisé par une transformation de Bogoliubov. On trouve que les excitations élémentaires sont des modes collectif de spin et de charge se propageant avec des vitesses distinctes et des exposants K_σ et K_ρ dont les expressions correspondent aux formules (II.19) en remplaçant les coefficients g par

$$g_\rho = \frac{1}{2}(g_\parallel + g_\perp) \quad \text{pour le mode de charge} \tag{II.24}$$

$$g_\sigma = \frac{1}{2}(g_\parallel - g_\perp) \quad \text{pour le mode de spin} \tag{II.25}$$

En plus des exposants anormaux qui vont entrer dans les fonctions de corrélation, on observe le phénomène de séparation du spin et de la charge qui est souvent présenté comme une caractéristique de la physique unidimensionnelle. Or, il faut rappeler que le fait que ces deux types d'excitations aient des vitesses différentes est un résultat très général y compris en dimension plus élevée et pour un liquide de Fermi. Par contre, la propriété *essentielle* en une dimension est qu'il n'existe pas de quasi-particules permettant la désexcitation de ces modes collectifs.

Jusqu'à présent, les formules de bosonisation ont permis une réécriture du hamiltonien mais on aimerait pouvoir prendre en compte les processus négligés, tels que les diffusions « vers l'arrière » ou bien les processus *Umklapp* qui transfèrent des particules d'un point de Fermi à l'autre, afin de pouvoir aller au-delà du modèle de Luttinger vers des hamiltoniens plus réalistes. De manière générale, l'introduction de perturbations par rapport au modèle soluble va conduire à des termes supplémentaires dans le hamiltonien de la forme $\cos(m\phi + n\theta)$ et il est important de connaître leurs effets sur les propriétés physiques. Nous allons présenter les équations de renormalisation des constantes de couplage à l'ordre le plus bas.

3.4 Calcul des fonctions de corrélation

Nous allons nous concentrer sur le cas sans spin mais les mêmes méthodes peuvent être employées dans le cas avec spin.

Le hamiltonien en termes des variables bosoniques est quadratique (gaussien), il est donc possible de calculer *exactement* toutes les fonctions de corrélation comme,

par exemple, la fonction d'autocorrélation d'un opérateur quelconque mélangeant les variables ϕ et θ

$$\langle T_\tau e^{i(m\phi+n\theta)(x,\tau)} e^{-i(m\phi+n\theta)(0,0)} \rangle = e^{-mn\chi(x,\tau)} \left(x^2 + u^2\tau^2 \right)^{-\eta(m,n)/2} \quad (\text{II.26})$$

où T_τ désigne le produit ordonné dans le temps imaginaire de Matsubara τ et $\chi(x,\tau) = -i \operatorname{atan}(u\tau/x)$ est le spin conforme. La valeur moyenne est prise dans le fondamental puisqu'il s'agit du cas de la température nulle.

La première remarque est que ces fonctions de corrélation décroissent algébriquement ce qui est typique d'un comportement critique. Ce système va être très sensibles aux perturbations. Deuxièmement, cette fonction de corrélation possède une dimension dite anormale égale à

$$\eta(m,n) = (m^2K + n^2/K)/2. \quad (\text{II.27})$$

Cette formule permet par exemple d'obtenir la fonction de Green pour des fermions sans spin qui s'obtient en remplaçant $-m = n = 1$

$$G(x,\tau) = \frac{1}{x + iu\tau} \left(\frac{1}{x^2 + u^2\tau^2} \right)^{\alpha/2} \quad (\text{II.28})$$

avec une dimension anormale $\alpha = (K + 1/K - 2)/2$.

En outre, cet exposant anormal va intervenir au premier ordre dans les équations de renormalisation de la constante de couplage de la perturbation. Considérons en effet une perturbation qui va engendrer un terme $g \int dx \cos(m\phi)$ dans le hamiltonien. En procédant par comptage de puissances et en utilisant la formule (II.27), on obtient² $[\cos(m\phi)] = m^2K/4$ et, par conséquent, $1 = [g] - 1 + m^2K/4$, soit $[g] = 2 - m^2K/4$. Suivant le signe de la dimension du terme d'interaction, on peut connaître son comportement par rapport à un changement d'échelle. Si $[g] = 0$ (> 0 , < 0), le terme est marginal (pertinent, non pertinent) et à l'ordre le plus bas, l'équation de renormalisation de g est

$$\frac{dg}{dl} = \left(2 - \frac{\eta}{2} \right) g \quad (\text{II.29})$$

où l est le logarithme du paramètre de coupure en énergie.

Nous allons appliquer cette formule à un cas précis.

3.5 Le modèle de sine-Gordon

Le hamiltonien de Luttinger perturbé par un terme $g \int dx \cos(m\phi)$ est connu sous le nom de modèle de sine-Gordon

$$H_{SG} = \int \frac{dx}{2\pi} \left[uK(\pi\Pi)^2 + \frac{u}{K}(\partial_x\phi)^2 \right] + g \int dx \cos(m\phi) \quad (\text{II.30})$$

Il peut être traité par le groupe de renormalisation selon la méthode introduite par JOSÉ, KADANOFF, KIRKPATRICK, NELSON et YOUNG [85] afin d'obtenir le système

² les dimensions des opérateurs sont notées entre crochets.

d'équations suivant

$$\begin{cases} \frac{dK}{dl} = -g^2 \\ [2mm] \frac{dg}{dl} = (2 - m^2 K/4) g. \end{cases} \quad (\text{II.31})$$

Cette méthode peut être étendue pour le calcul des fonctions de corrélation de chaînes de spin et autres systèmes unidimensionnels [86, 87].

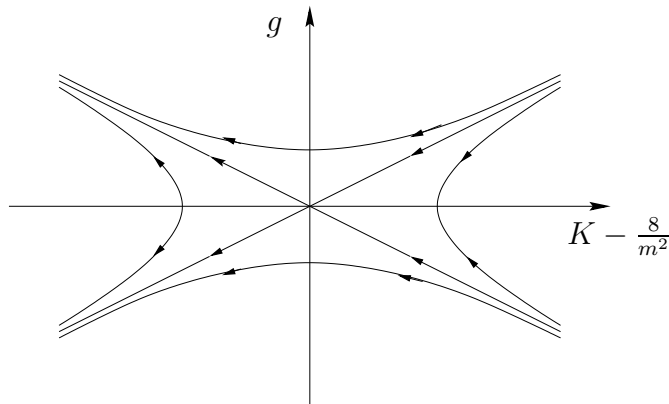


FIG. II.4 – Diagramme du flot des équations de renormalisation (II.31) du modèle sine-Gordon (II.30).

Ces équations sont similaires à celles obtenues par KOSTERLITZ et THOULESS dans leur célèbre étude du modèle classique XY en deux dimensions [88] et cela n'est pas un hasard puisque les fonctions de partition des deux modèles sont identiques en identifiant la température T à $1/K$ [89]. Le diagramme de flot est présenté sur la figure II.4 et nous allons le commenter rapidement en discutant les deux types de points fixes qui existent :

- $g = 0$ et $K = K^*$: le système se comporte asymptotiquement comme un liquide de Luttinger dont les fonctions de corrélation décroissent en lois de puissance avec des exposants dépendant de K^* et, éventuellement des corrections logarithmiques. Ce point fixe sera atteint si les conditions initiales sont sous la séparatrice ($K > 8m^2$ et g petit).
- g diverge et K tend vers 0 : le système évolue vers un point fixe de couplage fort pour lequel l'approche perturbative n'est évidemment plus valable. La procédure usuelle consiste alors à donner une valeur moyenne finie au champ ϕ afin de minimiser l'énergie. Ainsi, comme θ et ϕ sont des champs duaux, on prévoit que θ va être désordonné, avec des fonctions de corrélation décroissant exponentiellement avec une longueur de corrélation ξ finie

$$\langle T_\tau e^{in\theta(x,\tau)} e^{-in\theta(0,0)} \rangle = e^{-\sqrt{x^2+u^2\tau^2}/\xi}.$$

Nous aurons l'occasion de justifier ces conclusions un peu plus tard, mais on peut d'ores et déjà utiliser l'analogie avec le modèle XY en deux dimensions. En effet, quand K est grand, il s'agit du régime de basse température dans lequel le couplage n'est

pas pertinent et les corrélations décroissent en lois de puissance. Par contre, quand le couplage devient pertinent (haute température), les corrélations ont une décroissance exponentielle.

3.6 Le modèle de Thirring et la ligne de Luther-Emery

Nous avons donné des arguments de couplage faible qui montrent qu'au premier ordre, certaines constantes de couplage vont amener le système dans une région de couplage fort où l'analyse perturbative n'est évidemment plus valable. On peut examiner un modèle particulier qui a l'avantage d'être soluble exactement [90, 91].

On considère deux espèces de fermions sans spin soumises au hamiltonien relativiste suivant (modèle de Thirring massif)

$$H = c(-\psi_R^\dagger i\partial_x \psi_R + \psi_L^\dagger i\partial_x \psi_L) + m(\psi_R^\dagger \psi_L + \psi_L^\dagger \psi_R) \quad (\text{II.33})$$

où m représente la partie à $2k_F$ du potentiel. Avec la formule de bosonisation (II.16), on obtient

$$H = \int \frac{dx}{2\pi} [c(\pi\Pi)^2 + c(\partial_x\phi)^2] + \frac{2m}{2\pi\alpha} \int dx \cos(2\phi). \quad (\text{II.34})$$

Par la transformation canonique $\tilde{\phi} = \phi/\sqrt{2}$ et $\tilde{\Pi} = \sqrt{2}\Pi$, on aboutit à

$$H = \int \frac{dx}{2\pi} \left[\frac{c}{2}(\pi\tilde{\Pi})^2 + 2c(\partial_x\tilde{\phi})^2 \right] + \frac{2m}{2\pi\alpha} \int dx \cos(\sqrt{8}\tilde{\phi}). \quad (\text{II.35})$$

Il s'agit d'un modèle de type Luttinger avec $K = 1/2$ auquel s'ajoute un terme perturbatif. D'après la formule (II.27), la dimension de ce terme est $[\cos(\sqrt{8}\phi)] = 2K = 1$ et par conséquent ce terme est pertinent et va déstabiliser le liquide de Luttinger pour aboutir à un point fixe de couplage fort pour lequel la méthode perturbative ne serait plus valable.

Or, le modèle de départ est trivialement soluble puisque quadratique et possède un spectre $E(q) = \sqrt{q^2 + m^2}$ avec gap. Sur cet exemple, on voit donc que l'effet d'un couplage pertinent est d'ouvrir un gap. Ce résultat est systématiquement employé pour classifier l'effet des différentes perturbations.

Nous allons voir maintenant que cette physique du modèle de Luttinger est générique en une dimension.

4 Le liquide de Luttinger

Nous venons de voir sur un exemple que, en une dimension, même une faible interaction déstabilise le liquide de Fermi et conduit à un état dans lequel les fonctions de corrélations décroissent en lois de puissance avec des exposants qui dépendent des interactions. Cet état se caractérise également par l'absence d'excitations élémentaires à une particule. Toutes ces propriétés sont à distinguer de celles du liquide de Fermi tridimensionnel qui peut être décrit comme un gaz de quasi-particules [18, 76].

Pour un système unidimensionnel, la théorie des perturbations, connue sous le nom de g-ologie, contient des divergences qui doivent être ressommées par la méthode du

groupe de renormalisation multiplicatif par exemple (voir la revue de SÓLYOM [92]). Cette procédure redonne les résultats obtenus par la bosonisation. On peut également trouver ces résultats en utilisant des identités de Ward déduites de la conservation des fermions droits et gauches lors des processus de diffusion [93].

Les calculs précédents ainsi que la méthode de bosonisation ont permis de résoudre un modèle particulier mais HALDANE a suggéré que la physique du modèle de Tomonaga-Luttinger correspondait aux propriétés de basse énergie de tout modèle métallique unidimensionnel [94, 79].

On peut faire une remarque sur l'intérêt d'une telle approche sachant que, dans des modèles réalistes, la relation de dispersion n'est jamais strictement linéaire. Là encore, HALDANE a montré que les termes de courbure dans la relation de dispersion vont donner lieu à des termes non pertinents dans le processus de renormalisation et donc la physique de basse énergie est toujours gouvernée par ce liquide de Luttinger.

Nous allons donc détailler plus précisément les caractéristiques de cet état en mettant l'accent sur la manière *pratique* de les calculer.

4.1 Propriétés physiques du liquide de Luttinger

Nous venons de voir que les propriétés de basse énergie d'un gaz d'électrons sans spin à une dimension peuvent être décrites par le hamiltonien (II.18) qui ne comporte que deux paramètres u et K qui remplacent la vitesse de Fermi et les coefficients de Landau pour un liquide de Fermi. Il est donc essentiel de pouvoir calculer ces paramètres autrement que de manière perturbative et pour cela, nous allons les relier à des quantités thermodynamiques [94, 79].

i) Conductivité

La conductivité électrique $\sigma(\omega)$, qui est une quantité mesurable expérimentalement, est définie comme la partie réelle du rapport du courant mesuré au champ électrique appliqué. Dans le cadre de la réponse linéaire, la relation entre ces deux objets est donnée par la formule de Kubo [2] qui dépend de la fonction d'autocorrélation de l'opérateur courant

$$\sigma(\omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \Re e \frac{1}{i\omega} \int_0^\infty \langle [J_q(t), J_{-q}(0)] \rangle dt \quad (\text{II.36})$$

Pour appliquer cette formule au modèle de Luttinger, il est nécessaire de connaître l'expression du courant. On pourrait utiliser la formule naïve $v_F \Pi$ mais, en fait, le bon résultat peut être trouvé à partir de l'équation de continuité de la charge : $\partial_t \rho + \partial_x J = 0$. En effet, la densité de charge pour des fermions sans spin est $-\partial_x \phi / \pi$ et on en déduit l'expression du courant $J = (1/\pi) \partial_t \phi = uK\Pi$. Dès lors, on peut appliquer la formule de Kubo (II.36)³ et on obtient

$$\sigma(\omega) = uK\delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega)$$

On définit le poids de Drude comme le préfacteur de la fonction delta à fréquence nulle et, par conséquent, pour un liquide de Luttinger

$$D = uK. \quad (\text{II.38})$$

3. Le hamiltonien étant gaussien, on peut calculer toutes les fonctions de corrélation.

ii) **Compressibilité**

La compressibilité est définie pour un système de taille L par

$$\kappa^{-1} = L \left(\frac{\partial^2 E}{\partial L^2} \right)$$

On peut remplacer cette définition par une version discrète valable pour un système fini

$$\kappa^{-1} = L(E(N+1) + E(N-1) - 2E(N)) \quad (\text{II.40})$$

Or, ajouter ou retrancher une particule dans le modèle de Luttinger revient à modifier la densité d'un facteur $\pm 1/L$ c'est-à-dire à effectuer la substitution

$$\partial_x \phi \rightarrow \partial_x \phi \mp \frac{\pi}{L}.$$

En reportant dans le hamiltonien (II.18), on trouve

$$\kappa^{-1} = \frac{K}{\pi u}$$

ou encore, en normalisant par rapport au cas sans interactions,

$$\kappa_0/\kappa = v_F K/u \quad (\text{II.43})$$

Cette relation ainsi que la précédente (II.38) permettent de déterminer u et K pour n'importe quel modèle à condition de pouvoir calculer D et κ . En outre, la vitesse de charge peut se calculer indépendamment en analysant le spectre de basse énergie, ce qui permet de vérifier la validité de ces formules.

iii) **Corrections de taille finie et invariance conforme**

Le hamiltonien (II.18) fait partie des modèles possédant l'invariance conforme qui sont des classes de modèles bidimensionnels classiques ou bien unidimensionnels quantiques. Cette invariance conforme permet de calculer les modifications de l'énergie par exemple lors d'une transformation conforme telle que celle qui fait passer d'un système de longueur infinie à une longueur finie, ou bien celle qui fait passer de la température nulle à une température finie.

On obtient par exemple que les corrections à l'énergie par site s'écrivent [95, 96]

$$e(L) = e_\infty - \frac{\pi u}{6L^2} c + o(1/L^2) \quad (\text{II.44})$$

où c désigne la charge conforme qui vaut 1 pour le modèle de Luttinger.

Cette relation permet de tester la validité de l'approche basée sur le liquide de Luttinger en analysant les corrections de taille finie de l'énergie obtenue soit à partir de la solution exacte quand elle existe, soit à partir de calculs numériques.

iv) Propriétés spectrales

À partir de la fonction de Green (II.28), on obtient facilement le comportement de la fonction de distribution au voisinage de k_F , qui est le même qu'en l'absence d'interactions conformément au théorème de Luttinger,

$$n(k) \sim n(k_F) - C \operatorname{sgn}(k - k_F) |k - k_F|^\alpha \quad (\text{II.45})$$

Cette fonction de distribution ne possède pas de discontinuité à la différence d'un liquide de Fermi c'est-à-dire que le poids de quasi-particule est nul, mais elle suit un comportement en loi de puissance avec un exposant anormal $\alpha = (K + 1/K - 2)/2$ (voir figure II.5)⁴. Cette absence de discontinuité est naturellement reliée à l'absence de pôles de quasi-particules dans la fonction de Green qui sont remplacés par des coupures.

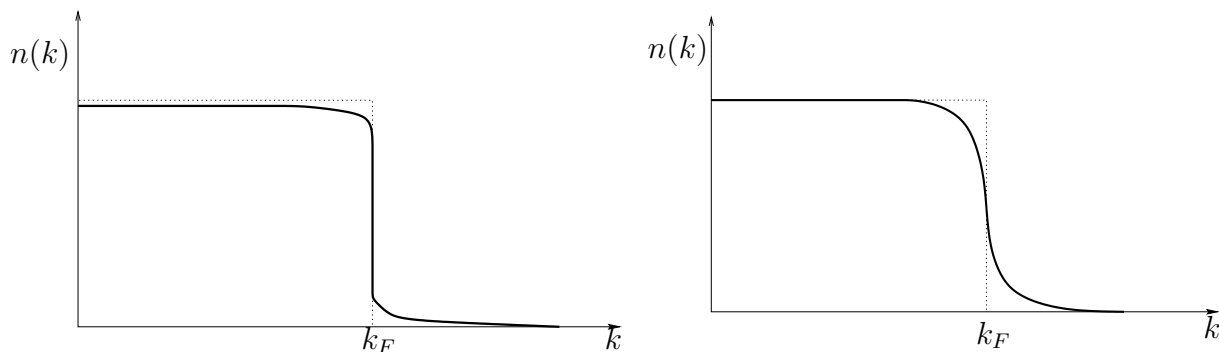


FIG. II.5 – Schémas comparatifs des fonctions d'occupation d'un liquide de Fermi (à gauche) et de Luttinger (à droite).

L'exposant K est également présent dans le comportement des fonctions de corrélations.

Ainsi, le fait que toutes les quantités mesurables expérimentalement dépendent de seulement quelques paramètres devrait en principe permettre de confirmer cette théorie du liquide de Luttinger dans des composés unidimensionnels.

4.2 Détermination des paramètres

En accord avec ce que nous venons de voir, il faut être capable de calculer certaines quantités soit exactement pour des modèles solubles par *Ansatz* de Bethe, soit numériquement. L'énorme avantage de ce procédé est d'être très facile à mettre en œuvre et de donner des résultats très précis numériquement puisqu'il s'agit de quantités thermodynamiques qui sont beaucoup moins sensibles aux effets de taille finie.

Nous allons commencer par décrire quelques résultats connus pour les modèles intégrables et nous présenterons des calculs numériques dans le chapitre suivant.

i) Modèles solubles

Dans ce cas, on sait que les équations de Bethe restent très difficiles à résoudre cependant on peut obtenir suffisamment d'information sur le fondamental pour calculer

4. Cette relation est valable dans le cas sans spin. Pour des fermions avec spin, on obtient $\alpha = (K_\rho + 1/K_\rho - 2)/4$

le poids de Drude et la susceptibilité.

Pour donner un exemple, nous allons reprendre le hamiltonien $t-V$ (II.5) et appliquer cette procédure [94]. Au demi-remplissage, les équations de Bethe peuvent être intégrées et on obtient une expression analytique après transformée de Fourier

$$\begin{aligned}
 u &= \frac{\pi \sin 2\lambda}{\pi - 2\lambda} \\
 D &= \frac{\pi^2 \sin 2\lambda}{4\lambda(\pi - 2\lambda)} \\
 K &= \frac{D}{u} = \frac{\pi}{4\lambda} \\
 \text{avec } \cos(2\lambda) &= V/(2t)
 \end{aligned}
 \tag{II.46}$$

Pour un remplissage quelconque, HALDANE a résolu numériquement ces équations pour obtenir le diagramme de phase de la figure II.6 [94].

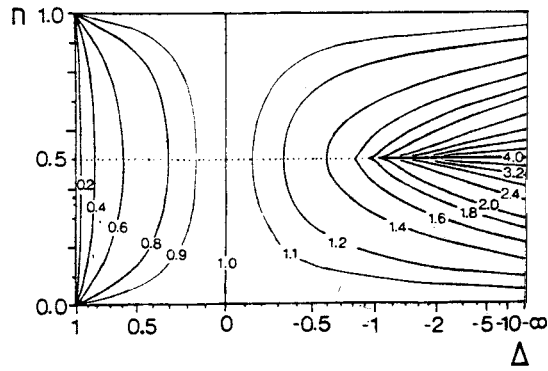


FIG. II.6 – Lignes de niveau $1/K$ en fonction du remplissage n et de l'interaction $\Delta = -V/(2t)$ pour le modèle $t-V$ (figure extraite de la référence [94]).

ii) Diagonalisation exacte

Dans le cas des modèles qui ne sont pas intégrables, la méthode précédente ne s'applique plus et on doit recourir à des simulations numériques comme la diagonalisation exacte sur des petits systèmes.

On peut ainsi calculer la rigidité de charge, la vitesse de charge u , la compressibilité et l'énergie du fondamental pour diverses tailles ce qui nous permet à la fois de vérifier le bien-fondé de l'approche de basse énergie (II.44) et d'extrapoler les valeurs des paramètres du liquide de Luttinger. Nous expliciterons cette procédure dans le chapitre suivant.

Pour conclure, mentionnons que ces méthodes peuvent se généraliser facilement au cas des fermions avec spin et elles ont permis d'obtenir les diagrammes de phase de modèles unidimensionnels intégrables (Hubbard (I.1) répulsif [97, 98] et attractif [99, 100]) ou non ($t-J$ [101, 102], Hubbard étendu [103]), de même que pour des systèmes quasi unidimensionnels (échelle $t-J$ [104]) etc.

4.3 Cas de l'interaction coulombienne

Nous avons vu que les paramètres effectifs du modèle de Luttinger étaient les limites à nombre d'onde tendant vers 0. Cette procédure ne peut pas s'appliquer quand cette quantité diverge, comme c'est le cas pour une interaction coulombienne à longue portée. Dans ce cas, il faut garder la dépendance en impulsion de $K(q)$ dans les calculs et nous allons rappeler les résultats obtenus par SCHULZ [105].

Il se forme un cristal de Wigner dont les excitations de basse énergie sont des plasmons avec une dispersion

$$\omega(q) \sim |q^2 \ln(q)|^{1/2} \quad (\text{II.47})$$

identique à celle trouvée avec une approximation de phase stationnaire. Bien entendu, les modes de spin ne sont pas affectés par l'interaction à longue portée. En outre, l'énorme intérêt de la méthode de bosonisation est de donner accès aux fonctions de corrélation : celle de charge montre une décroissance extrêmement lente (plus lente que toute loi de puissance) pour un vecteur d'onde égal à $4k_F$. On peut se faire une image intuitive de cette phase en considérant un cristal d'électrons séparés par leur distance moyenne et effectuant des oscillations autour de ces positions d'équilibre. Enfin, notons que ces résultats ne dépendent pas de la force de l'interaction mais *uniquement* de son caractère longue portée; en outre, ils sont obtenus dans l'approximation continue qui néglige les effets de réseau et les processus Umklapp et nous reviendrons sur ce point dans le chapitre III.

5 Au-delà : la transition dimensionnelle

La possibilité d'existence de l'analogue du liquide de Luttinger en dimension plus élevée reste toujours hypothétique même si il existe des modèles très particuliers et peu réalistes qui ne sont pas des liquides de Fermi [106, 107, 108, 109].

UEDA et RICE ont étudié la stabilité du liquide de Fermi en effectuant un développement en ε en dimension $d = 1 + \varepsilon$ [110]. Ils trouvent que le liquide de Fermi n'est pas détruit même si la durée de vie des quasi-particules est réduite puisqu'elle varie en $1/(k - k_F)^d$ au lieu de $1/(k - k_F)^2$ comme dans la théorie de LANDAU. Ce résultat a été confirmé et validé par CASTELLANI, DI CASTRO et METZNER en étudiant la généralisation d'un gaz d'électrons en interactions en dimension $1 < d < 2$ [111] avec une surface de Fermi isotrope. Il s'agit du *liquide de Luttinger tomographique* proposé par ANDERSON [112, 113] pour décrire un gaz d'électrons bidimensionnel avec des interactions singulières vers l'avant.

D'un point de vue formel, les mathématiciens démontrent que, en couplage faible et en l'absence du canal de Cooper⁵, le liquide de Fermi est stable à deux dimensions (la série de perturbation possède un rayon de convergence fini) [114, 115].

Cependant, ces approches se placent dans le cas d'une surface de Fermi isotrope. Or, il a été proposé qu'un système fortement anisotrope, tel qu'un conducteur quasi unidimensionnel, puisse présenter des propriétés physiques proches de celles du liquide de

5. pour une surface de Fermi symétrique par la transformation $k \rightarrow -k$, il se produit toujours une instabilité BCS à température nulle

Luttinger. Cette suggestion vise à expliquer les propriétés observées expérimentalement dans ces composés. Ce système est intermédiaire entre la dimension un et deux, et il est intéressant de comprendre comment se passe la transition entre un régime de Luttinger et un liquide de Fermi. Nous allons donc passer à l'étude des chaînes couplées.

Chapitre III

Méthodes numériques

Dans l'étude des systèmes de fermions fortement corrélés, l'approche numérique s'est révélée indispensable et a apporté de nombreux résultats pertinents qui permettent de mieux comprendre les modèles utilisés pour décrire ces systèmes. Pour une revue, on pourra consulter [116, 117].

Nous allons présenter d'abord l'algorithme de Lanczos qui permet de diagonaliser exactement des hamiltoniens sur des petits systèmes et que nous appliquerons à l'étude du modèle t - V unidimensionnel et au cas des interactions à longue portée ; puis, nous décrirons une version étendue dans laquelle on procède à une troncature de la base afin d'accéder à de plus grandes tailles. Enfin, nous expliquerons la méthode de Monte-Carlo quantique utilisée pour les problèmes de fermions sur réseau.

1 Diagonalisation exacte

1.1 Principe

Le principe de base est l'écriture exacte du hamiltonien pour un système de taille donnée dans un certain secteur de symétrie et la diagonalisation de la matrice (assez creuse) selon l'algorithme de Lanczos ; un profit maximal est obtenu à partir des symétries du système. Les résultats sont donc par essence exacts. Il est à noter que le calcul *direct* des fonctions de corrélation dynamiques est possible par cette méthode. Par contre, la principale limitation vient de la taille des réseaux considérés (la taille des matrices croît exponentiellement avec la taille et l'utilisation de symétries ne permet de réduire typiquement que d'un facteur de l'ordre de la taille).

Les programmes de diagonalisation exacte utilisés dans le cadre de cette thèse sont des adaptations de programmes initialement écrits par Didier POILBLANC. On pourra pour plus de détails consulter les revues [117, 116].

i) Utilisation des symétries du système

Considérons, par exemple, L spins sur une chaîne avec des conditions aux limites périodiques. La taille de l'espace de Hilbert total est de 2^L . Néanmoins, il est possible de la réduire de manière très significative en utilisant les symétries du système, c'est-à-dire celles commutant avec le hamiltonien. Celles-ci forment un groupe G , que l'on

écrit généralement sous la forme :

$$G = SU(2) \times T \times P,$$

où $SU(2)$ est le groupe de symétrie du spin, T celui des translations et P le groupe ponctuel du réseau. Nous allons donc nous intéresser aux représentations irréductibles de G et diagonaliser le hamiltonien dans chacune de ces dernières.

Les représentations irréductibles de $SU(2)$ sont caractérisées par le spin total S et sa projection selon l'axe z S^z . S'il est très facile de fabriquer une base de l'espace avec un S^z fixé, l'utilisation du spin total S est moins immédiate. Pour la caractérisation des états, la connaissance de S n'est d'ailleurs pas nécessaire, cette information étant redondante avec l'éventuelle dégénérescence d'un état dans des secteurs de S^z différents. Il est à noter que pour le secteur $S^z = 0$, une symétrie de plus, celle d'inversion de spin, est utilisable.

Pour le groupe des translations T , les représentations irréductibles sont repérées par leur vecteur d'onde. Par exemple, dans le cas d'une chaîne avec conditions aux limites périodiques (que nous appellerons aussi de façon équivalente anneau) de longueur L , les L secteurs sont repérés par les $\vec{k}_j = 2\pi j/L\vec{v}$ (j entier compris entre 0 et L).

Enfin, il reste à considérer le sous-groupe $P_{\vec{k}}$ du groupe ponctuel qui laisse \vec{k} invariant. Dans le cas d'une chaîne, $P_{\vec{k}}$ vaut typiquement (Id, s) pour $k = 0$ ou π et (Id) pour les autres k (s est la réflexion perpendiculairement à la chaîne).

Ainsi, de façon très concrète, la taille des matrices est typiquement divisée par le nombre de symétries disponibles par rapport à un espace construit à S^z constant.

ii) Cas des fermions sans spin

Pour des fermions sans spin, il existe une analogie avec des spins localisés puisqu'à une dimension et pour une chaîne *ouverte*, ces deux systèmes sont identiques (cf. la transformation de Jordan-Wigner de la page 49). On peut donc tirer parti de cette analogie et coder de la même manière. En particulier, la symétrie S_z se traduit par un remplissage constant et l'inversion de spin qui est possible dans le secteur $S_z = 0$ se transforme en la symétrie particule-trou qui existe au demi-remplissage.

Toutefois, le fait d'être sur un système de taille finie avec des conditions aux bords fermées empêche de pousser plus loin l'analogie et, pour des fermions, il faut tenir compte de la statistique de Fermi-Dirac. En effet, lors de l'application de certaines symétries, on doit tenir compte des facteurs (-1) issus des commutations des opérateurs fermioniques.

iii) Cas des fermions avec spin

Enfin, pour des fermions avec spin, mis à part le fait que le codage des états est sur deux bits puisqu'il existe quatre états par site, la méthode est identique. On utilise en outre le fait que S_z ainsi que le nombre total de particules pour chaque état de spin sont conservés. Bien entendu, les symétries spatiales continuent à être implémentées de la même manière.

1.2 Algorithme de Lanczos

i) Méthode

Suite à l'utilisation des symétries, une base de l'espace de dimension \mathcal{N} a été construite pour une représentation irréductible donnée ainsi que la matrice correspondante (très creuse) du hamiltonien. Nous allons donc donner le principe de la méthode de Lanczos [118, 119] pour la diagonaliser.

La première étape est de partir d'un vecteur aléatoire normé (sans symétries particulières) $|\Psi_1\rangle$. En calculant son image par le hamiltonien H , on obtient :

$$H|\Psi_1\rangle = a_1|\Psi_1\rangle + b_1|\Psi_2\rangle,$$

où $|\Psi_2\rangle$ est normé et orthogonal à $|\Psi_1\rangle$. En répétant cette opération, on arrive à

$$H|\Psi_2\rangle = b_1|\Psi_1\rangle + a_2|\Psi_2\rangle + b_2|\Psi_3\rangle,$$

avec $|\Psi_3\rangle$ normé et orthogonal à $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$. La procédure générale qui produit une suite de coefficients a_i et b_i en est facilement déduite :

$$H|\Psi_i\rangle = b_{i-1}|\Psi_{i-1}\rangle + a_i|\Psi_i\rangle + b_i|\Psi_{i+1}\rangle,$$

avec $|\Psi_{i+1}\rangle$ normé et orthogonal à **tous** les $|\Psi_p\rangle$ ($p = 0, \dots, i$).

Le hamiltonien a donc été réécrit dans une base tronquée où il est tridiagonal : les (a_i) forment la diagonale et les (b_i) sont les éléments codiagonaux d'une matrice M de taille n (n est le nombre de pas Lanczos) :

$$M = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}.$$

Cette forme tridiagonale est évidemment beaucoup plus aisée à traiter numériquement. Les valeurs propres extrémales de M convergent exponentiellement vers celles de H avec le nombre n de pas Lanczos. En principe, lorsque n vaut la taille de l'espace \mathcal{N} , le hamiltonien a été intégralement réécrit dans une autre base. Dans la pratique, des erreurs d'arrondi provoquent l'apparition de vecteurs fantômes qui auraient dû disparaître par orthogonalisation. On peut toutefois s'affranchir de ces derniers en supprimant des lignes et des colonnes de la matrice obtenue car ces fantômes sont très sensibles à de telles opérations, contrairement aux vrais états propres. Pour fixer les idées, pour un espace de Hilbert de taille $\mathcal{N} = 20$ millions, environ 300 itérations Lanczos suffisent pour obtenir la valeur propre du fondamental avec une précision de 10^{-10} .

Il est essentiel de noter que l'intérêt de l'algorithme de Lanczos du point de vue du temps de calcul réside notamment dans le caractère « creux » de la matrice originelle du hamiltonien. Cela est aussi bien le cas par exemple dans les hamiltoniens de spin considérés que dans les modèles de liaisons fortes pour des fermions. Prenons

par exemple une interaction type hamiltonien d'Heisenberg sur une chaîne de spin de longueur L . Chaque état sera typiquement couplé au maximum avec L autres états (c'est le nombre maximal de spin flips possibles). Ainsi le nombre maximal d'éléments non nuls est de l'ordre de $L \times \mathcal{N}$ par rapport au nombre total d'éléments de matrice $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ (bien entendu $\mathcal{N} \gg L!$).

ii) Codage des états et implémentation du hamiltonien

Pour les modèles de spin 1/2, l'information en chaque site du réseau est stockée sur un seul bit. En effet, en un site donné, le spin peut être orienté vers le haut ou vers le bas. Pour d'autres modèles tels que par exemple t-J, des chaînes de spin 1, ou des chaînes de spin 1/2 couplées à des phonons, le codage est plus complexe et nécessite plusieurs bits par site. Ainsi pour un réseau de L spins 1/2, une base de l'espace de Hilbert est aisément représentée par les nombres compris entre 0 et $2^L - 1$.

Cependant, tous les états ainsi obtenus ne sont pas nécessaires pour étudier une représentation irréductible donnée. Déjà, il est facile d'extraire les états possédant un S^z donné. Ensuite, chacun des états $|\alpha\rangle$ possédant la symétrie requise est obtenu à partir d'une configuration $|c\rangle$ comme la somme :

$$|\alpha\rangle[|c\rangle] = \sum_{g \in G} \chi(g)g|c\rangle, \quad (\text{III.2})$$

où $\chi(g)$ est le caractère de la symétrie g . Cependant, comme la procédure pour construire l'état symétrique est bien définie, on n'a besoin typiquement que de garder une seule des configurations $g|c\rangle = |r\rangle$, souvent appelée « représentatif ». En d'autres mots, on ne retient que les configurations non reliées entre elles par une symétrie g . En pratique, on choisira comme représentatif entre toutes les configurations reliées par une symétrie celle dont la transcription binaire est par exemple minimale : $|r\rangle[|c\rangle] = \min_{g \in G} g|c\rangle$. Tout cela explique que la taille du sous-espace symétrique soit typiquement celle de l'espace total divisée par le nombre de symétries. Cependant, il est à noter que si un sous-groupe dont la somme des caractères est nulle laisse invariant une configuration, alors la somme (III.2) est nulle et cette configuration n'a pas de représentatif (dans la représentation irréductible en question). On remarquera que la base des représentatifs ainsi obtenue est orthogonale mais non orthonormée.

Maintenant qu'une base ($|r\rangle$) de la représentation étudiée de l'espace de Hilbert est connue, il convient de s'intéresser à l'implémentation de l'opération à la base de l'algorithme de Lanczos : $|\Psi_i\rangle \rightarrow H|\Psi_i\rangle$. L'application du hamiltonien sur chacun des états de la base des représentatifs engendre un certain nombre d'états (proportionnel à la taille du réseau). Il est alors nécessaire de leur appliquer toutes les symétries afin d'obtenir leurs représentatifs. Ensuite, par exemple, une méthode de dichotomie ou alors de *hashing* (ce qui est plus efficace) permet de retrouver la position du représentatif dans la liste des représentatifs trouvée précédemment en construisant la base. La matrice est alors obtenue et il ne reste qu'à appliquer l'algorithme de Lanczos.

iii) Calcul de l'état fondamental

Il est important d'évoquer le moyen d'obtenir le fondamental ou un état excité quelconque (par exemple pour calculer des fonctions de corrélation dynamiques). Le

fondamental (ou un autre état) est connu dans la base des vecteurs intermédiaires $|\Psi_i\rangle$, une fois la matrice tridiagonale obtenue. Pour avoir ses composantes dans la base de départ (pour laquelle on sait écrire tous les opérateurs), il « suffit » de connaître tous les vecteurs $|\Psi_i\rangle$ intermédiaires : soit ils ont été conservés lors de l'étape précédente de diagonalisation (ce qui peut être gênant du point de vue de l'espace de stockage pour de grandes tailles), soit on effectue une seconde fois la procédure précédente de diagonalisation. En effet, cette dernière opération permet en fait de recalculer les composantes des vecteurs $|\Psi_i\rangle$ successifs mais double évidemment le temps machine utilisé.

iv) Extrapolations de taille finie

Dans la plupart des cas, les quantités obtenues par Diagonalisation Exacte dépendent de la taille du réseau considéré L . Cependant, on peut souvent en extraire les valeurs à la limite thermodynamique d'une manière systématique. Quand la loi d'échelle est connue ou déduite des données, des extrapolations de taille finie peuvent généralement être effectuées.

Pour simplifier, nous allons discuter les deux situations possibles en une dimension. Si le gap de spin (ou de charge par transformation de Jordan-Wigner) est nul, la longueur de corrélation du système est infinie et on est dans la situation du liquide de Luttinger. Quelques résultats sont connus. Par exemple, la correction à l'énergie par site e suit la loi d'échelle suivante pour un réseau périodique : $e(L) = e_\infty - \pi u/6L^2 + o(1/L^2)$ [80], où e_∞ est la valeur extrapolée de e et u la vitesse de spin. Par contre, la présence d'un gap de spin change radicalement la situation : la longueur de corrélation magnétique $\xi \propto 1/\Delta$ est alors finie. Cela signifie que lorsque la taille du réseau (périodique) devient de l'ordre de grandeur de quelques ξ , les grandeurs physiques ne ressentent plus le caractère fini du réseau (les corrélations disparaissent au-delà de la distance L) et la convergence par rapport à la taille du réseau L est pour ainsi dire achevée. Ainsi un facteur du genre de $\exp(-L/L_0)$, où L_0 est de l'ordre de la longueur de corrélation ξ , intervient naturellement. La plupart du temps, la forme de la loi d'échelle n'est pas connue et il est alors nécessaire de postuler une loi, par exemple en s'aidant de la loi sans gap. Par conséquent, dans le cas d'un système avec gap, l'énergie par site obéit très précisément à une loi du type : $e(L) = e_\infty - A \exp(-L/L_0)/L^2 + o(1/L^2)$. La signification de cette loi est la suivante. Pour des tailles nettement inférieures à L_0 , on est dans le cas similaire au cas précédent où la longueur de corrélation est infinie. Pour des tailles supérieures à quelques L_0 , la convergence est quasiment achevée et augmenter la taille du système ne change rien vu que différentes parties suffisamment éloignées ne se « voient » pas.

Pour obtenir une extrapolation précise, il est souvent intéressant de prendre des systèmes avec des conditions aux limites différentes mais conduisant aux mêmes valeurs extrapolées, par exemple, sur un anneau, en introduisant un flux magnétique.

v) Calcul des fonctions de corrélation dynamiques

Les propriétés des systèmes physiques sont souvent décrites à l'aide du corrélateur en temps d'une quantité. En mécanique quantique, cela revient à calculer la fonction

de corrélation d'un opérateur quelconque $A(t)$ (en représentation d'Heisenberg) :

$$C(t) = \langle \Phi_0 | A(t) A^\dagger(0) | \Phi_0 \rangle,$$

et $|\Phi_0\rangle$ est le fondamental. En Diagonalisation Exacte, il est facile d'accéder à la transformée de Fourier $C(\omega)$ du corrélateur, qui est souvent obtenue expérimentalement sous la forme d'une intensité $I(\omega)$:

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Im m \langle \Phi_0 | A \frac{1}{\omega + E_0 - H + i\varepsilon} A^\dagger | \Phi_0 \rangle, \quad (\text{III.3})$$

où E_0 est l'énergie du fondamental $|\Phi_0\rangle$. On écrit alors $I(\omega)$ sous la forme :

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \langle \Phi_0 | A A^\dagger | \Phi_0 \rangle \langle \tilde{\Phi}_0 | \frac{1}{\omega + E_0 - H} | \tilde{\Phi}_0 \rangle,$$

avec $|\tilde{\Phi}_0\rangle = (\langle \Phi_0 | A A^\dagger | \Phi_0 \rangle)^{-\frac{1}{2}} A^\dagger | \Phi_0 \rangle$. La réalisation d'une nouvelle étape Lanczos en partant non d'un vecteur aléatoire mais de $|\tilde{\Phi}_0\rangle$ donne directement accès à $I(\omega)$. En effet, la matrice $\omega + E_0 - H$ est alors connue sous forme tridiagonale, en posant $z = \omega + E_0$:

$$\omega + E_0 - H = z - H = \begin{pmatrix} z - \tilde{a}_1 & -\tilde{b}_1 & 0 & \dots & 0 \\ -\tilde{b}_1 & z - \tilde{a}_2 & -\tilde{b}_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & -\tilde{b}_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & z - \tilde{a}_{n-1} & -\tilde{b}_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & -\tilde{b}_{n-1} & z - \tilde{a}_n \end{pmatrix},$$

le premier vecteur de la base étant $|\tilde{\Phi}_0\rangle$. Ainsi l'intensité recherchée est proportionnelle à l'élément $[(\omega + E_0 - H)^{-1}]_{11}$ (exprimé dans cette même base), c'est-à-dire à D_1/D_0 , où D_i est le déterminant de la matrice $\omega + E_0 - H$ privée des i premières lignes et colonnes. Ces déterminants peuvent aisément être évalués par récurrence: $D_i = (\omega + E_0 - \tilde{a}_{i+1}) D_{i+1} - \tilde{b}_{i+1}^2 D_{i+2}$. On arrive ainsi à un développement en fraction continue de $I(\omega)$:

$$I(\omega) = \frac{\langle \Phi_0 | A A^\dagger | \Phi_0 \rangle}{\omega + E_0 - \tilde{a}_1 - \frac{\tilde{b}_1^2}{\omega + E_0 - \tilde{a}_2 - \frac{\tilde{b}_2^2}{\omega + E_0 - \tilde{a}_3 - \dots}}}. \quad (\text{III.5})$$

La signification physique des fonctions spectrales peut être déduite à partir de leur représentation de Lehmann :

$$I(\omega) = \sum_n |\langle \Phi_0 | A | \Phi_n \rangle|^2 \delta(\omega - E_n + E_0), \quad (\text{III.6})$$

où $|\Phi_n\rangle$ est une base complète de vecteurs propres d'énergie associée E_n . La dynamique est entièrement déterminée par les pôles et leurs poids associés. Lors du tracé du spectre, les pics δ sont remplacés par des lorentziennes de largeur ε provenant d'un $\varepsilon \neq 0$ dans la formule (III.3). Cette substitution est en fait souhaitable pour une comparaison avec les spectres expérimentaux vu la résolution finie des dispositifs. Bien entendu, les poids associés aux différents pics sont indépendants de la valeur de ε . Il est à noter que de nombreux termes dans la somme ont une contribution nulle par règle de sélection. Par exemple, pour fixer les idées, A vaut $S^z(\vec{q})$ (transformée de Fourier spatiale de la composante z du spin total) pour la diffusion inélastique de neutrons. Ainsi, si le fondamental est un singulet dans le secteur $k = 0$, on pourra se contenter d'utiliser dans la somme des états triplet dans le secteur $k = q$.

1.3 Exemples : modèle unidimensionnel

Dans le régime métallique des systèmes unidimensionnels, nous avons rappelé dans le chapitre précédent que le comportement générique était celui du liquide de Luttinger. En particulier, toutes les quantités physiques sont gouvernées par deux paramètres pour chaque mode (charge et spin) qui peuvent être déterminés à l'aide des quantités thermodynamiques plus faciles à calculer qui sont, pour le mode de charge par exemple, la rigidité de charge (II.38), la vitesse de charge u , la compressibilité (II.40) et l'énergie du fondamental (II.44). De surcroît, rappelons qu'il existe plus de relations que de paramètres, et, par conséquent, nous allons pouvoir vérifier la cohérence de cette approche. Nous allons présenter les résultats obtenus avec le modèle t - V pour des fermions sans spin qui possède une solution exacte décrite précédemment ainsi que pour des modèles avec des interactions à plus longue portée qui ne sont plus intégrables.

i) Modèle t - V

Nous reprenons l'étude du hamiltonien t - V (défini en (II.5)) dont nous avons présenté le diagramme de phase *exact* puisque ce modèle est intégrable. Nous proposons de montrer sur cet exemple que la méthode de diagonalisation exacte permet de calculer avec une précision excellente de nombreuses quantités physiques.

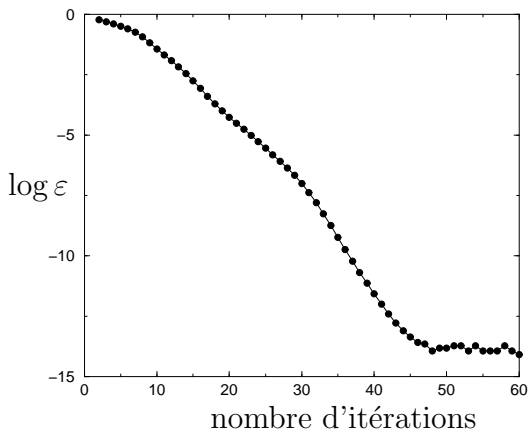
Tout d'abord, nous présentons l'énergie par site du fondamental obtenue pour diverses tailles en fonction du nombre d'itérations Lanczos afin de montrer la convergence exponentielle de cet algorithme pour le fondamental (figure i)). À partir de ces énergies, on peut extrapoler très précisément la valeur thermodynamique en utilisant une loi d'échelle adéquate comme le montre la figure i).

En diagonalisant le hamiltonien dans un secteur d'impulsion décalée de celle du fondamental de $2\pi/L$, on peut calculer la vitesse des excitations

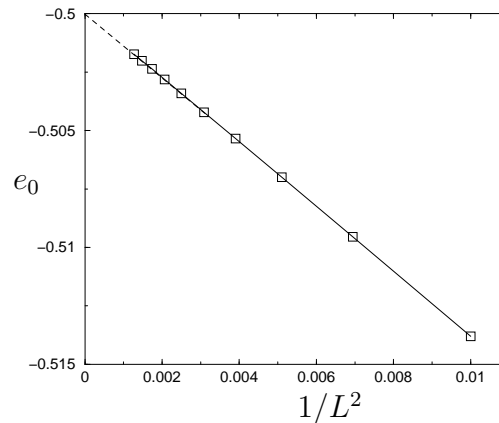
$$u = \frac{E_0(q = 2\pi/L) - E_0(q = 0)}{2\pi/L}.$$

Quant à la rigidité de charge (proportionnelle au poids du pic de Drude D), elle peut être obtenue très simplement (KOHN [120]) comme la variation de l'énergie du fondamental par rapport à un flux extérieur

$$2\pi D = \frac{L}{4\pi} \frac{\partial^2(E_0)}{\partial \Phi^2}. \quad (\text{III.7})$$



(a) Erreur sur l'énergie du fondamental en échelle logarithmique (de base 10) en fonction du nombre d'itérations Lanczos pour le modèle t - V avec $V=t=1$ sur un système de 30 sites. On observe la convergence exponentielle de cet algorithme. Les données saturent à cause de la précision machine.



(b) Dépendance de l'énergie par site de l'état fondamental en fonction de la taille pour le modèle t - V avec $V=t=1$. Les symboles sont les résultats obtenus par diagonalisation exacte et la ligne en tirets montre le comportement en $1/L^2$.

Nous présentons sur la figure III.1 les paramètres de Luttinger K et u , obtenus après extrapolation des résultats de Diagonalisation Exacte de la rigidité de charge et de la vitesse de charge. Nous comparons ces valeurs à celles obtenues par *Ansatz* de Bethe (équations (II.46) de la page 57).

L'excellent accord que nous obtenons permet d'être confiant et nous procure le moyen d'accéder aux paramètres de Luttinger pour des modèles non intégrables tels que ceux qui nous intéresseront dans la suite et dans le chapitre IV.

Après avoir vérifié que les lois d'échelles de ces grandeurs suivent la prédiction du liquide de Luttinger, nous pouvons nous intéresser aux relations issues de la théorie conforme.

Charge conforme

Par exemple d'après l'équation (II.44) de la page 55, les corrections de taille finie de l'énergie ne dépendent que de la vitesse de charge et d'un paramètre c appelé charge conforme qui doit valoir 1 pour un liquide de Luttinger. Effectivement, dans la phase métallique du modèle t - V , nous pouvons calculer c pour diverses valeurs de l'interaction connaissant la valeur extrapolée de la vitesse des excitations et nous obtenons une charge conforme égale à 1 à moins de 2% près pour toute la gamme d'interactions dans le régime métallique. C'est une confirmation supplémentaire de la validité de l'approche liquide de Luttinger.

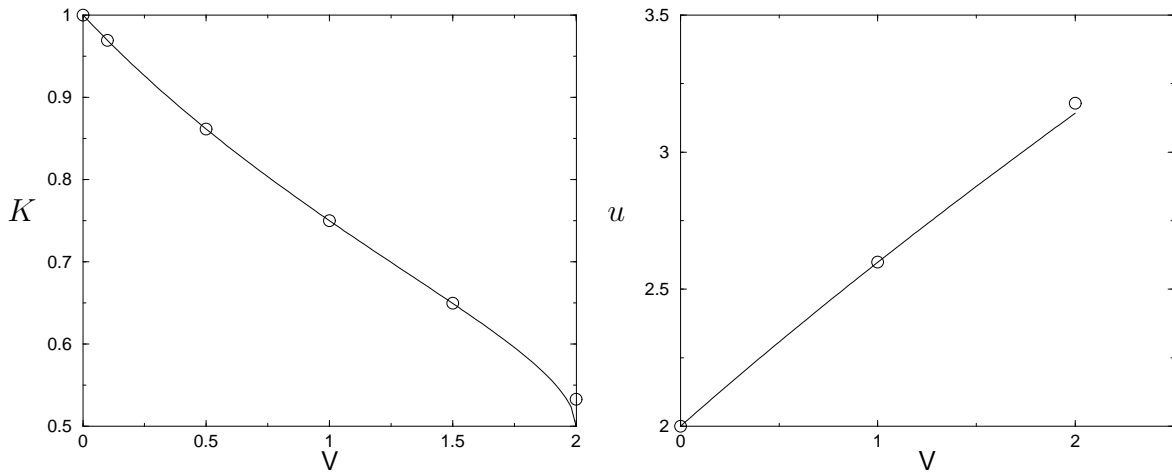


FIG. III.1 – Paramètres du liquide de Luttinger pour le modèle t - V : à gauche, valeurs de K et à droite, la vitesse u en fonction de V . Les symboles sont les valeurs extrapolées à partir des résultats obtenus par diagonalisation exacte. Les lignes représentent les résultats obtenus par Ansatz de Bethe (II.46).

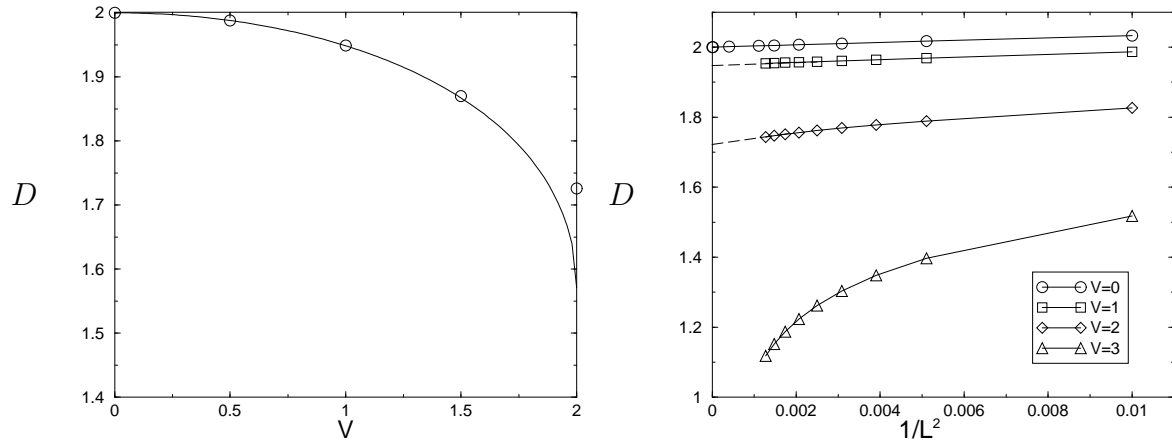


FIG. III.2 – À gauche : poids du pic de Drude en fonction de V . Les symboles sont les valeurs extrapolées à partir des résultats obtenus par diagonalisation exacte, la ligne représente les résultats obtenus par Ansatz de Bethe (II.46). À droite : dépendance du poids du pic de Drude en fonction de la taille ; les lignes en tirets montrent le comportement linéaire en $1/L^2$ dans la phase métallique et exponentiel dans la phase isolante.

Compressibilité

Pour un système de taille finie, on peut définir une compressibilité en prenant la dérivée seconde discrète de l'énergie (II.40).

$$\kappa^{-1} = L(E(N_e + 1) + E(N_e - 1) - 2E(N_e))$$

et en faisant attention aux effets de couches qui peuvent modifier cette quantité à cause des problèmes de taille finie.

Une fois calculée cette quantité pour diverses tailles, on trouve à nouveau une loi d'échelle en $1/L^2$ et on peut faire des extrapolations précises. À partir de ces résultats et grâce à la relation (II.43), on a un moyen *indépendant* de calculer le rapport u/K . Ainsi, connaissant u , on en déduit une nouvelle valeur de K notée $K(\kappa)$. En comparant cette dernière à la valeur obtenue à partir du poids de Drude, on trouve un très bon accord entre les valeurs extrapolées comme on le voit sur la figure III.3.

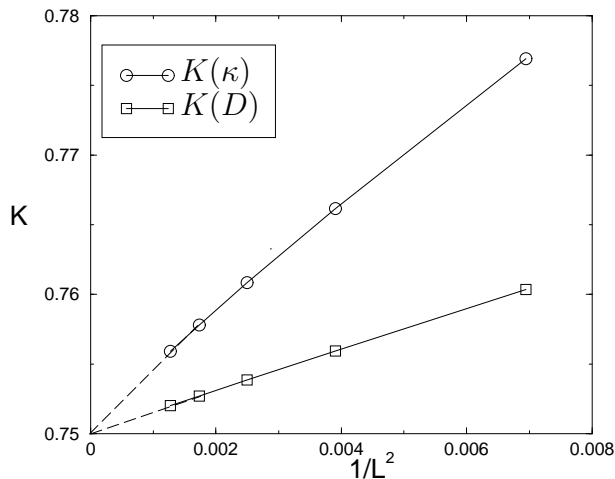


FIG. III.3 – Comparaison des paramètres K de Luttinger obtenus grâce au poids de Drude D et à la compressibilité κ en fonction de la taille pour le modèle t - V avec $V=t=1$. Les symboles sont les résultats obtenus par diagonalisation exacte et les lignes en pointillés montrent le comportement en $1/L^2$. Les deux courbes s'extrapolent exactement au même point qui est la valeur exacte obtenue par Ansatz de Bethe.

De surcroît, on s'aperçoit que les lois d'échelles ne sont plus vérifiées pour des interactions trop fortes $V > 2$. Effectivement, pour ces valeurs le système est un isolant (cf. le diagramme de phase II.6).

Transition métal-isolant

Nous avons vu dans le chapitre II que pour des fermions sur réseau avec un remplissage commensurable, il existe des processus dits *Umklapp* qui transfèrent des particules d'un point de Fermi à l'autre. En langage de bosonisation et pour un remplissage $n = p/q$ dans le cas de fermions sans spin, les termes *Umklapp* s'écrivent $\cos(2q\phi)$. D'après la formule (II.27) de la page 51, cet opérateur a une dimension $q^2 K$ et il devient donc pertinent lorsque $K < 2/q^2$ [121]. On en déduit une valeur maximale de α au-delà de laquelle le système devient isolant

$$\alpha_{\max} = \left(\frac{1}{q^2} + \frac{q^2}{4} - 1 \right). \quad (\text{III.9})$$

Au demi-remplissage par exemple, un gap s'ouvre lorsque $\alpha > 1/4$ c'est-à-dire $K < 1/2$ ce qui définit une valeur critique de l'interaction V_c . En outre, le hamiltonien bosonisé est de la forme sine-Gordon (II.30) et, en utilisant l'analogie avec la transition

de Kosterlitz-Thouless, le gap va s'ouvrir très lentement en $\exp(-A/\sqrt{V - V_c})$. En particulier, on voit bien qu'il va être très difficile d'estimer la valeur critique à partir des valeurs extrapolées du gap alors que le critère donnant $K = 1/2$ permet d'évaluer plus précisément V_c .

Classiquement, on peut considérer le problème de particules sans spin soumis à un terme potentiel uniquement ($t = 0$). Pour des remplissages commensurables, l'état fondamental est obtenu en disposant les particules de manière équidistante. On peut alors calculer la valeur classique du gap de charge défini par

$$\Delta_c = E(N_e + 1) + E(N_e - 1) - 2E(N_e). \quad (\text{III.10})$$

et qui est un paramètre d'ordre de cette transition.

Au demi-remplissage, un simple calcul conduit à $\Delta_c = 2V$ qui est fini pour toute valeur de l'interaction : il s'agit d'un isolant.

Sur la figure III.4, nous traçons les valeurs extrapolées du gap à une particule calculées numériquement ainsi que le comportement classique qui est valable de manière asymptotique quand $V \gg t$. On remarque qu'il est difficile d'en extraire une valeur précise de V_c en utilisant la loi exponentielle écrite ci-dessus.

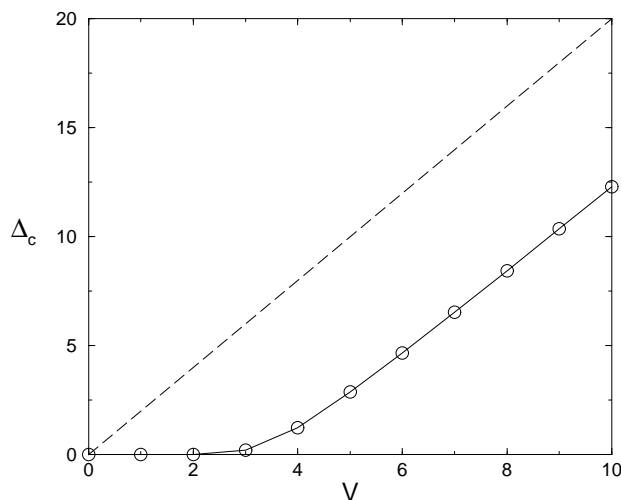


FIG. III.4 – Valeurs du gap à une particule (III.10) en fonction de l'interaction pour le modèle t - V au demi-remplissage. Les symboles sont les extrapolations faites avec les résultats obtenus par diagonalisation exacte et la ligne en pointillé montre le comportement classique $\Delta_c = 2V$.

Essayons alors d'utiliser le critère utilisant le paramètre K . Bien sûr, pour ce modèle tout cela peut paraître exagéré puisqu'il est exactement soluble mais n'oublions pas que cette procédure numérique peut s'appliquer à n'importe quel modèle. Nous avons calculé numériquement les valeurs $V_c(L)$ pour lesquelles K atteint la valeur $1/2$ dans un système de taille L . En extrapolant ces valeurs (figure III.5), on trouve $V_c \simeq 2,03$. Or, d'après la figure III.1 qui contient les résultats de l'Ansatz de Bethe, $K = 1/2$ pour $V/t = 2$ et, par conséquent $V_c/t = 2$. On a donc un très bon accord entre les deux valeurs.

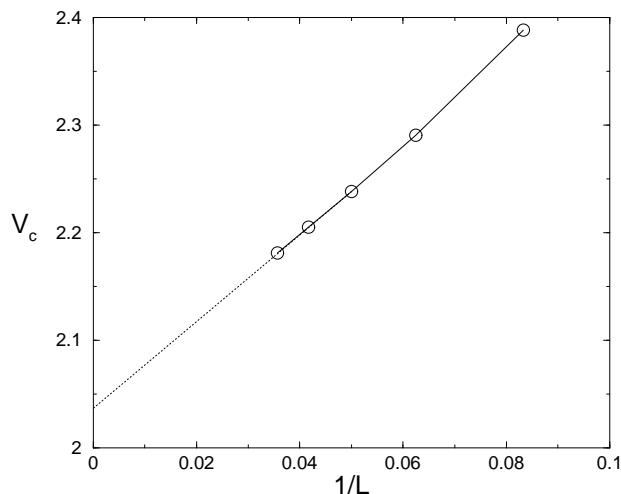


FIG. III.5 – Valeurs $V_c(L)$ telles que $K = 1/2$ pour le modèle t - V au demi-remplissage. Les symboles sont les résultats obtenus par diagonalisation exacte et la ligne en pointillé montre l'extrapolation.

Ce résultat est également intéressant pour une chaîne de spins. En effet, par l'intermédiaire de la transformation de Jordan-Wigner, le hamiltonien t - V se transforme en celui de Heisenberg. Dans ce langage, il s'ouvre un gap de spin lorsque l'anisotropie excède 1 ($J_z^c/J = V_c/2$ d'après (II.21)) et on se retrouve dans une phase de type Ising.

On pourrait également calculer les valeurs du poids du pic de Drude D qui est le paramètre d'ordre de cette transition métal-isolant [120]. Comme on le voit sur la figure III.2, la dépendance de D en fonction de la taille est en $1/L^2$ dans le régime métallique (liquide de Luttinger) tandis qu'on observe un changement de comportement dans la phase isolante du fait de la présence d'un gap. Malheureusement, les tailles accessibles ne permettent pas d'obtenir de bonnes extrapolations dans le cas d'un isolant et on ne peut pas caractériser précisément la transition par ce critère.

Enfin, on peut également choisir un critère plus empirique qui consiste à supposer que dans la phase métallique, les valeurs de K obtenues à l'aide de D et de κ coïncident à la limite thermodynamique. On peut alors tracer la différence relative entre ces deux valeurs en fonction de V (voir la figure III.6). En extrapolant ces données, on trouve que cette erreur relative excède quelques % lorsque $V/t \simeq 2$ ce qui redonne la valeur critique de la transition.

Fonction de distribution

Une des caractéristiques essentielles du liquide de Luttinger réside dans le fait que sa fonction d'occupation ne possède pas de saut au niveau de Fermi. Bien sûr, pour un système de taille finie, on n'a accès qu'à des impulsions discrètes et on s'attend à voir un poids de quasi-particule fini

$$Z \sim \Delta n(k_F) = n(k_F - \frac{\pi}{L}) - n(k_F + \frac{\pi}{L}) \sim L^{-\alpha}, \quad (\text{III.11})$$

qui ne disparaît que dans la limite de thermodynamique.

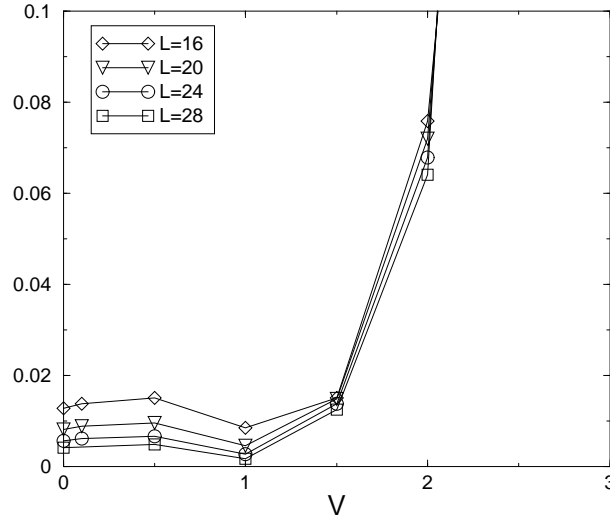


FIG. III.6 – Différence relative $|K(D) - K(\kappa)|/K(D)$ en fonction de V pour le modèle t - V au demi-remplissage et pour plusieurs tailles indiquées sur la figure.

C'est effectivement ce qui a été observé pour le modèle de Hubbard [122, 123] mais ce comportement est restreint à un tout petit domaine autour du moment de Fermi. Toutefois, cela n'implique pas que le comportement du type liquide de Luttinger pour d'autres fonctions de corrélations soit réduit au même domaine [80].

Sur la figure III.8(a), nous traçons la fonction d'occupation $n(k_F) = \langle \Phi_0 | c_{k_F}^\dagger c_{k_F} | \Phi_0 \rangle$ pour le cas des couches fermées¹. La théorie du liquide de Luttinger prédit une valeur de $1/2$ à laquelle s'ajoutent des corrections en $1/L^\alpha$ (voir l'équation (II.45)) puisque, pour un système de taille finie, le moment de Fermi diffère de sa valeur thermodynamique d'une quantité d'ordre $1/L$: $|k_F - k_F(L)| \sim 1/L$. Cette loi de puissance semble relativement bonne pour les faibles valeurs de l'interaction ($\alpha \ll 1$) mais, pour des α plus élevés, nous observons des déviations. Pour $\alpha = 0,1$, les corrections de taille finie sont énormes puisque, pour 36 sites, le poids de quasi-particule vaut $Z(L = 36) \simeq 0,89$, ce qui est tout à fait comparable aux résultats obtenus sur le modèle de Hubbard [123]. Quant aux valeurs de α plus élevées, il faudrait considérer les termes d'ordres supérieurs dans l'expression de $n(k_F)$ telles les corrections en $1/L$ qui ne sont plus du tout négligeables devant $1/L^\alpha$, et c'est ce qui explique les écarts à la loi d'échelles que nous observons sur la figure III.8(a).

Nous avons également calculé une fonction de corrélations à quatre opérateurs définie par

$$C = \langle \Phi_0 | c_{k_F}^\dagger c_{-k_F} c_{-k_F}^\dagger c_{k_F} | \Phi_0 \rangle = n(-k_F) - \langle \Phi_0 | c_{k_F}^\dagger c_{k_F} c_{-k_F}^\dagger c_{-k_F} | \Phi_0 \rangle \quad (\text{III.12})$$

et schématisée sur la figure III.7.

Cette fonction de corrélation dépend bien évidemment du paramètre K (c'est-à-dire de α) de la manière suivante :

$$C \sim L^{1-2K}. \quad (\text{III.13})$$

1. Dans cette géométrie, k_F est défini comme l'impulsion du dernier état occupé en l'absence d'interactions.

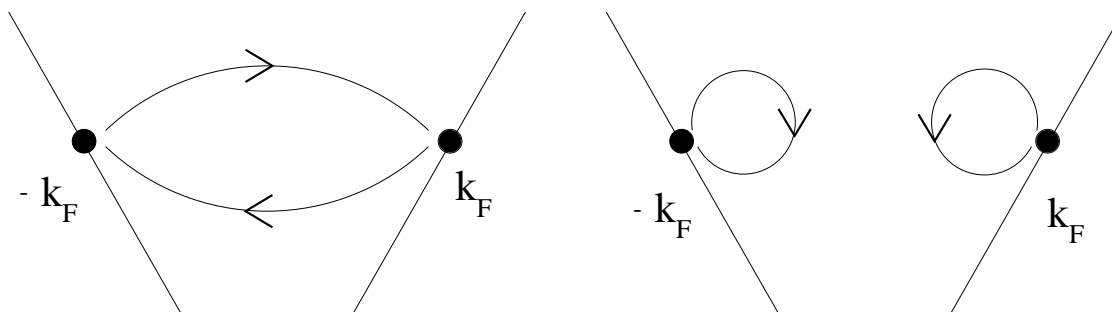


FIG. III.7 – Schémas des deux processus contenus dans la fonction de corrélation définie en (III.12).

Nous montrons, sur la figure III.8(b), les données obtenues pour une large gamme d'interactions. Là encore, les valeurs élevées de α montrent des déviations à la loi d'échelle, et on peut supposer que c'est dû à l'existence de termes correctifs.

Ces deux exemples montrent bien que l'observation des lois d'échelles est difficile pour des systèmes de taille finie et, de ce fait, nous verrons dans le chapitre suivant quelle procédure il faut mettre en œuvre pour vérifier de telles lois.

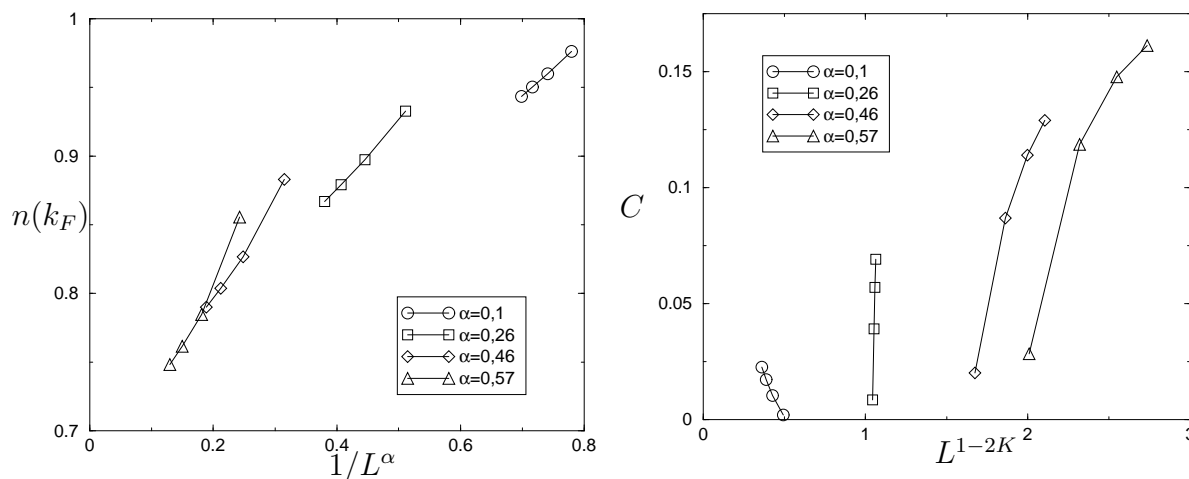


FIG. III.8 – (a) à gauche : nombre d'occupation au niveau de Fermi pour diverses interactions en fonction de $1/L^\alpha$; (b) fonction de corrélation C (équation III.12) en fonction de L^{1-2K} . Les systèmes considérés sont demi remplis et de tailles $L = 12, 20, 28$ et 36 .

ii) Interaction coulombienne

Dans le chapitre précédent, nous avons rappelé que, pour un système unidimensionnel soumis à une interaction coulombienne, on s'attend à avoir un cristal de Wigner (page 58). Nous aimerions avoir une confirmation numérique pour un modèle microscopique sur réseau. En effet, il n'est pas évident *a priori* que cette phase ne soit pas modifiée du fait des termes *Umklapp*. Ce scénario a été discuté par POILBLANC *et coll.* et ces auteurs trouvent que l'interaction coulombienne délocalise le système et peut induire une phase métallique dans une chaîne demi remplie [124].

Ici, nous considérons des fermions sans spin dont le hamiltonien s'écrit

$$H = -t \sum_i (c_{i+1}^\dagger c_i + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{V}{|i-j|} n_i n_j, \quad (\text{III.14})$$

et nous allons considérer le cas du demi-remplissage.

En prenant la limite classique $t = 0$, on peut calculer la valeur du gap de charge défini en (III.10) et on trouve $\Delta_c = V$ qui est fini pour toute valeur de l'interaction : il s'agit d'un isolant. La question est de savoir si l'effet du terme quantique de saut peut délocaliser les électrons et redonner un comportement métallique.

Nous avons donc calculé le gap de charge pour différentes tailles et interactions. Après extrapolation, on observe sur la figure III.9 un comportement très similaire à celui observé pour le modèle t - V (figure III.4).

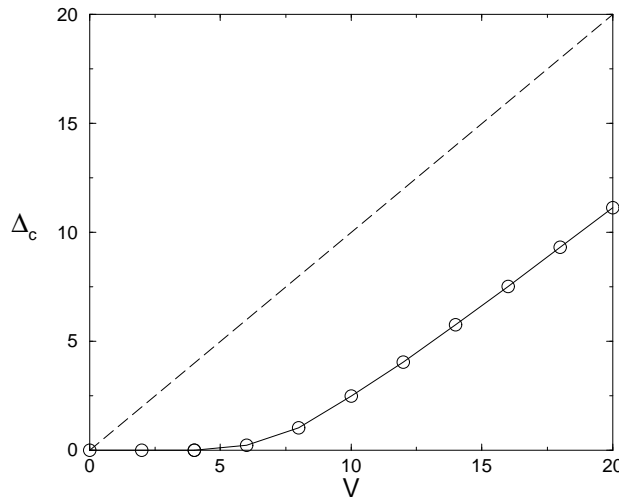


FIG. III.9 – Valeurs du gap à une particule (III.10) en fonction de l'interaction pour le cas de l'interaction coulombienne au demi-remplissage. Les symboles sont les extrapolations faites avec les résultats obtenus par diagonalisation exacte et la ligne en pointillés montre le comportement classique $\Delta_c = V$.

En poussant l'analogie entre les deux courbes, il semble se produire une transition métal-isolant pour une valeur finie de l'interaction $V_c/t \simeq 4$. Mais, comme nous l'avons déjà remarqué, ce résultat n'est pas très précis.

On peut plutôt évaluer les valeurs critiques $V_c(L)$ de taille finie pour lesquelles $K = 1/2$. Dans ce cas, il existe des effets de taille finie très importants et il est difficile de faire une extrapolation précise puisque, selon le type de régression, on aboutit à $V_c = 1,5$ ou 2. Quoi qu'il en soit, ce système présente des effets de taille finie tels qu'on peut se demander si il n'existe pas un *crossover*, et il faudrait des résultats sur des tailles bien plus grandes pour pouvoir trancher. En effet, nos données suggèrent une phase métallique seulement pour une interaction suffisamment faible alors que la bosonisation trouve un cristal de Wigner quel que soit V . Mais cette valeur critique est très difficile à calculer et il se pourrait que V_c tende vers 0 de manière logarithmique

comme le laisse supposer l'approche de bosonisation, puisqu'il existe un K effectif qui s'annule logarithmiquement en fonction de la taille.

Il est clair d'après nos données que, pour V suffisamment grand, les lois d'échelles de l'énergie et du poids de Drude ne sont plus respectées et on observe alors un comportement exponentiel avec la taille caractéristique d'un système avec gap : il s'agit d'un isolant dans cette limite. Ainsi, l'interaction coulombienne ne permet pas de stabiliser une phase métallique. Cet effet est dû au réseau puisque le système a tendance à former une onde de densité de charge qui va être « accrochée » au réseau, ce qui conduit à ce comportement isolant. Pour de faibles amplitudes, nos simulations indiquent une phase métallique mais toutefois, l'importance des effets de taille finie suggère qu'il existe un lent changement de régime et, au-delà d'une certaine taille, l'onde de densité peut être accrochée et le système devient isolant.

Après ces exemples qui reflètent les forces et faiblesses de la diagonalisation exacte, nous passons à une nouvelle méthode en cours de développement.

2 Méthode de Lanczos tronqué

2.1 Motivation

L'algorithme de Lanczos permet d'accéder à toutes les quantités souhaitées et avec une précision remarquable. Malheureusement, le seul défaut de la méthode est de ne pouvoir traiter que des petits systèmes, ce qui n'est pas toujours suffisant pour pouvoir extrapoler à la limite thermodynamique.

En utilisant des méthodes de chimie quantique [125], RIERA et DAGOTTO ont proposé d'améliorer les performances de cet algorithme en utilisant une portion seulement de l'espace de Hilbert pour des problèmes de fermions corrélés [126, 127]. À cause des difficultés dans le choix de la base, ils sont toutefois limités à certains modèles tel que $t-J_z$.

Ces idées ont regagné un peu d'intérêt dans l'étude des échelles de spin dopés. En effet, suite à la suggestion de certains théoriciens comme RICE comme quoi un tel système pourrait être supraconducteur, des composés ont effectivement été réalisés et confirment cette prédiction. Il s'ensuit dès lors une intense activité dans l'étude de ces échelles. Il apparaît comme bien établi que la tendance de ces systèmes est de former des singulets sur les barreaux. En effet, cela est clair dans le cas non dopé et à la limite d'un fort couplage sur les barreaux ; des arguments analytiques et numériques ont confirmé cette image au-delà du couplage fort. En introduisant deux trous dans un tel système, il est plus avantageux, d'un point de vue énergétique, pour les trous de se placer sur un même barreau : il apparaît un appariement effectif qui peut conduire à une condensation de ces paires et à de la supraconductivité. Bien entendu, ce scénario est trop simpliste et il faudrait pouvoir étudier ce problème plus précisément. DAGOTTO *et coll.* proposent à cet effet de réduire l'espace de Hilbert en ne gardant que certains états « importants » [128] afin de pouvoir accéder à de plus grosses tailles dans les simulations numériques. Mentionnons que cette idée consistant à restreindre le nombre d'états est également utilisée dans l'algorithme de DMRG (abréviation anglaise pour Groupe de Renormalisation de la Matrice Densité) qui a permis d'obtenir d'excellents

résultats pour les systèmes unidimensionnels [129, 130].

Pour l'instant, cette méthode de troncature de l'espace de Hilbert a été utilisée dans des échelles à deux montants. Nous proposons d'étendre cela à tout système constitué de sous-unités faiblement couplées. Cette méthode permettra alors de travailler avec de plus grands systèmes et d'obtenir une très bonne précision ; mais surtout, un énorme avantage est de conserver toutes les symétries du système comme dans l'algorithme de Lanczos.

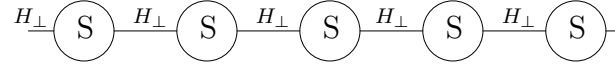


FIG. III.10 – Schéma générique de sous-systèmes S couplés par un hamiltonien H_{\perp} .

Nous allons détailler le principe de cet algorithme avant de passer à des exemples.

i) Principe

Imaginons un système constitué de sous-unités S régies par un hamiltonien H_0 faiblement couplées entre elles par un hamiltonien H_{\perp} (schématisé sur la figure III.10). L'idée de la méthode est de traiter le problème par la théorie des perturbations tout en conservant les symétries, et donc les nombres quantiques, du problème global.

On commence donc par diagonaliser complètement et exactement le problème dans un sous-système S et on stocke tous les états propres en fonction du remplissage et des nombres quantiques (impulsion, état de spin etc.). Puis, il va s'agir d'écrire la matrice de H_{\perp} dans la base formée par les produits tensoriels des états propres de S . En effet, par définition même de cette base, la partie H_0 qui ne couple pas les chaînes est diagonale et donc triviale à écrire. À l'inverse, l'opérateur H_{\perp} possède une structure simple dans la base des sites (il s'agira typiquement de couplage Heisenberg ou cinétique) mais sa matrice réécrite dans la base des produits tensoriels d'états propres possédera beaucoup moins d'éléments non nuls.

ii) Convergence de l'algorithme

Pour l'instant, il ne s'agit que d'une réécriture dans une nouvelle base et on peut toujours pas résoudre exactement le problème global. Nous allons donc procéder par itérations en ne gardant que les meilleurs états à chaque étape. Plus précisément, on démarre en prenant l'état formé par le produit tensoriel des fondamentaux de chaque sous-système S en l'absence de couplage ; puis, on applique H_{\perp} pour engendrer une base \mathcal{B} , dans laquelle nous diagonalisons H et nous calculons le fondamental. À partir de là, il ne faut conserver qu'un certain nombre d'états, par exemple ceux ayant un recouvrement avec le fondamental supérieur à un certain poids fixé à l'avance, et reprendre l'algorithme à l'étape initiale.

Bien entendu, dans un secteur de symétrie fixé, l'état fondamental exact du système est une combinaison linéaire de *tous* les vecteurs de base et, par conséquent, en se limitant à certains états seulement, on ne peut pas obtenir le fondamental *exact*. Par contre, on peut obtenir un état qui aura un recouvrement très proche de un avec le vrai fondamental et donc une très bonne approximation de l'énergie.

iii) Choix des états à conserver

À chaque étape de cet algorithme, il ne faut conserver que certains états qui doivent être les plus importants dans un certain sens à préciser. Nous avons proposé de prendre comme critère le recouvrement sur l'état fondamental mais nous voulons vérifier que d'autres choix conduisent aux mêmes états. En effet, dans une théorie de perturbations comme celle-ci, on sait que les états sont d'autant plus importants que leur énergie non perturbée est proche de celle du fondamental de H_0 , et, par conséquent, on peut ne garder que les états qui ont une énergie non perturbée proche de E_0 . Nous vérifions alors que ces états sont effectivement ceux qui ont un fort recouvrement avec le fondamental.

Nous allons présenter un exemple d'application de cet algorithme aux échelles de spin. Nous discuterons les performances de notre algorithme en comparant aux résultats exacts quand ils existent.

2.2 Exemple : modèle de Heisenberg bidimensionnel anisotrope

Il s'agit d'étudier le modèle de Heisenberg sur un réseau $L \times p$ mais avec une intégrale d'échange très petite dans une direction. Un autre point de vue consiste à dire que nous étudions une échelle de spins de longueur L dont les barreaux comporte p sites. Le hamiltonien peut contenir plusieurs sortes de termes

$$H = J \sum_{i,j} \vec{S}_{i,j} \cdot \vec{S}_{i+1,j} + J_2 \sum_{i,j} \vec{S}_{i,j} \cdot \vec{S}_{i+2,j} + J_{\perp} \sum_{i,j} \vec{S}_{i,j} \cdot \vec{S}_{i,j+1} \quad (\text{III.15})$$

où J_{\perp} est l'intégrale d'échange supposée petite dans la direction des L sites et des conditions aux limites périodiques sont utilisées dans les deux directions.

i) Précision de l'énergie

Commençons par le cas non frustré $J_2 = 0$ et examinons la précision de notre algorithme en calculant le recouvrement entre le fondamental obtenu et le fondamental exact calculé par un algorithme de Lanczos

$$O = |\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle_{\text{app}}|^2. \quad (\text{III.16})$$

Nous montrons sur la figure III.11 ce résultat pour un système 6×4 en fonction de la fraction d'états conservés. Nous voyons qu'il existe un excellent recouvrement entre notre état variationnel et le vrai fondamental même en ne gardant qu'un faible nombre d'états. Bien entendu, nous obtenons alors une énergie qui est également très précise. Sur la figure III.12, nous montrons le logarithme décimal de l'erreur sur l'énergie du fondamental en fonction du nombre d'états et, plus précisément, de la fraction de ce nombre par rapport à la taille totale de l'espace de Hilbert dans ce secteur de symétrie. Cette erreur décroît très rapidement dès qu'on inclut des états supplémentaires dans notre base variationnelle.

Revenons maintenant sur le critère de choix des états à conserver dans la construction de la base tronquée. Il s'agit de ne conserver que les états ayant un recouvrement avec le fondamental supérieur à une valeur ε fixée à l'avance. Afin d'avoir une idée de

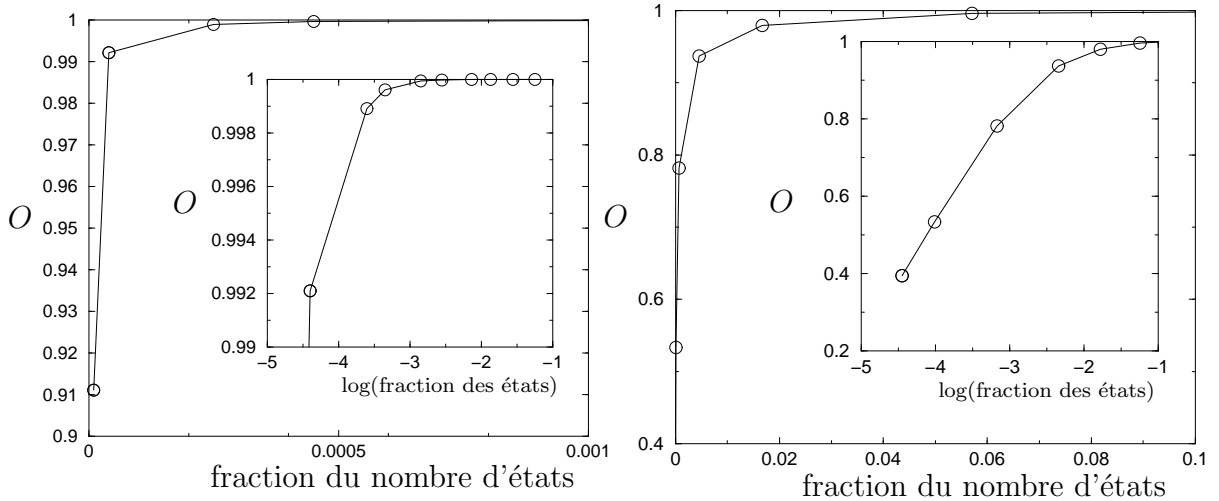


FIG. III.11 – Recouvrement O (III.16) entre l'état fondamental du hamiltonien de Heisenberg et son approximation en ne conservant qu'une fraction de l'espace de Hilbert. En insert, la même quantité tracée en fonction du logarithme de la fraction des états. Il s'agit d'un système 6×4 avec $J_{\perp}/J = 0,2$ (à gauche) et $J_{\perp}/J = 1$ (à droite).

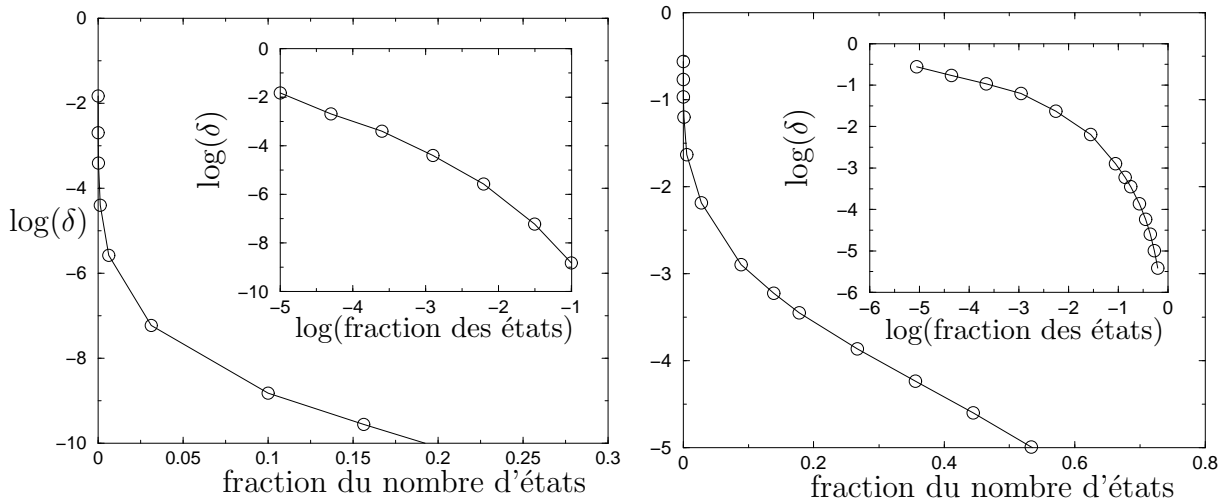


FIG. III.12 – Logarithme de l'erreur sur l'énergie $\delta = |E - E_0|/E_0$ en fonction de la fraction du nombre d'états conservés. En insert, la même quantité en échelle logarithmique montre la précision de cet algorithme. Il s'agit d'un système de Heisenberg 6×4 avec $J_{\perp}/J = 0,2$ (à gauche) et $J_{\perp}/J = 1$ (à droite).

ce nombre d'états, nous traçons sur la figure III.13 ce nombre pour plusieurs valeurs de ε . Comme le montre l'insert en échelles logarithmiques, le nombre des états négligés (c'est-à-dire ceux ayant un poids inférieur à ε) croît avec une loi de puissance lorsque ε décroît ; on peut donc légitimement se demander si le fait de négliger ce très grand nombre d'états est raisonnable. Pour cela, nous calculons le poids total de ces états négligés (voir la figure III.14) en fonction de ε . La bonne surprise apparaît alors : même si les états négligés sont en très grand nombre, leur poids *total* reste arbitrairement

petit ce qui permet d'obtenir l'état fondamental avec une très bonne précision en ne conservant qu'une petite fraction de l'espace de Hilbert. Bien entendu, ces résultats sont consistants avec la précision sur l'énergie calculée précédemment.

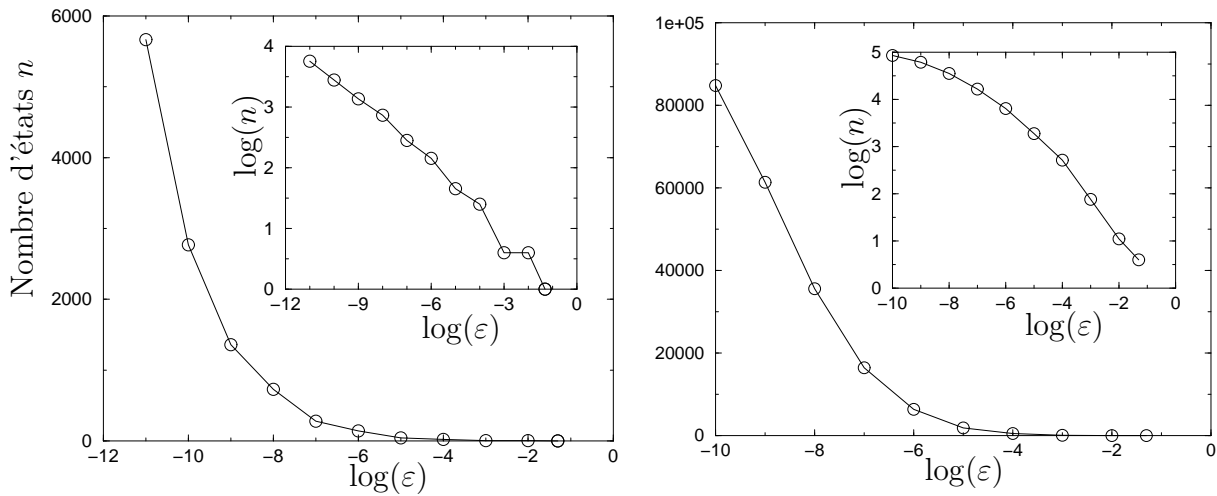


FIG. III.13 – Nombre des états ayant un recouvrement avec le fondamental supérieur à ϵ en fonction de $\log(\epsilon)$. En insert, la même quantité tracée en échelle logarithmique. Il s'agit d'un système 6×4 avec $J_{\perp}/J = 0,2$ (à gauche) et $J_{\perp}/J = 1$ (à droite).

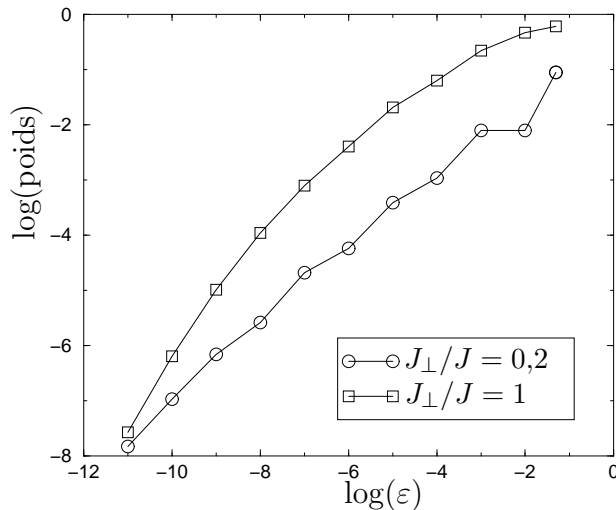


FIG. III.14 – Poids total des états dont le recouvrement avec le fondamental est inférieur à ϵ en fonction de ϵ et en échelles logarithmiques pour un système 6×4 avec $J_{\perp}/J = 0,2$ et $J_{\perp}/J = 1$.

Nous avons également vérifié que l'énergie diagonale des états conservés était basse et on pourrait penser utiliser ce critère de sélection. En fait, il est moins pertinent puisqu'il existe des états d'énergie diagonale basse ayant un recouvrement infinitésimal avec le vrai fondamental. Nous continuerons donc à sélectionner les états en fonction de leur recouvrement.

ii) Calcul des fonctions de corrélation

Une fois l'état fondamental calculé, il est possible de lui appliquer les opérateurs de spin pour obtenir les fonctions de corrélation. Nous nous concentrons sur la fonction de corrélation transverse

$$C(r) = (-1)^r \langle \vec{S}_{1,1} \cdot \vec{S}_{1,r+1} \rangle = 3(-1)^r \langle S_{1,1}^z S_{1,r+1}^z \rangle \quad (\text{III.17})$$

où l'égalité provient de l'invariance par rotation de spin du fondamental qui est un singulet. Nous avons vérifié numériquement cette invariance en calculant séparément les valeurs moyennes des opérateurs de spin selon z ainsi que $\langle S^+ S^- + h.c. \rangle$. Le facteur $(-1)^r$ permet d'avoir une quantité positive puisque les chaînes ont des corrélations antiferromagnétiques.

Lorsque J_\perp est petit et pour des barreaux comportant un nombre pair de sites, il existe un gap de spin qui décroît exponentiellement avec la taille p des barreaux. La fonction de corrélation définie ci-dessus va donc avoir une décroissance exponentielle avec une longueur de corrélation de l'ordre de l'inverse du gap. Nous montrons sur la figure III.15 les résultats obtenus sur des échelles $p = 4$ pour différentes longueurs. Dans le cas où le gap est suffisamment grand, il existe peu d'effets de taille finie et les fonctions de corrélations ne dépendent quasiment pas de la longueur du système.

Bien sûr, comme nous utilisons des conditions aux limites dans les deux directions, on ne peut pas calculer la fonction de corrélation au-delà de $L/2$. Pour cette valeur d'ailleurs, on s'attend à une augmentation des corrélations comme cela est observé sur la figure III.15.

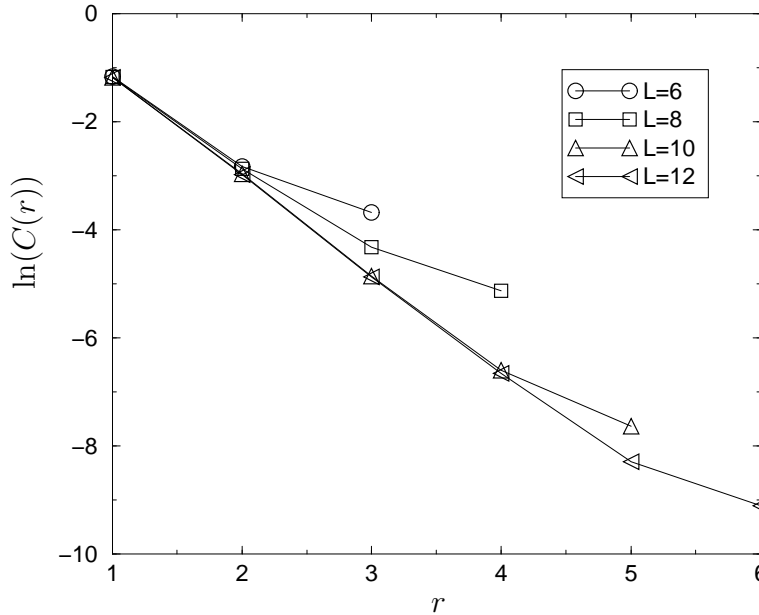


FIG. III.15 – Fonction de corrélation $C(r)$ définie en (III.17) pour des systèmes $L \times 4$ avec $L = 6, 8, 10$ et 12 et $J_\perp/J = 0,2$. Le tracé est linéaire en échelle logarithmique, ce qui est typique d'un comportement avec gap $C(r) \sim \exp(-r/\xi)$.

2.3 Conclusions et perspectives

Cet algorithme de troncature de l'espace de Hilbert paraît très prometteur dans l'étude des systèmes corrélés faiblement couplés tels que les échelles de spins, éventuellement dopées. Ces modèles sont particulièrement pertinents pour la compréhension des systèmes expérimentaux ayant ces géométries. En outre, l'usage de conditions périodiques dans *toutes* les directions devrait permettre de minimiser les effets de tailles finies et d'accéder à des systèmes bidimensionnels. En effet, un des défis pour l'avenir est de comprendre si, dans un modèle t - J bidimensionnel, les trous s'organisent selon des bandes (*stripes* en anglais) comme cela est observé dans les cuprates sous-dopés [131, 132]. Ce comportement est également observé lors de simulations par la méthode DMRG d'échelles t - J mais cela pourrait être un artefact dû à l'utilisation de conditions aux bords *ouvertes* (voir [133] pour les références ainsi qu'une discussion récente). Nous pensons que notre algorithme peut donner des indications sur la physique d'un tel système.

3 Monte-Carlo Quantique

Le nom de l'algorithme de Monte-Carlo provient du hasard qui joue un rôle essentiel dans un jeu très prisé dans la principauté éponyme. Contrairement à ce que l'on pense, ce jeu n'a pas lieu dans les casinos mais sur les plages de Monaco où les enfants jettent en fermant les yeux des pierres sur un carré et un cercle tangent intérieurement tracés dans le sable. La motivation est que le nombre de cailloux tombés à l'intérieur du cercle divisé par le nombre de cailloux lancés dans le carré vaut typiquement $\pi/4$ (si suffisamment de cailloux sont lancés) et que l'on obtient une estimation de π de manière on ne peut plus simple [134].

La méthode Monte-Carlo Quantique (MCQ) est fondamentalement différente de la Diagonalisation Exacte. Le Monte-Carlo permet d'obtenir des résultats sur des réseaux plus grands mais ces mêmes résultats sont soumis à des fluctuations statistiques. D'autre part, le Monte-Carlo n'est pas applicable aux problèmes frustrés à cause du problème de « signe moins » dont nous parlerons plus loin.

Après avoir rappelé la version classique en suivant [134], nous présenterons la méthode qui est à la base de tous les calculs sur réseau : le Monte-Carlo déterminantal.

3.1 Bases du Monte-Carlo classique

Avant de s'attaquer au problème du Monte-Carlo quantique pour fermions sur réseau, nous allons rapidement évoquer le cas classique, typiquement pour le modèle d'Ising. L'idée est de partir par exemple d'un état initial aléatoire noté l et à partir de ce dernier de visiter toutes les régions de l'espace des états. Pour cela, il faut engendrer un nouvel état l' à partir de l . On peut par exemple (car il y a de nombreuses possibilités) retourner un spin choisi aléatoirement. Ainsi, en un nombre fini d'opérations, il est possible de passer d'un état quelconque du système à un autre état quelconque. Ce nouvel état est ensuite accepté ou rejeté avec une probabilité $P(l \rightarrow l')$ qui dépend des énergies des deux états. On est à l'équilibre thermodynamique et la condition de bilan

détaillé est vérifiée :

$$P(l \rightarrow l')P_{eq}(l) = P(l' \rightarrow l)P_{eq}(l'),$$

où $P_{eq}(l)$ est la distribution de Boltzmann. Le choix de la probabilité $P(l \rightarrow l')$ est alors arbitraire. Par exemple, on accepte le nouvel état avec une probabilité type bain de chaleur :

$$P(l \rightarrow l') = P_{eq}(l')/(P_{eq}(l) + P_{eq}(l')). \quad (\text{III.18})$$

En effet, il est facile de voir que la condition de bilan détaillé est alors vérifiée. Ainsi on engendre une série d'états (l). Chaque état va être visité un nombre de fois proportionnel à son poids de Boltzmann. Si l'on s'intéresse à la valeur moyenne $\langle A \rangle$ d'une variable A , on a donc

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{(l)} A(l), \quad (\text{III.19})$$

où N est le nombre d'états engendrés et $A(l)$ la valeur de A dans l'état l . Il est à noter que l'erreur induite varie en $1/\sqrt{N}$.

3.2 Version quantique

Il existe de nombreuses versions quantiques et nous présentons celle qui est le plus appropriée pour le traitement des problèmes de fermions sur réseau. Il s'agit du Monte-Carlo « déterminantal » (voir [135, 136] pour les fondements ou [137] et les références incluses pour des applications récentes).

Afin de préciser quelques notations, nous allons étudier le cas du modèle de Hubbard

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (\text{III.20})$$

qui a le mérite d'être simple et pourtant qui reste encore non résolu excepté en une dimension.

Le calcul des propriétés physiques à température finie T se résume à l'évaluation de traces d'opérateurs comme, par exemple, la fonction de partition $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$ où $\beta = 1/kT$. Il existe alors une certaine analogie avec un problème classique d'une dimension supérieure appelée temps imaginaire par similarité avec la formulation en temps imaginaire des intégrales de chemin de Feynman. On discrétise également cet axe β en L tranches afin de pouvoir utiliser la formule de Trotter comme l'a proposé SUZUKI en 1976 [138, 139] :

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H} \simeq \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} \exp(-\Delta\tau (U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}))), \quad (\text{III.21})$$

où H_0 représente la partie cinétique quadratique et $\beta = L\Delta\tau$. L'erreur commise en remplaçant l'exponentielle d'une somme par le produit des exponentielles des opérateurs est d'ordre $\mathcal{O}(\Delta\tau^2 t U)$ puisque ces opérateurs ne commutent pas. Nous verrons plus tard comment s'affranchir de cette erreur.

L'idée de base repose sur l'observation de BLANKENBECLER, SUGAR et SCALAPINO (BSS) [135] résumée par cette formule :

$$\text{Tr} [\exp(\sum_{ij} c_i^\dagger A_{ij} c_j) \exp(\sum_{ij} c_i^\dagger B_{ij} c_j) \cdots] = \det[1 + e^A e^B \cdots] \quad (\text{III.22})$$

(pour *toutes* les matrices A et B). L'intérêt de cette formule est énorme : le terme de gauche est une exponentielle d'opérateurs de création et de destruction avec les coefficients de la matrice A alors que le terme de droite n'est que l'exponentielle de la matrice A . Grâce à cette formule, on sait traiter les opérateurs bilinéaires. Il reste donc à transformer les termes d'interaction qui sont d'ordre quatre².

Pour cela, HIRSCH en 1983 [140] avait proposé de réduire les termes d'ordre quatre en termes bilinéaires à l'aide d'une transformation de Hubbard-Stratonovitch

$$e^{-\Delta\tau U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} = \text{Tr}_\sigma \exp(\lambda\sigma(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \frac{\Delta\tau U}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})) \quad (\text{III.23})$$

avec $\lambda = 2 \arctan \sqrt{\tanh(\Delta\tau U/4)}$ et on note l'apparition d'un champ auxiliaire discret σ qui peut être vu comme un spin d'Ising placé en chaque site et pour chaque tranche $\Delta\tau$ considérée.

Les termes de fermions étant quadratiques, on peut dès lors calculer leur trace exactement à l'aide de la formule « magique » (III.22) (elle s'exprime comme un déterminant d'où le nom de la méthode) et, finalement, la fonction de partition s'écrit sous la forme [135] :

$$Z = \sum_{\text{spins d'Ising}} \det[1 + e^{-\Delta\tau K} e^{V^+(L)} e^{-\Delta\tau K} e^{V^+(L-1)} \cdots] \det[1 + e^{-\Delta\tau K} e^{V^-(L)} e^{-\Delta\tau K} e^{V^-(L-1)} \cdots], \quad (\text{III.24})$$

où K est la matrice associée à H_0 , c'est-à-dire $H_0 = \sum_{ij} c_i^\dagger K_{ij} c_j$ et les opérateurs V^\pm s'obtiennent selon la méthode de HIRSCH [141]

$$V_{ij}^\pm(l) = \delta_{ij} [\pm\lambda\sigma_i(l) - \Delta\tau(\mu - U/2)].$$

et on a abouti ainsi à un problème classique de spins d'Ising avec un pseudo-poids de Boltzmann qui correspond au produit des déterminants.

Très grossièrement, on est donc passé d'un problème de fermions quantiques à un problème plus simple, celui de spins d'Ising pour lequel il existe des algorithmes (le plus simple étant celui de Métropolis). Néanmoins, cette méthode possède quelques défauts.

Le premier est le produit de matrices dans la formule BSS (III.22). En d'autres mots, si deux matrices sont hermitiennes, leur produit n'a que peu de chances de l'être ce qui rend les calculs instables.

Le second et le plus grave est le célèbre problème du signe qui en fait est tout aussi présent dans cet algorithme. En effet, le pseudo-poids Boltzmann est représenté

2. La même procédure peut s'appliquer aux termes électrons-phonons etc.

par des éléments de matrice non diagonaux et rien ne garantit qu'il soit positif. Dans certains cas comme le modèle de Hubbard au demi-remplissage, on peut montrer que c'est le cas [141] mais, par exemple dans les systèmes frustrés et à basse température, au bout d'un certain nombre d'itérations apparaît un signe moins dans les « poids de Boltzmann », ce qui rompt l'analogie avec le système d'Ising et donc sa résolution.

D'un point de vue pratique également, on ne peut prendre $\Delta\tau$ aussi petit que l'on désire car alors le taux d'acceptation des nouvelles configurations locales devient très petit. Il faut donc recommencer cette procédure pour différents $\Delta\tau$ et prendre la limite $\Delta\tau \rightarrow 0$.

Nous allons voir que cette méthode permet également en principe de calculer les propriétés dynamiques.

3.3 Calcul des fonctions de corrélation dynamiques

Nous allons maintenant évoquer en quelques mots le calcul des fonctions de corrélation dynamiques par Monte-Carlo Quantique. Il est relativement difficile de les obtenir. En effet, la transformée de Fourier temporelle des fonctions de corrélation $G(\tau)$ que l'on peut facilement évaluer conduit à des fréquences imaginaires (il ne faut pas oublier que le temps utilisé est lui-même imaginaire). Il est donc nécessaire de réaliser une continuation analytique de la fonction sur l'axe réel. Cela n'est pas aisé car on a affaire non à une fonction continue et bien définie mais à un ensemble discret de points avec des fluctuations statistiques. Ainsi, de nombreuses solutions peuvent être trouvées et une toute petite différence sur les données change notablement le spectre. La méthode la plus utilisée est la technique d'entropie maximale [142, 143, 144]. Typiquement, elle consiste à calculer, pour obtenir une fonction spectrale $A(\omega)$ positive (dans le cas des fermions) et normée, la fonction de corrélation en temps imaginaire et à passer en temps réel tout en maximisant une quantité S naturellement appelée entropie :

$$S = \sum_i \left(A(\omega_i) - m(\omega_i) - A(\omega_i) \ln \frac{A(\omega_i)}{m(\omega_i)} \right), \quad (\text{III.26})$$

où $m(\omega)$ est appelé « modèle par défaut », c'est-à-dire est une première estimation (régulière) de $A(\omega)$. En fait, la densité spectrale $A(\omega)$ est interprétée, vu ses propriétés, comme une densité de probabilité et ce qui est en général extrait des données est la densité spectrale la plus probable. Souvent, comme on ne connaît pas la forme de la solution (sinon il ne serait pas utile de faire un traitement numérique), $m(\omega)$ est choisie plate avec une amplitude satisfaisant la règle de somme.

Chapitre IV

Étude de systèmes de chaînes de fermions couplées

Après avoir décrit d'un point de vue théorique la physique unidimensionnelle, nous passons maintenant à l'étude de la transition dimensionnelle, afin de savoir si certaines des propriétés du liquide de Luttinger persistent en dimension plus élevée. Le système le plus simple est constitué de chaînes couplées par un terme de saut t_{\perp} . Le premier effet d'un tel terme est de permettre la formation d'un état ordonné à longue portée. En effet, en une dimension, les corrélations décroissent en loi de puissance et le système est critique en accord avec le théorème de MERMIN-WAGNER [3]. Pour des chaînes couplées, les corrélations divergentes vont se propager dans la direction transverse. En outre, en fonction de la température, il peut exister un ordre tridimensionnel comme cela est observé expérimentalement.

Naïvement, on s'attend à ce que pour des températures $k_B T > t_{\perp}$, les excitations thermiques masquent la déformation de la surface de Fermi, si bien que le système se comporte comme si les chaînes étaient effectivement découplées : c'est le régime de liquide de Luttinger. Par contre dès que $k_B T < t_{\perp}$, les aspects bidimensionnels ou tridimensionnels de la surface de Fermi deviennent visibles et il devrait apparaître une cohérence transverse. Nous étudierons en détail cette notion de cohérence dans la première partie.

Ensuite, dans une deuxième partie, nous rappellerons les différentes propositions faites en particulier pour le système de deux chaînes, qui est le plus simple pour étudier l'effet de t_{\perp} . Mais, même si ce système reste suffisamment simple pour pouvoir appliquer certaines des méthodes que nous avons vu en une dimension, il est pertinent pour des composés réels qui ont pour structure cristallographique des échelles faiblement couplées et qui présentent un diagramme de phase très riche : on peut mentionner l'apparition d'une phase supraconductrice sous pression dans le composé $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [145], l'existence d'un gap de spin dans le composé pur etc.

Nous mentionnons également le cas d'un grand nombre de chaînes couplées. Ce problème a été abordé depuis longtemps déjà : dès 1974, GORKOV et DZHALOSHINSKI ont discuté comment les propriétés du liquide de Luttinger pouvaient être détruites par un couplage transverse. Depuis, de nombreux auteurs ont abordé ce point avec diverses méthodes. La difficulté est que le système évolue vers un nouveau point fixe de couplage

fort. Or, en l'absence d'alternatives en deux dimensions, les gens pensent qu'il s'agit d'un liquide de Fermi. Récemment, ANDERSON *et coll.* [146, 74] ont repris l'étude de deux chaînes en arguant que ce système était suffisant pour étudier la cohérence du saut interchaîne et ils ont proposé un nouveau type de métal susceptible de rendre compte des résultats expérimentaux troublants observés à la fois dans les composés organiques quasi unidimensionnels et dans les matériaux supraconducteurs à haute température critique.

Nous montrerons alors comment des simulations numériques, faites à partir d'un hamiltonien microscopique réaliste, montrent que le terme de saut effectif est fortement renormalisé par les interactions, en accord avec les prédictions du groupe de renormalisation. Nous discuterons également l'importance des processus de sauts de paires qui sont dominants dans les régions de couplage fort et qui doivent être pris en compte. Nous étudierons avec soin les propriétés spectrales d'une échelle de fermions et nous discuterons dans ce cas les effets des degrés de liberté de spin. Puis, nous proposerons une géométrie particulière dans laquelle l'étude de la cohérence du saut interchaîne est particulièrement pertinente. Enfin, nous parlerons des propriétés de transport transverse qui restent mal comprises du point de vue expérimental.

1 Problématique

Comme nous allons le voir dans la suite, l'effet d'un couplage interchaîne a été étudié par de nombreuses méthodes au cours des dernières années. Cependant, il n'existe pas de solution exacte même au sens du groupe de renormalisation, et l'existence d'opérateurs pertinents permet de prouver l'instabilité du liquide de Luttinger mais ne caractérise en aucune manière le nouveau point fixe. Ainsi, en l'absence d'alternatives, la croyance était qu'un liquide de Fermi était stabilisé en deux dimensions.

BOURBONNAIS et CARON [147, 33] ont proposé un schéma de renormalisation à la fois des interactions et de t_{\perp} qui inclut tous les processus possibles. Ils trouvent que le saut interchaîne à une particule est pertinent si $\alpha < 1$ et conduit à une valeur effective renormalisée

$$t_{\perp}^* = t (t_{\perp}/t)^{1/(1-\alpha)}, \quad (\text{IV.1})$$

où α est l'exposant anormal du liquide de Luttinger. Cela se traduit par une température caractéristique $T_x^1 \simeq t_{\perp}^*$ qui donne l'échelle d'énergie au-dessous de laquelle t_{\perp} donne des effets tels que la formation d'une surface de Fermi tridimensionnelle¹.

Outre cette renormalisation, ces auteurs prédisent l'apparition de sauts de paires de particules pour une température T_x^2 telle que

$$T_x^2 \sim t (t_{\perp}/t)^{1/(1-K)}. \quad (\text{IV.2})$$

Mais, dans les années 90, ANDERSON a revisité ce modèle et a proposé un nouveau type de métal [146]. Il a souligné l'importance de la séparation spin-charge qui

1. Bien entendu, il ne s'agit pas d'une transition de phase mais d'un changement de régime ou *crossover*. Éventuellement, les interactions résiduelles peuvent conduire à une phase de symétrie brisée à plus basse température.

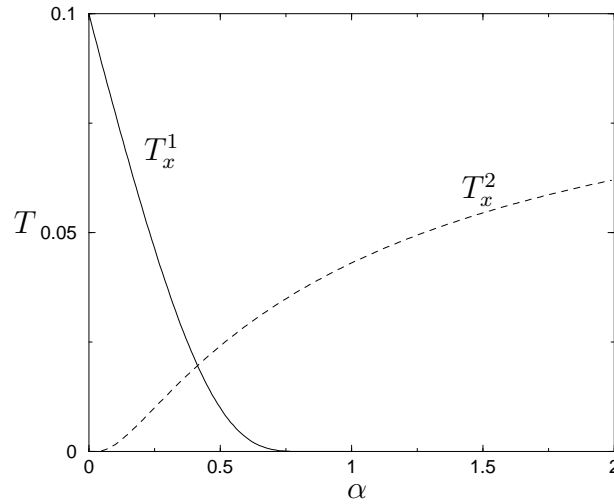


FIG. IV.1 – Schéma de la variation des températures caractéristiques d’instabilité à une (T_x^1) et deux (T_x^2) particules (voir texte) en fonction de α (dans cet exemple, $t_\perp = 0,1$ et $t = 1$) (d’après [34]).

existe en une dimension et a insisté sur le fait que la procédure correcte consistait à d’abord brancher les interactions sur les chaînes avant de considérer le couplage t_\perp . Il a alors suggéré qu’un faible saut interchaîne ne modifiait pas la structure de bande dans la direction transverse même dans le cas où ce saut était pertinent au sens du groupe de renormalisation, c’est-à-dire $\alpha < 1$. À la place, il se produit un *confinement par décohérence* et le système garde un caractère non-liquide de Fermi, le mouvement transverse des électrons étant seulement diffusif. Par contre, le saut de paires (couplage de type Josephson) peut exister et un tel métal peut se comporter comme un supraconducteur anisotrope avec des propriétés de transport transverses proches de celles observées expérimentalement dans les cuprates.

Nous allons discuter plus précisément ces idées de pertinence et de cohérence du saut interchaîne.

1.1 Pertinence des termes de saut

Suite à la suggestion d’ANDERSON concernant la possibilité de trouver un comportement incohérent du saut interchaîne même pour un système de deux chaînes, NERSESYAN, LUTHER et KUSMARTSEV ont étudié un système de deux liquides de Luttinger sans spin couplés par un terme cinétique [148].

i) Hamiltonien

Le modèle étudié par NERSESYAN *et coll.* peut se voir comme la limite continue du hamiltonien sur réseau suivant

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{j,p} (c_{j+1,p}^\dagger c_{j,p} + \text{H.c.}) + V \sum_{j,p} n_{j,p} n_{j+1,p} \\
 & - t_\perp \sum_j (c_{j,1}^\dagger c_{j,-1} + \text{H.c.}) + U \sum_j n_{j,1} n_{j,-1}
 \end{aligned}
 \tag{IV.3}$$

pour deux chaînes désignées par les indices $p = \pm 1$. En considérant que cet indice désigne un degré de liberté de spin, il existe une analogie formelle avec un problème d'une seule chaîne de fermions avec spin possédant des interactions anisotropes de spin et, dans la suite, on emploiera de manière équivalente les deux modèles.

La forme bosonisée de ce hamiltonien s'obtient très facilement en introduisant les opérateurs bosoniques pour chaque chaîne, puis en transformant le terme de saut interchaîne à l'aide de la formule (II.16) pour obtenir :

$$\begin{aligned}
 H &= H_\rho + H_\sigma \quad \text{avec} \quad H_\rho = \int \frac{dx}{2\pi} (u_\rho K_\rho (\pi \Pi_\rho)^2 + \frac{u_\rho}{K_\rho} (\partial_x \phi_\rho)^2) \\
 H_\sigma &= \int \frac{dx}{2\pi} (u_\sigma K_\sigma (\pi \Pi_\sigma)^2 + \frac{u_\sigma}{K_\sigma} (\partial_x \phi_\sigma)^2) + \frac{t_\perp}{\pi \alpha} \int dx \cos \sqrt{2} \phi_\sigma \cos \sqrt{2} \theta_\sigma.
 \end{aligned}
 \tag{IV.4}$$

À partir de cette forme, on peut comprendre le rôle du saut interchaîne grâce aux équations de renormalisation. Notons que le mode ρ est un mode sans masse décrit par un hamiltonien de Luttinger pur. Ainsi, dans la suite, nous nous concentrons sur H_σ et nous ne notons plus l'indice σ .

ii) Pertinence du saut à une particule

En appliquant un simple comptage de puissance, c'est-à-dire en évaluant la dimension de l'opérateur de saut, on est capable d'écrire les équations de renormalisation au premier ordre. D'après la formule (II.27), on calcule les dimensions des opérateurs $[\cos \sqrt{2}\phi] = K/2$ et $[\cos \sqrt{2}\theta] = 1/2K$ et on en déduit l'équation de renormalisation du terme de saut

$$\frac{dt_\perp}{dl} = \left(2 - \frac{K}{2} - \frac{1}{2K}\right) t_\perp = (1 - \alpha) t_\perp.
 \tag{IV.5}$$

On en conclut que t_\perp est un champ pertinent lorsque $\alpha < 1$ ou de manière équivalente lorsque $2 - \sqrt{3} < K < 2 + \sqrt{3}$. En dehors de ces valeurs, le saut interchaîne n'est pas pertinent et le système se comporte à basse énergie comme deux liquides de Luttinger découplés. On peut noter que ces valeurs de α sont extrêmement élevées et nécessitent des interactions très fortes et peu écrantées.

En intégrant cette équation, on peut calculer la valeur effective du couplage interchaîne (déjà mentionnée en IV.1) qui est reliée au poids de quasi-particule par la formule

$$t_\perp^* = t_\perp Z(t_\perp) \sim t_\perp^{1/(1-\alpha)}
 \tag{IV.6}$$

iii) Apparition d'instabilités de paires

Le raisonnement naïf exposé précédemment oublie de regarder si de nouveaux termes n'apparaissent pas de manière effective lors du processus de renormalisation. De manière plus formelle, le spin conforme du terme t_\perp est non nul et il faut faire un traitement plus détaillé [149]. Pour cela, il faut développer la fonction de partition en puissance de t_\perp et analyser les nouveaux termes créés. C'est ce qu'à fait YAKOVENKO [150] et que nous reproduisons ici.

Dès le deuxième ordre en t_\perp , on engendre des termes $\cos \sqrt{8}\phi$ et $\cos \sqrt{8}\theta$ qu'il faut

inclure dans le hamiltonien effectif sous la forme

$$\frac{2}{(2\pi\alpha)^2} \int dx (J \cos \sqrt{8}\phi + \tilde{J} \cos \sqrt{8}\theta)$$

et qui donnent les équations de renormalisation suivantes [150, 148]

$$\begin{cases} \frac{dJ}{dl} = 2(1-K)J + (K - \frac{1}{K}) t_{\perp}^2 \\ \frac{d\tilde{J}}{dl} = 2(1 - \frac{1}{K})\tilde{J} - (K - \frac{1}{K}) t_{\perp}^2 \end{cases} \quad (\text{IV.8})$$

Ainsi, quelle que soit la valeur de K différente de 1, il existe toujours un de ces processus qui devient pertinent et qui va dominer à basse énergie. Ces résultats ont également été trouvés par SCHULZ [13]. On peut également tenir compte de la renormalisation de K [148]:

$$\frac{dK}{dl} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{K} \tilde{J}^2 - K J^2 \right)$$

mais nous ne le ferons pas ici par souci de simplicité. Cela implique que le liquide de Luttinger n'est pas stable à température nulle.

Dans le cas répulsif et avec les conditions initiales $t_{\perp}(0) = t_{\perp}$ et $J(0) = 0$, le flot peut être intégré pour obtenir

$$J = \frac{t_{\perp}^2}{2\pi v_F} \frac{K - 1/K}{K - 1/K + 2} (e^{2(1-\alpha)l} - e^{2(1-K)l}).$$

Sur cette expression, on voit la compétition entre deux termes. Le premier est directement relié au saut à une particule tandis que le second est purement un terme à deux particules. Pour $K < \alpha$, le deuxième terme va dominer aux grands l et on s'attend à un changement de régime pour

$$\alpha = \alpha_{2P} = K_{2P} = \sqrt{2} - 1 \simeq 0,41. \quad (\text{IV.10})$$

La méthode de résolution de ces équations couplées consiste à regarder quelle constante de couplage devient de l'ordre de la largeur de bande en premier, ce qui permet alors d'injecter sa valeur dans les autres équations. Ainsi, on trouve que dans le régime $\alpha < \alpha_{2P}$, t_{\perp} est fortement renormalisé mais les processus de paires, initialement nuls, restent négligeables à cette échelle d'énergie. On passe donc d'un liquide de Luttinger à un régime décrit par deux bandes. Éventuellement, à plus basse température, il peut exister une transition de phase.

Dans le régime à deux particules $\alpha > \alpha_{2P}$ et pour le cas répulsif, le saut d'une paire particule-trou J devient de l'ordre de la largeur de bande alors que t_{\perp} est toujours petit. On s'attend donc à avoir une transition vers une Onde de Densité pour une infinité de chaînes. Le cas attractif s'obtient en échangeant les rôles de K et $1/K$ et on peut donc également définir un régime $K > K_{2P} = \sqrt{2} + 1$ où les processus de sauts de paires de particules font basculer le système dans une phase supraconductrice. Notons que dans

ces deux cas, il existe une transition depuis un régime de Luttinger vers une phase à symétrie brisée sans passer par un liquide de Fermi.

Par contre, la compétition entre plusieurs opérateurs pertinents n'est pas résolue et il faut disposer de méthodes non perturbatives pour discuter le nouveau point fixe de couplage fort.

iv) Modes symétriques et antisymétriques

Pour ce faire, NERSESYAN *et coll.* ont introduit les combinaisons linéaires liante et antiliante qui diagonalisent le problème à deux chaînes sans interactions :

$$\begin{aligned}\psi_0 &= \frac{\psi_1 + \psi_{-1}}{\sqrt{2}} \\ \psi_\pi &= \frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{\sqrt{2}}\end{aligned}\tag{IV.11}$$

En réécrivant le hamiltonien (IV.3) en fonction de ces variables, on peut bosoniser en introduisant les champs θ et ϕ associés à ces modes. Puis, en passant aux modes symétriques et antisymétriques définis par

$$\begin{aligned}\theta_+ &= \frac{\theta_0 + \theta_\pi}{\sqrt{2}} & \phi_+ &= \frac{\phi_0 + \phi_\pi}{\sqrt{2}} \\ \theta_- &= \frac{\theta_0 - \theta_\pi}{\sqrt{2}} & \phi_- &= \frac{\phi_0 - \phi_\pi}{\sqrt{2}},\end{aligned}$$

on obtient finalement

$$\begin{aligned}H &= H_+ + H_- \quad \text{avec} \quad H_+ = \int \frac{dx}{2\pi} (u_+ K_+ (\pi \Pi_+)^2 + \frac{u_+}{K_+} (\partial_x \phi_+)^2) \\ \text{et} \quad H_- &= \int \frac{dx}{2\pi} (u_- K_- (\pi \Pi_-)^2 + \frac{u_-}{K_-} (\partial_x \phi_-)^2) + \frac{t_\perp \sqrt{2}}{\pi} \int dx \partial_x \phi_- \\ &\quad + \frac{2}{(2\pi\alpha)^2} \int dx (J \cos \sqrt{8}\phi_- + \tilde{J} \cos \sqrt{8}\theta_-)\end{aligned}\tag{IV.12}$$

Le terme proportionnel à t_\perp tend à imposer une valeur moyenne non nulle à ϕ_- égale à $\langle \phi_- \rangle = -\sqrt{8}t_\perp K_- x/u_-$. Au contraire, le terme $J \cos \sqrt{8}\phi_-$ tend à imposer une valeur moyenne pour ce champ égale à 0 ou $\pi/\sqrt{8}$ selon le signe de J . Il y a donc une compétition entre ces effets. En outre, le terme $\tilde{J} \cos \sqrt{8}\theta_-$ favorise une valeur moyenne constante pour θ_- , ce qui est incompatible avec une valeur moyenne constante pour ϕ_- puisque ces deux champs sont canoniquement conjugués et ne peuvent pas être simultanément ordonnés.

v) Analogie avec une chaîne anisotrope de fermions avec spin

Comme nous l'avons remarqué précédemment, le modèle étudié est formellement équivalent à une chaîne anisotrope de fermions avec spin pour laquelle les équations de renormalisation ont été obtenues par GIAMARCHI et SCHULZ [151]. En particulier,

l'effet du terme t_{\perp} est de séparer les bandes liante et antiliante et, de ce fait, certains processus autorisés au départ ne sont plus pertinents puisqu'ils ne conservent plus l'impulsion. On peut donc négliger J au-delà d'une échelle fixée par t_{\perp} . En outre, le terme proportionnel à t_{\perp} dans (IV.12) peut être absorbé dans une redéfinition de ϕ_{-} et ce hamiltonien est alors sous la forme bien connue du modèle de sine-Gordon (II.30) étudié dans le chapitre II. On sait alors que H_{-} possède un gap et θ_{-} une valeur moyenne qui minimise l'énergie du fondamental et qui vaut 0 ou $\pi/8$ selon le signe de \tilde{J} .

vi) Effet des termes *Umklapp*

Dans le cas de deux chaînes au demi-remplissage, les processus *Umklapp* sont particulièrement importants puisqu'ils causent l'ouverture d'un gap de charge et cette situation est pertinente pour discuter les expériences. La présence d'un gap de corrélation Δ change radicalement le critère de pertinence de t_{\perp} . Naïvement, on s'attend à ce que, pour $t_{\perp} < \Delta$, le terme de saut n'ait pas d'influence et cela a été confirmé en étudiant le flot de renormalisation [39]. Mais, en refaisant une analyse minutieuse, il s'avère qu'il faut comparer la valeur *effective* t_{\perp}^* à Δ pour déterminer si on a affaire à un isolant ou un métal [16]. Rappelons qu'expérimentalement, il semble que ce soit le critère naïf qui s'applique (voir la figure I.15 de la page 34).

1.2 Diagramme de phase

D'après ce qui précède, on observe que des gaps apparaissent pour les excitations antisymétriques tandis que le mode symétrique est peu affecté par le couplage interchaîne. On montre que les seuls opérateurs pouvant présenter des fluctuations divergentes sont : une onde de densité de charge antisymétrique (ODC^{π}), une phase supraconductrice avec appariement à l'intérieur des chaînes (SC^s), une phase supraconductrice avec appariement entre les chaînes (SC^d) et une phase d'antiferromagnétisme orbital (AFO) avec des courants circulant autour des plaquettes avec une périodicité de $2k_F$. On parle de supraconductivité de symétrie s et d par analogie avec le cas bidimensionnel. Dans un supraconducteur de type d (s), le paramètre d'ordre change (ne change pas) de signe sur la surface de Fermi qui, ici, se résume à quatre points. Leurs expressions sont :

$$\begin{aligned}
 O_{ODC} &= \psi_{R,1}^{\dagger} \psi_{L,1} - \psi_{R,-1}^{\dagger} \psi_{L,-1} \sim e^{i\sqrt{2}\phi_{+}} \cos(\sqrt{2}\theta_{-}) \\
 O_{SC^s} &= \psi_{R,1} \psi_{L,1} + \psi_{R,-1} \psi_{L,-1} \sim e^{i\sqrt{2}\theta_{+}} \sin(\sqrt{2}\theta_{-}) \\
 O_{AFO} &= i(\psi_{R,1}^{\dagger} \psi_{L,-1} - \psi_{R,-1}^{\dagger} \psi_{L,1}) \sim e^{i\sqrt{2}\phi_{+}} \sin(\sqrt{2}\theta_{-}) \\
 O_{SC^d} &= i(\psi_{R,1} \psi_{L,-1} + \psi_{R,-1} \psi_{L,1}) \sim e^{i\sqrt{2}\theta_{+}} \cos(\sqrt{2}\theta_{-})
 \end{aligned} \tag{IV.13}$$

À l'aide des expressions bosonisées, il est possible de calculer les exposants de décroissance de ces fonctions de corrélations et, ainsi, de trouver les fluctuations dominantes. Le diagramme de phase obtenu est montré sur la figure IV.2.

Dans le cas où les interactions existent seulement dans les chaînes (comme pour le modèle t-V), on peut retrouver le diagramme de phase par des arguments simples. Pour des interactions attractives, des paires de fermions se forment sur chaque chaîne et peuvent sauter d'une chaîne à l'autre : il s'agit de la supraconductivité de type

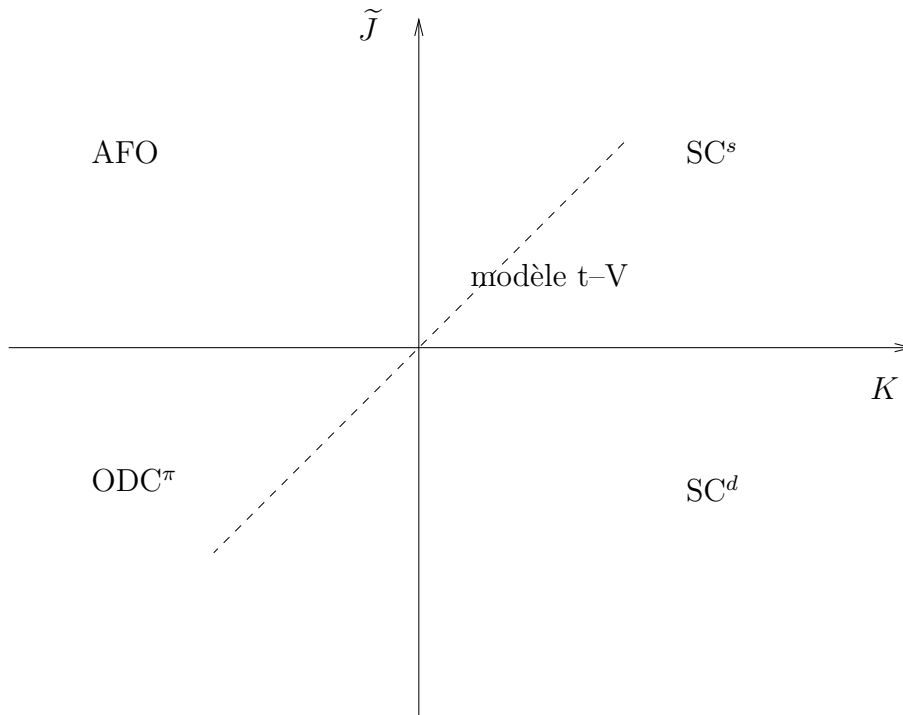


FIG. IV.2 – Diagramme de phase pour deux chaînes couplées de fermions sans spin en fonction de \tilde{J} et K_ρ . Les différentes phases sont définies dans le texte. La ligne en pointillés correspond au modèle t - V . D’après [148].

s. Quant au cas répulsif, il tend à créer des ondes de densité de charge sur chaque chaîne et, en outre, il est favorable de les décaler afin de gagner de l’énergie cinétique transverse : c’est la phase ODC^π . Les autres phases montrées sur la figure IV.2 ne sont accessibles qu’avec des interactions plus exotiques comme, par exemple, des interactions interchaînes.

Toutefois, plusieurs questions subsistent. Les résultats obtenus ci-dessus négligent tous les processus *Umklapp* ainsi que les diffusions vers l’arrière qui introduisent de nouveaux termes dans le hamiltonien et compliquent beaucoup les équations de renormalisation. Par exemple, l’introduction d’une diffusion vers l’arrière interchaîne conduit le système vers deux ondes de densité de charge corrélées « ferromagnétiquement ». Dans ce cas, on peut se convaincre qu’il existe une valeur seuil de t_\perp en deçà de laquelle le saut interchaîne est amorti [148, 149]. En outre, nous avons rappelé que les termes *Umklapp* conduisent également à une valeur seuil donnée par t_\perp^* .

Nous aimerions avoir une confirmation de ces scénarios dans le cas général. De surcroît, lorsque t_\perp est pertinent, il faudrait vérifier les échelles d’énergie qui entrent en jeu afin de pouvoir définir un régime unidimensionnel et décrire la transition dimensionnelle.

Mais avant d’aborder cette discussion, il faut introduire le concept de cohérence qui s’est avéré pertinent dans la discussion de l’effet du couplage interchaîne.

1.3 Concept de cohérence

Le critère de cohérence énoncé par CLARKE, STRONG et ANDERSON [74] est issu d'une analogie formelle entre deux liquides de Luttinger couplés et un système à deux niveaux couplé à un bain thermique. Dans ce dernier cas, le concept de cohérence est exactement celui de la cohérence quantique des états : il s'agit d'étudier la probabilité de retour du système dans son état initial.

De manière précise, considérons le système de deux liquides de Luttinger en l'absence de saut avec une différence ΔN de particules entre les deux et branchons le couplage à $t = 0$ de sorte que le hamiltonien du système soit :

$$H' = H + H_{\perp}, \quad H|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle,$$

où $|\psi_0\rangle$ désigne l'état de départ et H_{\perp} est le hamiltonien de saut transverse.

Soit $P(t) = |A(t)|^2$ la probabilité de retour dans l'état initial avec :

$$A(t) = \langle \psi_0 | e^{iH't} e^{-iHt} | \psi_0 \rangle.$$

Pour des électrons libres, cette probabilité peut être calculée exactement et vaut

$$P(t) = |\cos^{\Delta N}(t_{\perp}t) + i^{\Delta N} \sin^{\Delta N}(t_{\perp}t)|^2. \quad (\text{IV.16})$$

Elle présente des oscillations caractéristiques d'un comportement cohérent avec une période de $\pi/(4t_{\perp})$.

Quand on branche des interactions, on s'attend à ce que les particules se répartissent uniformément sur chaque chaîne en moyenne et donc, $P(t)$ tend vers 0 quand t tend vers l'infini. Par contre, il subsiste deux comportements possibles suivant la cohérence ou non du saut : un comportement cohérent (incohérent) sera caractérisé par la présence (absence) d'oscillations.

Cette définition se traduit directement pour la transformée de Fourier $P(E)$ de $P(t)$. Dans le cas cohérent, $P(E)$ possède des pics aux énergies $\pm E_0$ tandis que le cas incohérent se caractérise par une large structure autour de $E = 0$.

i) Analogie avec un système à deux niveaux

Le système le plus simple consiste à coupler un état à deux niveaux (spin 1/2) à un bain d'oscillateurs harmoniques. Ce modèle, appelé « spin-boson » dans la littérature, a été largement étudié et on peut montrer que plusieurs problèmes fermioniques s'y ramènent [152, 153]. Dans le régime ohmique, il existe plusieurs comportements en fonction de la valeur du couplage α .

Considérons en effet la valeur moyenne $P(t)$ de l'opérateur de spin selon z au cours du temps. En l'absence de couplage ($\alpha = 0$), elle oscille de manière sinusoïdale ; puis, en branchant le couplage, les effets d'interférences vont détruire ces oscillations et on sait que pour $\alpha = 1/2$, le comportement de $P(t)$ est une exponentielle décroissante [152].

Or, la forme bosonisée d'un couplage interchaîne se met sous une forme similaire au terme spin-boson ci-dessus et cela a amené CLARKE, STRONG et ANDERSON [74] à proposer que le comportement de $P(t)$ pour des chaînes fermioniques couplées dépend de la valeur du paramètre α du liquide de Luttinger pour une chaîne. Ils conjecturent

que la transition entre les comportements cohérent et incohérent se situe autour de $\alpha = 1/2$. Toutefois, l'analogie n'est pas complète puisque dans le cas des chaînes couplées, ce sont les mêmes particules qui jouent le rôle du système à deux niveaux et du bain et, en outre, les degrés de liberté de spin qui sont découplés de ceux de charge peuvent faciliter un comportement incohérent. En effet, les excitations de spin et de charge qui sont séparées spatialement en une dimension doivent se propager ensemble entre les chaînes ce qui doit être « difficile » [146]. Il faut également insister sur le fait que ces modèles ne sont pas exactement solubles et il n'est pas du tout évident que le régime cohérent s'étende au-delà de $\alpha = 0$. En effet, d'après CHAKRAVARTY, ce comportement cohérent pour $\alpha < 1/2$ n'est apparemment valable que pour des temps courts [153] et n'est pas représentatif de la dynamique.

ii) Lien avec l'intégrabilité du modèle

En calculant cette probabilité de retour exactement pour des échelles t - J , MILA et POILBLANC [154] ont montré que son comportement aux petits temps n'était pas seulement fonction de α , comme cela a été suggéré précédemment, mais dépendait fortement du caractère intégrable ou non du modèle².

En effet, pour un système intégrable, les niveaux d'énergie peuvent être fortement dégénérés et l'effet d'un terme de saut peut se résumer à la séparation de ces niveaux d'une quantité proportionnelle à t_{\perp} , ce qui donne lieu à de la cohérence (cf. le cas sans interactions (IV.16)).

Au contraire, quand le système n'est plus intégrable, la répulsion des niveaux va élargir la bande des fréquences ce qui est susceptible de favoriser les interférences destructrices et l'incohérence.

De surcroît, en accord avec [153], ces auteurs constatent que le comportement générique est incohérent, même avec un faible paramètre $\alpha = 0,1$, et ils attirent l'attention sur le fait que le comportement de $P(t)$ aux temps courts ne permet pas de conclure quant à la cohérence ou non du saut interchaîne.

En conclusion, la notion de cohérence est essentielle dans l'interprétation des données expérimentales et dans la compréhension de la physique de ces systèmes, mais il va falloir utiliser d'autres méthodes pour pouvoir comprendre le système de deux chaînes.

Il faudrait donc comprendre si, dans un système de deux chaînes, un faible saut transverse induit une séparation des deux bandes de dispersion et un comportement transverse cohérent ou non. Cette question peut être débattue par de nombreuses méthodes et nous allons rappeler les différentes prédictions avant de présenter nos résultats.

2 Différentes approches analytiques

Les diverses propositions concernant l'état fondamental d'un système de liquides de Luttinger couplés se rangent en deux grandes catégories. On considère soit qu'un système de deux chaînes est suffisant, soit qu'il faut étudier un grand nombre de chaînes couplées et nous allons voir ce qui se passe dans chaque cas.

2. Le modèle t - J n'est intégrable que pour $J/t=0$ et $J/t=2$.

2.1 Modèle exactement soluble avec $\alpha = 0$

Reprenons le hamiltonien du modèle de Luttinger en incluant uniquement des termes de diffusion vers l'avant g_4

$$\begin{aligned}
 H_0 = & \sum_{k,\sigma} v_F(k - k_F) a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} v_F(-k - k_F) b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} \\
 & + \frac{1}{2L} \sum_{k_1, k_2, p} \sum_{\alpha, \beta} (g_{4\parallel} \delta_{\alpha, \beta} + g_{4\perp} \delta_{\alpha, -\beta}) (a_{k_1, \alpha}^\dagger a_{k_2, \beta}^\dagger a_{k_2+p, \beta} a_{k_1-p, \alpha} + b_{k_1, \alpha}^\dagger b_{k_2, \beta}^\dagger b_{k_2+p, \beta} b_{k_1-p, \alpha})
 \end{aligned} \tag{IV.17}$$

On a vu dans le chapitre II que ce hamiltonien pouvait être résolu exactement, et que les excitations de basse énergie sont des modes collectifs découplés de charge et de spin avec les vitesses respectives $u_\rho = v_F + (g_{4\parallel} + g_{4\perp})/2\pi$ et $u_\sigma = v_F + (g_{4\parallel} - g_{4\perp})/2\pi$. Par contre, en l'absence de terme g_2 , $K = 1$ et l'exposant anormal α reste nul (cf. la généralisation au cas avec spin des formules (II.19)). En suivant FABRIZIO et PAROLA [155], nous introduisons un terme de couplage interchaîne

$$H_\perp = -t_\perp \sum_{k,\sigma} (a_{k,\sigma,1}^\dagger a_{k,\sigma,2} + b_{k,\sigma,1}^\dagger b_{k,\sigma,2} + h.c.) \tag{IV.18}$$

où les indices 1 et 2 désignent la chaîne correspondante.

Le hamiltonien global conserve encore le nombre d'électrons sur chaque branche ce qui permet d'obtenir une solution exacte. En se concentrant sur les fermions droits par exemple, et en bosonisant, on obtient le spectre des excitations qui est constitué de quatre branches : les modes de charge et de spin, toujours présents, avec les relations de dispersion pour une impulsion $q = k - k_F$ données par $u_\rho q$ et $u_\sigma q$ ainsi que deux nouvelles branches dont les relations de dispersion sont

$$\varepsilon_\pm(q) = \frac{1}{2}(u_\rho + u_\sigma)q \pm \sqrt{[(u_\rho - u_\sigma)q/2]^2 + 4t_\perp^2} \tag{IV.19}$$

Dès lors, on peut calculer l'énergie de l'état fondamental et on obtient que l'effet du couplage interchaîne est de modifier l'énergie de l'état fondamental d'une quantité ΔE telle que

$$\frac{\Delta E}{L} = -\frac{1}{2\pi} \frac{4t_\perp^2}{u_\rho - u_\sigma} \ln \frac{u_\rho}{u_\sigma}, \tag{IV.20}$$

qui varie de manière quadratique avec l'intégrale de saut, ce qui implique une valeur moyenne non nulle de l'énergie cinétique transverse. Par conséquent, la séparation spin-charge seule n'est pas suffisante pour engendrer le confinement des électrons sur les chaînes.

Un argument similaire consiste à calculer la différence d'occupation entre les bandes liante et antiliante

$$\frac{\Delta N}{L} = \frac{1}{2\pi} \frac{4t_\perp}{u_\rho - u_\sigma}, \ln \frac{u_\rho}{u_\sigma} \tag{IV.21}$$

qui est également non nul, ce qui signifie que le terme de saut va avoir un effet dans le fondamental. De la même manière, on montre que les deux bandes vont se séparer d'une

quantité proportionnelle à t_{\perp} , ce qui va donner un comportement transverse cohérent au système de la même manière qu'en l'absence d'interactions.

En conclusion, le phénomène de séparation spin-charge semble intuitivement très séduisant pour expliquer la possibilité de confinement, puisque les électrons sont des objets composites et donc, il doit être plus difficile pour eux de sauter d'une chaîne à l'autre ; cependant, on voit que pour deux chaînes, cela n'est pas suffisant et l'introduction d'un couplage cinétique interchaîne produit un déconfinement par l'intermédiaire de la séparation des bandes.

Il faut signaler toutefois que la possibilité de confinement dans le cas d'un grand nombre de chaînes couplées n'est pas exclue puisque dans ce cas, le modèle proposé ci-dessus n'est plus soluble. Cependant, un calcul perturbatif donne là aussi comme résultat la séparation des bandes d'une quantité finie [155]

$$\Delta k_F(t_{\perp}) = \frac{t_{\perp} \cos k_{\perp}}{u_{\rho} - u_{\sigma}} \ln \frac{u_{\rho}}{u_{\sigma}}.$$

2.2 Modèle exactement soluble avec $\alpha \neq 0$

SHANNON *et coll.* ont introduit un modèle de deux liquides de Luttinger couplés pour des fermions sans spin avec des interactions égales sur chaîne et interchaînes vers l'avant de type g_2 et g_4 , et donc un exposant anormal α non nul [156] (voir (II.19)). Bien sûr, ce modèle n'est pas réaliste mais il permet d'avoir une solution exacte d'un système de deux chaînes couplées en interaction.

Dans ce cas, le hamiltonien global reste quadratique et peut être diagonalisé. On obtient la même fonction de Green que pour le modèle de Tomonaga-Luttinger avec une modulation $\cos(t_{\perp}x/v_F)$. Par transformée de Fourier, on a la formation de deux branches séparées d'une quantité d'ordre t_{\perp} indépendante de α , et chacune des fonctions de distribution se comporte comme dans le cas unidimensionnel (II.45), c'est-à-dire $n(k) \sim (k - k_F)^{\alpha}$ avec le paramètre α caractérisant l'interaction pour *une seule* chaîne mais avec des k_F différents.

Il est donc possible pour un système constitué de deux chaînes de posséder à la fois un comportement cohérent et un exposant anormal dans la direction des chaînes, ce qui est un résultat surprenant probablement dû aux particularités de ce modèle.

La même conclusion peut être étendue à un nombre quelconque de chaînes couplées lorsque l'interaction ne décroît pas dans la direction transverse [157]. Là encore, il existe à la fois un comportement cohérent ainsi que des propriétés anormales du type de celles d'un liquide de Luttinger. Ce résultat est probablement spécifique à ce genre de modèle et n'est probablement pas générique pour notre discussion.

2.3 Groupe de renormalisation

i) Méthode de couplage faible pour N chaînes

Cas de deux chaînes

FABRIZIO *et coll.* ont étudié l'effet d'un terme de saut interchaîne pour un système de deux chaînes de Hubbard couplées en analysant l'évolution des constantes de couplage lors de l'intégration du flot de renormalisation [158, 159]. Il s'agit d'une méthode

de couplage faible, valable pour $U < t_{\perp}$: ils introduisent *d'abord* deux bandes séparées de t_{\perp} puis ils étudient les effets d'une interaction U . L'étude du flot fait apparaître des phases de couplage fort pour lesquelles l'analyse perturbative n'est évidemment plus valable. En particulier, il semble exister une phase supraconductrice de type d dans un modèle purement répulsif; ils trouvent également une phase confinée avec une valeur effective du saut nulle.

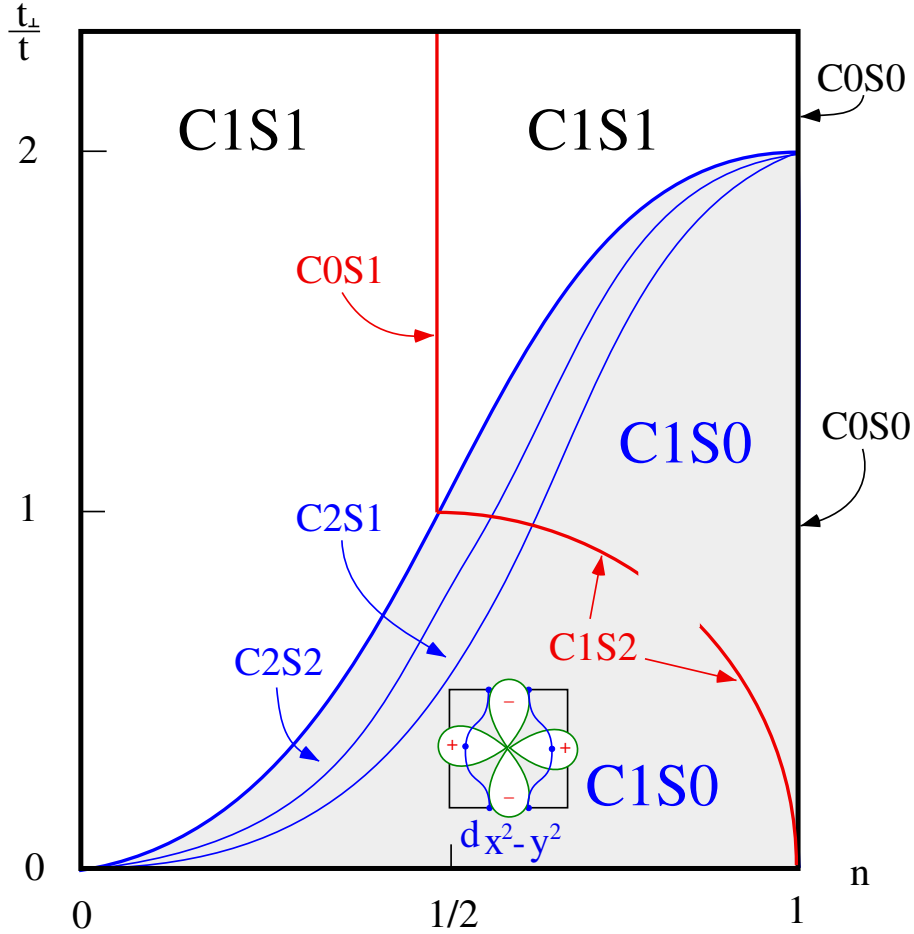


FIG. IV.3 – Diagramme de phase pour deux chaînes de Hubbard couplées dans la limite $U \rightarrow 0^+$. La notation $C_n S_m$ désigne une phase comportant n modes de charge et m modes de spin sans gap (figure extraite de [160]).

Plus récemment BALENTS et FISHER ont repris cette méthode du groupe de renormalisation alliée à la technique de bosonisation, afin d'obtenir le diagramme de phase de deux chaînes de Hubbard couplées [160]. Après avoir écrit le hamiltonien dans sa forme bosonisée en incluant *tous* les processus possibles³, ces auteurs écrivent les équations de renormalisation de ces constantes de couplage. En intégrant le flot, ils identifient alors celles qui divergent, ce qui signale l'ouverture d'un gap dans certains modes. Ils ne gardent alors que les paramètres pertinents pour décrire un hamiltonien effectif et,

3. En particulier, ils considèrent les processus *Umklapp* pour les remplissages commensurables.

ainsi, ils proposent le diagramme de phase de la figure IV.3. S'agissant d'un résultat perturbatif, ce diagramme est valable dans la limite où l'interaction $U \rightarrow 0^+$.

La phase dominante de ce système est C1S0, c'est-à-dire que toutes les excitations de spin ont un gap, tandis qu'il ne reste qu'un seul mode de charge sans gap. En outre, ils confirment l'émergence d'une phase supraconductrice de symétrie d . Nous allons voir si cette image est confirmée dans le régime de couplage fort, mais auparavant, nous discutons les phases qui existent pour un plus grand nombre de chaînes.

Cas de trois chaînes

ARRIGONI a traité le problème de trois chaînes couplées par la même méthode [161]. Bien sûr, dans ce cas, il faut distinguer selon le type de conditions aux limites transverses qui peuvent être ouvertes ou périodiques.

Au-delà

Enfin, la même méthode a permis à LIN, BALENTS et FISHER de discuter le diagramme de phase de N chaînes [162].

Cependant, cette approche a été critiquée par EMERY *et coll.* [163] pour plusieurs raisons. Premièrement, la seule conclusion de l'analyse par le groupe de renormalisation est que le système de départ est instable vis-à-vis de la perturbation. Deuxièmement, en supposant que la phase de couplage fort puisse être déterminée par cette méthode, il faudrait vérifier sa stabilité puisque certaines interactions qui étaient négligées au départ, car non pertinentes, ont pu le devenir et peuvent déstabiliser le point fixe. Enfin, un dernier commentaire concerne le traitement des opérateurs marginaux. En modifiant ces points, ces auteurs obtiennent un diagramme de phase différent. Il est donc souhaitable de pouvoir bénéficier d'autres méthodes afin de discuter ces régimes de couplage fort.

ii) Méthodes de couplage fort pour deux chaînes

La bosonisation permet de traiter le saut interchaîne et les interactions sur un pied d'égalité et on peut obtenir ainsi des résultats valables même en couplage fort.

KHVESHCENKO et RICE ont étudié le cas de deux chaînes de Hubbard couplées dans la limite de couplage fort $U > t_{\perp}$ [164]. Ils montrent l'existence d'une phase avec gap de spin bien au-delà du demi-remplissage et ils observent également une phase contenant des fluctuations dominantes supraconductrices de type d en accord avec l'analyse précédente.

Une discussion minutieuse de ce problème a été faite par SCHULZ [165]. Il s'agit d'une extension au cas avec spin de la méthode décrite dans la partie 1.1, qui avait permis d'établir le diagramme de phase d'une échelle de fermions sans spin (figure IV.2). Dans le cas générique, c'est-à-dire en incluant tous les types d'interactions y compris la diffusion vers l'arrière g_1 , SCHULZ trouve que tous les modes de spin ont un gap et qu'il ne subsiste qu'un mode de charge sans gap : il s'agit d'une phase C1S0 en accord avec les arguments de couplage faible. En outre, le cas répulsif exhibe effectivement une tendance à la supraconductivité d . Le diagramme de phase générique obtenu est d'ailleurs similaire à celui du cas sans spin (voir la figure IV.4) puisque les mêmes phases sont présentes. Une nouvelle phase apparaît pour des interactions très répulsives : il

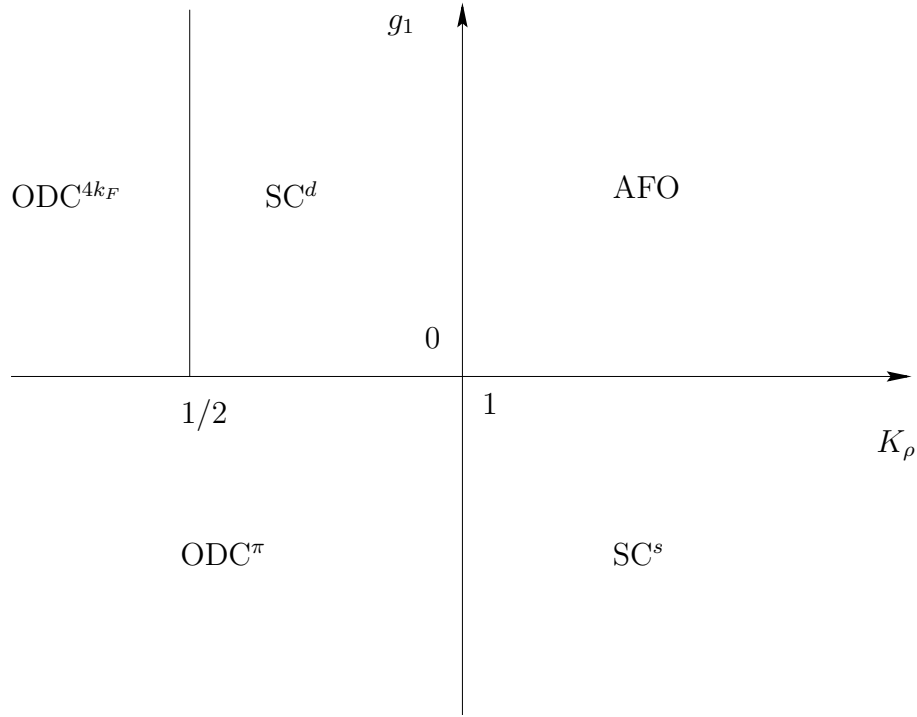


FIG. IV.4 – Diagramme de phase pour deux chaînes couplées de fermions avec spin en fonction de la constante de diffusion vers l'arrière g_1 et du paramètre K_ρ décrivant le seul mode sans gap. Les différentes phases sont définies dans le texte. D'après [165].

s'agit d'une onde de densité à $4k_F$ (ODC^{4k_F}). En outre, la possibilité d'existence, dans des échelles, de fluctuations dominantes *supraconductrices* pour des interactions *purement répulsives* est confirmée dans cette analyse. Rappelons que, dans le cas de fermions sans spin, cette phase nécessite des interactions attractives.

Depuis, de nombreuses vérifications numériques ont confirmé ces prédictions analytiques [166, 167, 168, 169, 170, 104, 171]. Soulignons que ces résultats sont également valables en couplage faible et fort ce qui laisse penser que ces phases doivent exister pour des interactions quelconques.

Enfin, pour conclure sur ces approches qui s'intéressent à un petit nombre de chaînes, il n'est pas évident que ces résultats soient identiques à ceux trouvés pour un grand nombre de chaînes, puisque le concept de cohérence transverse n'a de sens qu'à la limite thermodynamique. Nous poursuivons donc cette revue des prédictions analytiques par le cas d'un plus grand nombre de chaînes couplées.

2.4 Réponse linéaire

Afin d'étudier la transition dimensionnelle de manière plus générale, CASTELLANI, DI CASTRO et METZNER ont calculé la réponse linéaire d'un système de chaînes couplées par un terme de saut t_\perp [172].

Les chaînes sont supposées être des liquides de Luttinger pour lesquels on utilise la fonction de Green (II.28).

La réponse à la fonction de distribution s'écrit pour k_x proche du moment de Fermi

k_F :

$$\begin{aligned} n_{\vec{k}\sigma} &= t_{\perp} \cos k_y [C + D|k_x - k_F|^{2\alpha-1}] && \text{pour } \alpha < 1 \\ n_{\vec{k}\sigma} &= t_{\perp} \cos k_y [C + D|k_x - k_F|] && \text{pour } \alpha \geq 1. \end{aligned} \quad (\text{IV.23})$$

Le premier commentaire que l'on peut faire est que, pour $\alpha \leq 1/2$, la correction linéaire diverge au voisinage de k_F indiquant plutôt une correction en loi de puissance t_{\perp}^{ν} , avec $\nu < 1$. Pour $\alpha > 1/2$, le terme linéaire donne une contribution finie mais il peut exister des termes correctifs d'ordres supérieurs qui sont négligés dans cette approche.

Ce résultat montre que le système ne peut pas évoluer continûment depuis l'état liquide de Luttinger quand on branche le terme de saut. Par contre, il n'est pas en contradiction avec la formation d'un nouveau type de liquide de Luttinger, ou bien un liquide de Fermi, et la question essentielle de l'existence du liquide de Luttinger à deux dimensions n'est pas résolue par ce calcul.

2.5 Bosonisation en dimension $d > 1$

L'idée première de la bosonisation en une dimension consiste à utiliser les opérateurs de densité qui ont des relations de commutation bosoniques. Cette propriété est également vérifiée en trois dimensions et plusieurs auteurs ont essayé d'étendre la méthode de bosonisation en dimension quelconque. Pour une revue, on pourra consulter [173]. Afin de résumer la situation, disons que la bosonisation n'est pas exacte en dimension plus grande que un, à cause de l'importance des termes de courbure de la surface de Fermi, et du fait qu'il existe un continuum d'excitations particule-trou de basse énergie. Cependant, ces approches ne sont pas perturbatives et on peut espérer obtenir des résultats nouveaux, par exemple lorsque les processus de diffusion vers l'avant sont dominants.

La méthode de bosonisation fonctionnelle est exacte dans le cas de chaînes où le nombre de particules sur chaque branche est conservé. Dans le cas d'une interaction coulombienne par exemple, la présence de plusieurs chaînes est responsable de l'écrantage et on aboutit à un liquide de Luttinger avec $\alpha = 1$ [174, 173], en accord avec les expériences, même si les effets de désordre doivent probablement être discutés. Notons d'ailleurs que dans ce cas, la bosonisation « traditionnelle » est également adéquate et conduit aux mêmes résultats [175, 105].

Dans le cas réaliste où les électrons peuvent passer d'une chaîne à l'autre sous l'effet d'un terme de saut t_{\perp} , cette méthode n'est plus exacte mais elle donne les résultats suivants.

Si les processus transférant de grandes impulsions (*Umklapp*, diffusion vers l'arrière) peuvent être négligés (ce qui est réaliste en particulier lorsque les interactions vers l'avant sont singulières), et pour une intégrale de saut arbitrairement petite, le système évolue vers un liquide de Fermi avec un poids de quasi-particule variant comme :

$$Z \sim t_{\perp}^{\alpha}, \quad (\text{IV.24})$$

où α est le paramètre de Luttinger caractérisant les chaînes en l'absence de couplage [176, 173]. Ce résultat peut être retrouvé à l'aide des identités de Ward lorsque la diffusion vers l'avant domine [111, 177]. On remarque que cette formule diffère des

prédictions du groupe de renormalisation (IV.6); en particulier, t_{\perp} est toujours pertinent, quelle que soit la valeur de α . Ces différences sont probablement dues aux approximations de cette méthode, mais on remarque que les formules sont proches lorsque α est petit devant 1. Nous verrons dans notre étude numérique si il est possible de trancher entre ces exposants.

Cependant, bien que le fondamental soit un liquide de Fermi, il subsiste des réminiscences de la structure du liquide de Luttinger puisque la fonction de Green présente une loi d'échelle anormale pour des distances petites devant l'inverse de t_{\perp} , en dépit du fait qu'il s'agit d'un liquide de Fermi. Ainsi, dans un système réel comportant un couplage interchaîne, ce résultat suggère qu'on puisse mesurer l'exposant anormal α bien que le système soit, strictement parlant, un liquide de Fermi. Enfin, rappelons que cette méthode a l'avantage de ne pas être perturbative en t_{\perp} .

La possibilité d'existence du liquide de Luttinger pour des chaînes couplées n'est pas complètement exclue par ce résultat, puisque la surface de Fermi peut changer sous l'action des interactions, mais ce degré de liberté n'est pas pris en compte dans la bosonisation fonctionnelle⁴. En outre, l'effet des non-linéarités dans la relation de dispersion peut changer qualitativement les résultats (en particulier, cela pourrait tenir compte des éventuelles déformations de la surface de Fermi), mais cette étude complète n'a pas encore été entreprise.

2.6 Approche diagrammatique

Nous allons revenir à l'historique du problème de N chaînes couplées qui a été largement étudié ces dernières années [178, 147, 150, 172, 111, 74, 34].

Il ressort de ces études que t_{\perp} est un opérateur pertinent [13, 172, 34], et il est donc impossible de traiter ce problème par des méthodes perturbatives. Nous allons rappeler les résultats obtenus par resommation des diagrammes en négligeant les corrections de vertex [179, 34], mais cette approximation est d'autant plus valable que le nombre de chaînes est grand. Par conséquent, la comparaison est délicate avec les résultats obtenus sur deux chaînes.

BOURBONNAIS *et coll.* ont introduit un formalisme d'intégrales fonctionnelles qui permet de traiter la perturbation t_{\perp} à tous les ordres [33, 34]. Nous allons présenter successivement les résultats obtenus à l'ordre le plus bas (approximation gaussienne) pour des fermions sans spin puis en incluant le spin. Ensuite, nous discuterons les résultats obtenus par ARRIGONI en traitant les termes d'ordre supérieurs.

i) Approximation de phase stationnaire

Étant donné que le formalisme du développement diagrammatique est assez lourd, il est plus simple de suivre la présentation donnée par WEN qui donne le même résultat que l'approche diagrammatique à l'ordre le plus bas.

Cas sans spin

WEN a proposé de calculer la fonction de Green d'un système de chaînes couplées en négligeant les corrections de vertex [179]. Cela revient à faire une approximation de

4. Afin de pouvoir linéariser la relation au voisinage de la surface de Fermi, celle-ci doit être fixe.

type phase stationnaire (RPA en anglais) et, en utilisant l'expression de la *self-énergie* au premier ordre: $\Sigma(k_x, k_\perp, \omega) = t_\perp \cos(k_\perp)$, on obtient, grâce à l'équation de Dyson (II.3), l'expression de la fonction de Green

$$G(k_x, k_\perp, \omega) = \frac{1}{[G_{1D}(k_x, \omega)]^{-1} - t_\perp \cos(k_\perp)} \quad (\text{IV.25})$$

où $G_{1D}(k_x, \omega)$ est la fonction de Green exacte pour une seule chaîne qui est connue dans le cas sans spin [25, 80] (équation (II.28)). Or, nous faisons une analyse dimensionnelle et nous pouvons nous restreindre aux fermions droits pour lesquels :

$$G_{1D}^{-1}(k, \omega) = \frac{\omega - v\tilde{k}}{(v^2\tilde{k}^2 - \omega^2)^{\alpha/2}},$$

où \tilde{k} est défini par $k - k_F$ et ω est mesuré par rapport au potentiel chimique μ .

On obtient ainsi la fonction de Green globale :

$$G_{L,R}^{2D}(\omega, k_x, k_\perp) \simeq \frac{\omega_0^{-\alpha} (v_F^2 k_x^2 - \omega^2)^{\alpha/2}}{(\omega \pm v_F k_x) + t_\perp \cos(k_\perp) \omega_0^{-\alpha} (v_F^2 k_x^2 - \omega^2)^{\alpha/2}}. \quad (\text{IV.27})$$

Bien évidemment, l'expression de ce propagateur est exacte quand les chaînes sont découplées ($t_\perp = 0$) ou bien quand on a des électrons libres ($\alpha = 0$), ce qui justifie cette approximation. En outre, cette approximation, qui est une sorte de champ moyen, devient exacte pour un système constitué d'une infinité de chaînes toutes couplées les unes aux autres [180]. Cette remarque souligne le fait que cette approche correspond à un développement en fonction de l'inverse du nombre de chaînes et il n'est pas évident que ces résultats soient valables pour un système de deux chaînes par exemple.

Propriétés d'analyticité de la fonction de Green

À cause de la coupure qui existe pour la fonction de Green unidimensionnelle, il faut être précis pour étudier les propriétés analytiques de cette fonction. En introduisant une partie imaginaire positive δ , on obtient

$$\begin{cases} \Im m G_{1D}^{-1}(\tilde{k} = 0, \omega + i\delta) & = |\omega|^{1-\alpha} \sin(\frac{\pi}{2}\alpha) \\ \Re e G_{1D}^{-1}(\tilde{k} = 0, \omega + i\delta) & = \text{sgn}(\omega) |\omega|^{1-\alpha} \cos(\frac{\pi}{2}\alpha) \end{cases}$$

D'après (IV.25), on en déduit que la fonction spectrale bidimensionnelle peut s'écrire sous la forme

$$A(\omega, t_\perp) = |\omega|^{\alpha-1} a(t_\perp \omega^{\alpha-1} \text{sgn}(\omega))$$

où a est une fonction dépendant de α *a priori*.

Les pôles de cette fonction de Green n'existent que pour $\alpha < 1$. Au-delà, il n'y a pas de surface de Fermi et l'état fondamental n'est pas un liquide de Fermi, en accord avec le résultat du groupe de renormalisation (IV.5) [34].

Par contre, pour $\alpha < 1$, le terme de saut transverse est pertinent et la fonction de Green comporte des pôles avec un poids de quasi-particules

$$Z = \omega_0^{-\alpha} (v_F k_x^2)^{\alpha/2} \sim t_\perp^{\alpha/(1-\alpha)}. \quad (\text{IV.30})$$

La relation de dispersion de ces pôles implique l'existence d'une surface de Fermi et d'une dynamique cohérente des électrons dans toutes les directions : il s'agit d'un liquide de Fermi⁵. En outre, pour deux chaînes, la séparation entre les branches liante et antiliante conduit à des points de Fermi distincts k_F^1 et k_F^2 séparés d'une quantité

$$\delta k_F = |k_F^1 - k_F^2| = t_\perp^{1/(1-\alpha)}/v, \quad (\text{IV.31})$$

c'est-à-dire que la déformation de la surface de Fermi dépend de la force des interactions entre électrons.

Il a été proposé par CLARKE et STRONG que la position des pôles de cette fonction de Green dans le plan complexe pouvait donner lieu à des comportements différents selon que α est supérieur ou inférieur à $1/2$ [182, 183], ce qui soutiendrait leur suggestion de transition à cette valeur entre un régime cohérent et un autre incohérent. Mais cet argument a été réfuté par SCHÖNHAMMER qui a montré que la fonction de Green (IV.27) donnait lieu à un comportement identique de liquide de Fermi pour tout $\alpha < 1$ [184], comme nous l'avons écrit.

Il faut rappeler que les résultats trouvés ci-dessus par WEN [179] découlent de l'approximation RPA et il se pourrait que le fait d'inclure les corrections de vertex rendent le liquide de Fermi instable, et fasse évoluer celui-ci vers un nouveau point fixe. Avant de discuter de l'effet des termes négligés dans cette approximation, nous mentionnons les résultats dans le cas de fermions avec spin.

Cas avec spin

En présence du spin, on ne peut pas obtenir d'expression aussi simple pour la transformée de Fourier de la fonction de Green unidimensionnelle mais, puisqu'une analyse dimensionnelle donne suffisamment d'informations, les mêmes résultats existent [179] avec, cette fois, une fonction de Green :

$$G_{L,R}^{2D}(\omega, k) \simeq \frac{\omega_0^{-\alpha} (v_c^2 k_x^2 - \omega^2)^{\alpha/2}}{\sqrt{(\omega \pm v_s k_x)(\omega \pm v_c k_x)} + t_\perp \cos(k_\perp) \omega_0^{-\alpha} (v_h^2 k_x^2 - \omega^2)^{\alpha/2}}. \quad (\text{IV.32})$$

Les résultats sont très similaires et, en particulier, le critère de pertinence du saut t_\perp est inchangé : $\alpha < 1$.

Par contre, l'effet de la séparation spin-charge peut changer *quantitativement* la renormalisation du terme de saut.

En utilisant l'expression de la fonction de Green dans le cas avec spin pour des fermions droits [26, 25], on peut estimer le poids de quasi-particules [149]

$$Z \sim \left(\frac{u_s}{u_c}\right)^\gamma [t_\perp(k)]^{\alpha/(1-\alpha)}, \quad (\text{IV.33})$$

5. Le critère d'existence d'un liquide de Fermi suppose que la partie imaginaire de la *self-énergie* s'annule suffisamment vite au voisinage de la surface de Fermi. Ici, elle est identiquement nulle dans un voisinage de cette surface. On peut toutefois envisager qu'en incluant des termes d'ordre supérieur, on conserve une structure de pôle mais avec un comportement inhabituel de la partie imaginaire : il s'agit du liquide de Fermi marginal introduit par VARMA *et coll.* [181].

où l'exposant γ vaut

$$\begin{aligned} \gamma &= (1 - 2\alpha)/(2(1 - \alpha)) > 0 && \text{pour } \alpha < 1/2 \\ \gamma &= (3 - \alpha)(1 - 2\alpha)/(2(1 - \alpha)) < 0 && \text{pour } \alpha > 1/2 \end{aligned}$$

qui change de signe lorsque $\alpha = 1/2$, ce qui produit des changements quantitatifs. Quand $\alpha < 1/2$, le pôle de quasi-particule possède un poids très faible si la séparation spin-charge est importante. La phase de liquide de Fermi garde des traces du liquide de Luttinger. Au contraire, pour $\alpha > 1/2$, l'effet de la séparation spin-charge est d'augmenter considérablement Z , c'est-à-dire que cela renforce de manière effective l'effet du couplage interchaîne t_{\perp} .

ii) Au-delà de l'approximation de phase stationnaire

Afin d'aller au-delà de l'approximation précédente, valable aux premiers ordres en perturbation, ARRIGONI a appliqué une méthode développée par METZNER pour le modèle de Hubbard [185] au problème des chaînes couplées [186]. Ce développement perturbatif était déjà proposé par BOIES *et coll.* mais les calculs n'avaient été faits qu'au premier ordre [34].

Un simple comptage de puissance suffit à comprendre le problème qui se pose dans un calcul limité aux diagrammes les plus bas. Quand on s'approche du pôle de la fonction de Green (IV.27), il existe une infinité de diagrammes qui ont le même ordre de grandeur et qui rendent inapplicable le calcul perturbatif. En outre, comme nous l'avons vu dans (IV.8), pour $\alpha > \alpha_{2P}$, il existe des diagrammes qui divergent encore plus à basse énergie et le comptage de puissance n'est plus valable. Nous allons donc étudier successivement ces deux régimes.

En négligeant les processus de paires

Un des critères de cohérence proposé est la différence d'occupation δn_{k_F} entre les bandes extrêmes $k_{\perp} = 0$ et $k_{\perp} = \pi$:

$$\delta n_{k_F} \propto \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [G(k_F, \pi, \omega) - G(k_F, 0, \omega)]. \quad (\text{IV.34})$$

Or, tant que les processus à deux particules sont moins pertinents, tous les diagrammes sont du même ordre et on peut écrire une expression qui est *valable à tous les ordres en perturbation* [186] :

$$G(k_F, \pi, \omega) - G(k_F, 0, \omega) = E_F^{-\alpha} \omega^{\alpha-1} g(t_{\perp} E_F^{-\alpha} \omega^{\alpha-1}; \omega/E_F), \quad (\text{IV.35})$$

où $g(x; y)$ est une fonction d'échelle telle que $g(x; 0)$ existe et est fini pour tout x .

En remplaçant cette expression dans (IV.34), on trouve que pour $\alpha < 1/2$,

$$\delta n_{k_F} \propto (t_{\perp}/E_F)^{\alpha/(1-\alpha)}, \quad (\text{IV.36})$$

tandis que le comportement devient linéaire pour $\alpha > 1/2$. On retrouve exactement le résultat précédent (IV.30) puisque cette quantité est proche du poids de quasi-particules

$Z(t_{\perp})$, et c'est également consistant avec le résultat de la réponse linéaire (IV.23), ainsi que les calculs du groupe de renormalisation (IV.6) :

$$t_{\perp}^* = t_{\perp} Z(t_{\perp}) \sim t_{\perp}^{1/(1-\alpha)}.$$

La renormalisation de t_{\perp} indique une tendance au confinement sur les chaînes.

On confirme également le résultat de WEN sur la séparation des bandes (IV.31), puisque $\delta k_F \sim t_{\perp}^{1/(1-\alpha)}$ est valable à tous les ordres en perturbation, pourvu qu'il existe une surface de Fermi.

Avec les processus de paires

Dans ce cas, les diagrammes ne sont plus homogènes et on ne peut pas utiliser cet argument dimensionnel. Par contre, en se limitant à un ordre donné en t_{\perp} et en sommant les diagrammes les plus divergents, on peut prédire les comportements de δn_{k_F} et de δk_F . On obtient des lois de puissances en t_{\perp} dont les exposants sont montrés sur la figure IV.5. En particulier, l'effet des processus de paires est visible dans le fait que le régime linéaire de δn_{k_F} pour des fermions sans spins n'apparaît pas pour $\alpha = 1/2$, comme cela est prévu par la réponse linéaire [172] (équation (IV.23)), mais seulement pour $\alpha = 2/3$ [186]. Sur cet exemple, on voit que la réponse linéaire ne prédit pas le bon comportement, même dans la limite $t_{\perp} \rightarrow 0$, bien que ses résultats soient parfaitement consistants et ne montrent pas de signe d'instabilité.

Nous allons passer maintenant à la présentation de nos résultats qui seront systématiquement comparés aux prédictions analytiques.

3 Étude numérique de la pertinence de t_{\perp}

Nous venons de voir que les propriétés spectrales de deux chaînes couplées ou plus ne sont pas complètement établies, puisque le couplage interchaînes est une variable pertinente. Il apparaît donc utile de procéder à une analyse numérique à partir d'un hamiltonien microscopique réaliste, afin de pouvoir tester les diverses prédictions concernant les comportements asymptotiques que nous venons de rappeler.

Nous allons tout d'abord présenter le modèle utilisé, puis nous montrerons le comportement universel de la fonction d'occupation.

3.1 Modèle microscopique

i) Hamiltonien

Nous considérons des fermions sans spin sur une échelle de taille $2 \times L$ dont la dynamique est régie par le hamiltonien :

$$\begin{aligned} H = & - \sum_{j,\beta} (c_{j+1,\beta}^{\dagger} c_{j,\beta} + \text{H.c.}) \\ & - t_{\perp} \sum_{j,\beta} (c_{j,\beta+1}^{\dagger} c_{j,\beta} + \text{H.c.}) \\ & + \sum_{j,\beta,\delta} V(\delta) n_{j,\beta} n_{j+\delta,\beta}, \end{aligned} \tag{IV.37}$$

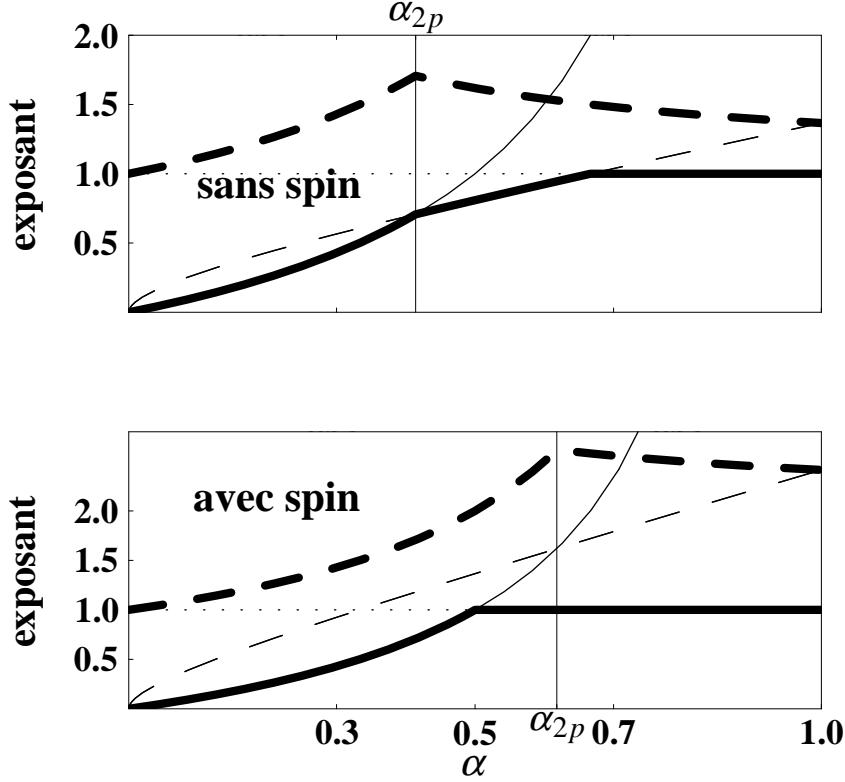


FIG. IV.5 – *Exposants donnant le comportement de δn_{k_F} (ligne épaisse) et de la séparation des bandes $k_F(\pi) - k_F(0)$ (ligne en tirets épais) en fonction de t_\perp pour des fermions avec et sans spin en fonction du paramètre α du liquide de Luttinger (d’après [186]).*

où $\beta = 1, 2$ est l’indice de chaîne, et l’interaction répulsive $V(\delta)$ entre deux fermions à une distance δ est de la forme $V(i) = 2V/(i + 1)$ pour $i \leq i_0$ (i_0 est la portée de l’interaction et, en pratique, on ne dépassera pas la distance moyenne entre particules).

ii) Conditions aux bords

Pour compléter la définition, nous devons mentionner le type de conditions aux limites dans la directions des chaînes. Nous utiliserons des conditions fermées arbitraires qui sont imposées par un flux Aharonov-Bohm Φ . L’effet de ce flux est de redéfinir les opérateurs de fermions à l’aide de la substitutions de Peierls :

$$c_{j+1,\beta}^\dagger c_{j,\beta} \rightarrow c_{j+1,\beta}^\dagger c_{j,\beta} e^{i\frac{2\pi}{L}\Phi}. \quad (\text{IV.38})$$

L’introduction de ce flux arbitraire a deux raisons. D’une part, comme cela a été proposé par KOHN [120], des propriétés de transport de systèmes d’électrons fortement corrélés peuvent être calculées comme les réponses du système à un changement de conditions aux limites ; et d’autre part, notre but étant d’extraire des résultats valables à la limite thermodynamique à partir de quantités calculées pour des systèmes de taille

finie, on peut essayer d'améliorer la qualité de nos extrapolations en moyennant nos résultats par rapport au type de conditions aux limites [187, 188]. En effet, à la limite thermodynamique, les quantités physiques ne dépendent pas des conditions aux limites utilisées.

iii) Pourquoi des fermions sans spin ?

Étant donné que nous allons utiliser des modèles de fermions sans spin, nous devons justifier une telle approche. Voici les arguments qui nous permettent de ne pas considérer les degrés de liberté de spin

- La physique unidimensionnelle est caractérisée par l'absence de quasi-particules et les seules excitations de basse énergie sont des modes collectifs. Par conséquent, le fait de considérer un ou plusieurs modes collectifs ne devrait pas changer de manière qualitative la physique.
- Les lois d'échelle des quantités physiques ne dépendent que de l'exposant α . Ainsi, à des préfacteurs près, cet exposant seul gouverne la physique de basse énergie, indépendamment de la présence ou non du spin. En outre, les degrés de liberté de spin seuls ne sont pas suffisants pour empêcher la cohérence interchaîne dans un système de deux chaînes.
- Enfin, rappelons que la physique des composés organiques qui nous intéressent plus particulièrement est gouvernée par une Onde de Densité de Charge et il est admis que l'interaction sur site de type Hubbard est très forte ce qui permet de négliger le spin (le modèle de Hubbard avec $U = \infty$ est équivalent à un modèle de fermions sans spin)

iv) Calcul des paramètres de liquide de Luttinger

La problématique qui se pose dans les systèmes de chaînes couplées est double. D'une part, on veut connaître l'effet du terme de saut sur les propriétés physiques ; et d'autre part, on veut comparer cela aux diverses prédictions faites à partir de la physique unidimensionnelle. En particulier, il faut voir si effectivement α est le seul paramètre clé de ce problème.

Pour cela, nous allons calculer l'exposant anormal à l'aide des relations avec les quantités thermodynamiques en suivant la méthode présentée dans le chapitre III, et nous utiliserons différentes portées d'interaction afin de pouvoir obtenir des valeurs de α aussi grandes que l'on veut.

Comme on s'y attend, la valeur de α augmente avec la force de l'interaction ou sa portée, tant que celle-ci n'excède pas la distance moyenne entre les particules. En outre, on voit que différentes portées d'interaction peuvent conduire au même α , et cela peut permettre de tester si α seul détermine les propriétés de basse énergie.

Transition métal-isolant

Nous avons vu dans le chapitre II que pour des fermions sur réseau avec un remplissage commensurable, il existe des processus dits *Umklapp* qui transfèrent des particules d'un point de Fermi à l'autre et nous avons discuté le critère qui permet de savoir quand ces processus deviennent pertinents (formule (III.9) du chapitre III).

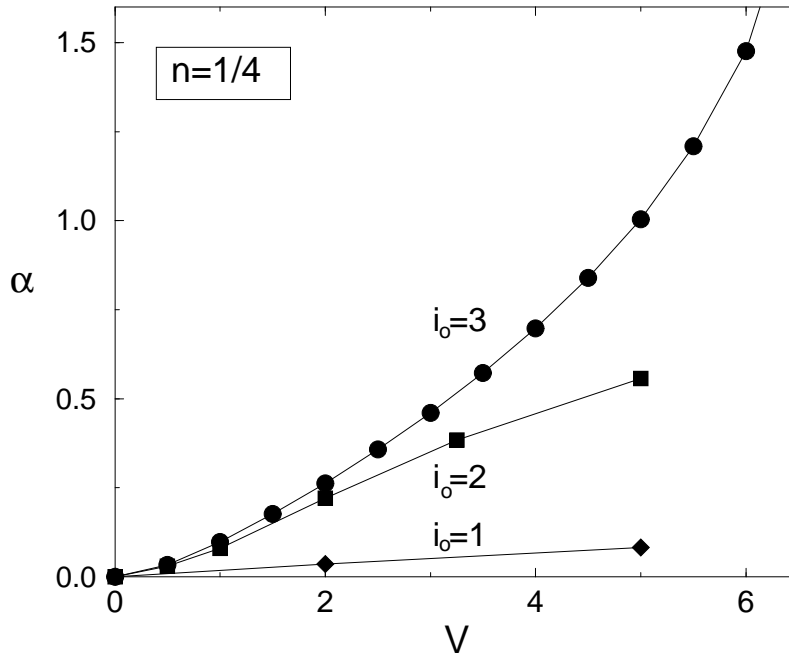


FIG. IV.6 – Exposant α caractérisant le liquide de Luttinger au quart-remplissage en fonction de V et pour des interactions de portée variable i_0 définies dans le texte (voir (IV.37)). (Figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

Par exemple, pour des fermions sans spin et au demi-remplissage la valeur maximale de α est $1/4$ tandis qu'au quart remplissage, elle est de $\alpha_{\max} = 49/16 \simeq 3,06$. Étant donné qu'on veut pouvoir étudier ce système pour des valeurs de α de 0 à plus de 1, nous allons donc nous concentrer sur les modèles quart-remplis.

3.2 Évolution de la fonction d'occupation

Considérons l'effet d'un couplage cinétique sur un système de deux chaînes. On peut introduire deux fonctions d'occupation, une pour chaque valeur de l'impulsion transverse (0 et π correspondant aux modes liant et antiliant respectivement), qui sont identiques lorsque $t_{\perp} = 0$. Quand on branche le couplage, elles vont se séparer puisque les modes symétriques et antisymétriques acquièrent des moments de Fermi distincts k_F^1 et k_F^2 . On peut alors caractériser quantitativement l'effet du couplage, soit en étudiant la séparation en k ($\delta k_F = |k_F^1 - k_F^2|$), soit en mesurant la différence d'occupation entre les deux branches au niveau de Fermi initial k_F (qui est la moyenne des deux moments de Fermi en vertu du théorème de Luttinger). Nous allons nous concentrer sur cette dernière quantité et essayer d'extraire son comportement dans la limite thermodynamique à partir de résultats obtenus avec des tailles finies.

Soit $\delta n(k_F)$ la différence d'occupation des deux bandes au niveau de Fermi pour l'état fondamental

$$\delta n(k_F) = \langle c_0^{\dagger} c_0 - c_{\pi}^{\dagger} c_{\pi} \rangle. \quad (\text{IV.39})$$

En réécrivant cette définition en fonction des indices de chaînes (équation (IV.11)), on s'aperçoit que cette quantité correspond à la valeur moyenne dans le fondamental du terme de saut interchaîne :

$$\delta n(k_F) = \frac{1}{2} \langle c_{k_F,1}^{\dagger} c_{k_F,2} + c_{k_F,2}^{\dagger} c_{k_F,1} \rangle. \quad (\text{IV.40})$$

Or, puisque $n(k, k_{\perp})$ est relié simplement à la fonction de Green $G(k, k_{\perp}, \omega)$ par une intégrale sur les fréquences, nous nous attendons à ce que cette fonction d'occupation possède de l'information sur la cohérence ou non du saut interchaîne. À partir des nombreuses propositions concernant le comportement de la fonction de Green exposées précédemment, nous pouvons obtenir des prédictions sur l'évolution des fonctions d'occupation en fonction de t_{\perp} , que nous comparons à nos résultats.

i) Paramètres

Nous avons effectué le calcul de $n(k_F, k_{\perp})$ pour un modèle de deux chaînes à l'aide de l'algorithme de Lanczos pour des systèmes $2 \times L$, avec $L = 8, 12, 16$ et 20 , au quart-remplissage. Le long des chaînes, nous utilisons des conditions périodiques ou antipériodiques afin d'être dans une configuration électronique avec des couches ouvertes. En présence de t_{\perp} , ce choix permet d'avoir un fondamental non dégénéré et permet d'ajouter ou d'enlever une particule au niveau de Fermi k_F .

La procédure est la suivante. Premièrement, l'état fondamental complet est calculé. Puis, un nouvel état est construit en appliquant l'opérateur qui détruit une particule d'impulsion (k_F, k_{\perp}) . Enfin, $n(k_F, k_{\perp})$ est obtenu en calculant la norme carrée de cet état.

Afin d'extraire un comportement typique de cette quantité, nous allons tout d'abord étudier son développement de Taylor.

ii) Développement de Taylor

Pour un système de taille finie, on s'attend à ce qu'un développement en puissances de t_{\perp} soit vérifié. En outre, puisque $t_{\perp} \rightarrow -t_{\perp}$ échange le rôle des deux bandes, cette série entière ne contient que des puissances impaires du couplage et il est suffisant de se restreindre aux deux premiers termes

$$\delta n(k_F) = a(L)t_{\perp} - b(L)t_{\perp}^3$$

Bien entendu, les coefficients $a(L)$ et $b(L)$ peuvent dépendre très fortement de la taille du système. Nous allons les étudier successivement.

Coefficient linéaire $a(L)$

La dépendance en taille de $a(L)$ qui est la correction linéaire doit correspondre au résultat de réponse linéaire (IV.23) en remplaçant la coupure $|k - k_F|$ par $1/L$. Ainsi, les équations (IV.23) suggèrent une variation de $a(L)$ en $(1/L)^{2\alpha-1}$ pour $\alpha < 1$ et en $1/L$ pour $\alpha > 1$ qui est très bien vérifiée (voir la figure IV.7).

On peut noter également que différents modèles de portées i_0 distinctes, mais ayant pratiquement la même valeur de α , donnent des résultats très proches, en accord avec le fait que α seul détermine les lois d'échelles observées. Une autre remarque est que,

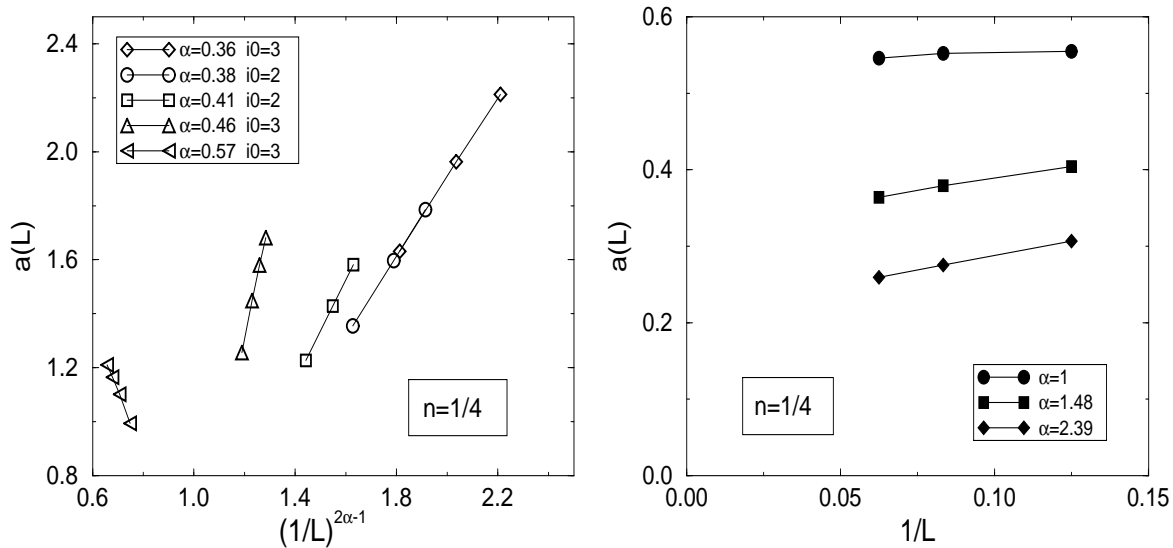


FIG. IV.7 – Coefficient $a(L)$ (voir texte) en fonction de la taille renormalisée par les interactions selon la loi donnée par la réponse linéaire (IV.23) pour $\alpha < 1$ (à gauche) et $\alpha > 1$ (à droite). Figure extraite de la référence [190], publication n° 5.

pour $\alpha < 1/2$, le coefficient $a(L)$ diverge avec la taille du système, indiquant que $\delta n(k_F)$ doit varier plus rapidement que t_\perp , et que la réponse linéaire n'est plus valable.

Il faut également souligner que les différentes contributions $L^{1-2\alpha}$ et $1/L$ coexistent et il n'est pas complètement évident que l'on puisse observer une seule loi d'échelle puisque ces termes ne sont pas homogènes. Cela explique les écarts.

Le fait que $a(L)$ tende vers une limite finie quand la taille du système augmente n'est cependant pas suffisant pour garantir la validité du développement de Taylor. En effet, il suffit que les termes d'ordre supérieur divergent très rapidement pour donner un comportement dominant non linéaire. Pour cela, nous avons étudié le terme suivant dans le développement de $\delta n(k_F)$.

Coefficient non linéaire $b(L)$

À l'aide des données obtenues en fonction de t_\perp , il est facile de soustraire le comportement linéaire pour en extraire le terme suivant $b(L)$. Il apparaît alors que, au moins pour $\alpha < 1$, $b(L)$ augmente avec la taille et on peut essayer d'ajuster les données suivant une loi de puissance $b(L) \sim L^\gamma$. Les résultats montrés sur la figure IV.8 sont comparés aux prédictions analytiques [186].

Pour $\alpha < \alpha_{2P}$, l'analyse diagrammatique suggère que $\gamma = 3 - 4\alpha$ puisque, à l'ordre n , tous les diagrammes se comportent en $L^{n(1-\alpha)-\alpha}$ [186]. Par contre, quand les processus à deux particules deviennent plus pertinents, il se produit un changement de régime. Les diagrammes les plus divergents donnent un comportement avec $\gamma = 3 - 2K - 2\alpha$ [150, 186]. La figure IV.8 montre un excellent accord avec ces prédictions et, à nouveau, les résultats ne dépendent que du paramètre α .

Afin de préciser la qualité de nos ajustements, nous traçons $b(L)$ en fonction de la

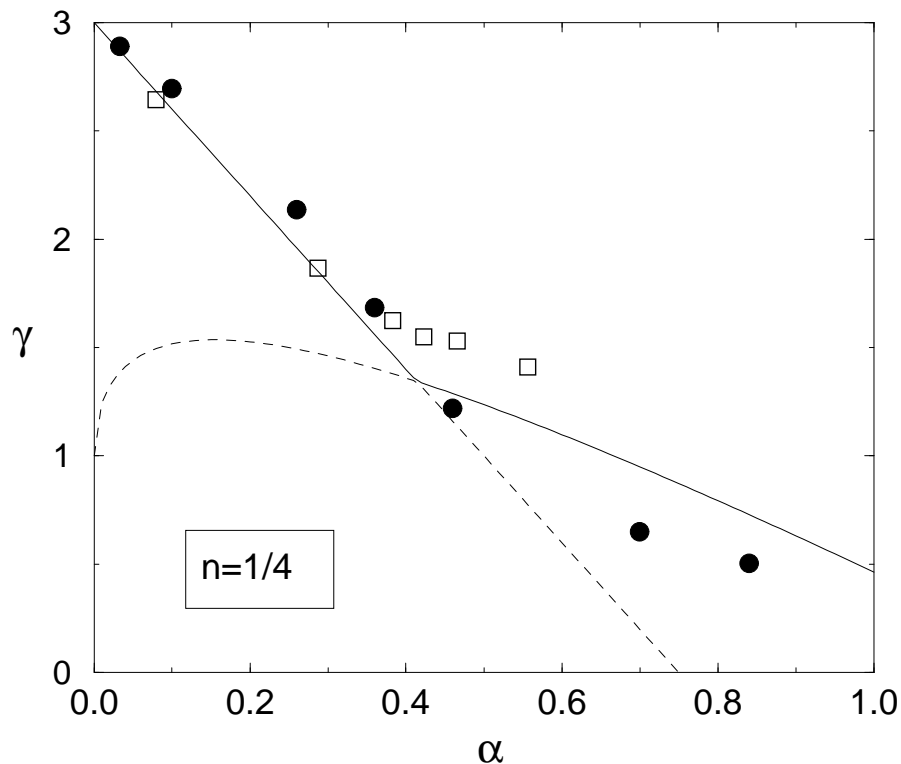


FIG. IV.8 – Estimations numériques de l'exposant γ défini dans le texte en fonction du paramètre α de Luttinger. On considère des interactions de portée $i_0 = 2$ (\square) et $i_0 = 3$ (\bullet). Les prédictions analytiques $\gamma = 3 - 4\alpha$ et $\gamma = 3 - 2\alpha - 2K$ sont tracées pour comparaison et, en fonction de α , l'exposant dominant est en ligne pleine. (Figure extraite de la référence [190], publication n° 5).

loi d'échelle théorique pour toute la gamme d'interactions sur la figure IV.9.

Ces analyses préliminaires semblent indiquer un changement de régime vers un comportement non linéaire aux grandes tailles (basses températures). On peut situer ce changement lorsque les deux termes dans le développement de δn deviennent du même ordre, c'est-à-dire quand $t_{\perp} \gtrsim L^{-(1-\alpha)}$ (dans le régime $\alpha < \alpha_{2P}$). De même, dans le cas où $\alpha > 1/2$ et, bien que le terme linéaire $a(L)$ tende vers une valeur finie, les diagrammes d'ordres supérieurs sont responsables de ce changement de comportement et de l'échec du développement de Taylor.

En effet, l'échec de la réponse linéaire signalé dans [172] se caractérise par la divergence du terme linéaire précisément à $k = k_F$ lorsque $\alpha < 1/2$. Cependant, même si ce coefficient a a une limite finie, on ne peut pas exclure que les termes d'ordre supérieur deviennent pertinents. Nous avons montré numériquement que c'est bien le cas pour le terme proportionnel à t_{\perp}^3 . En fait, comme t_{\perp} est une perturbation pertinente, les termes d'ordre plus élevés sont de plus en plus divergents dans la limite thermodynamique. Ce problème est relié au fait que les limites $t_{\perp} \rightarrow 0$ et $L \rightarrow \infty$ ne commutent pas. En étudiant le comportement linéaire, on prend d'abord la limite $t_{\perp} \rightarrow 0$ puis on analyse la dépendance en taille dans ce régime. Cependant, puisque nous sommes intéressés

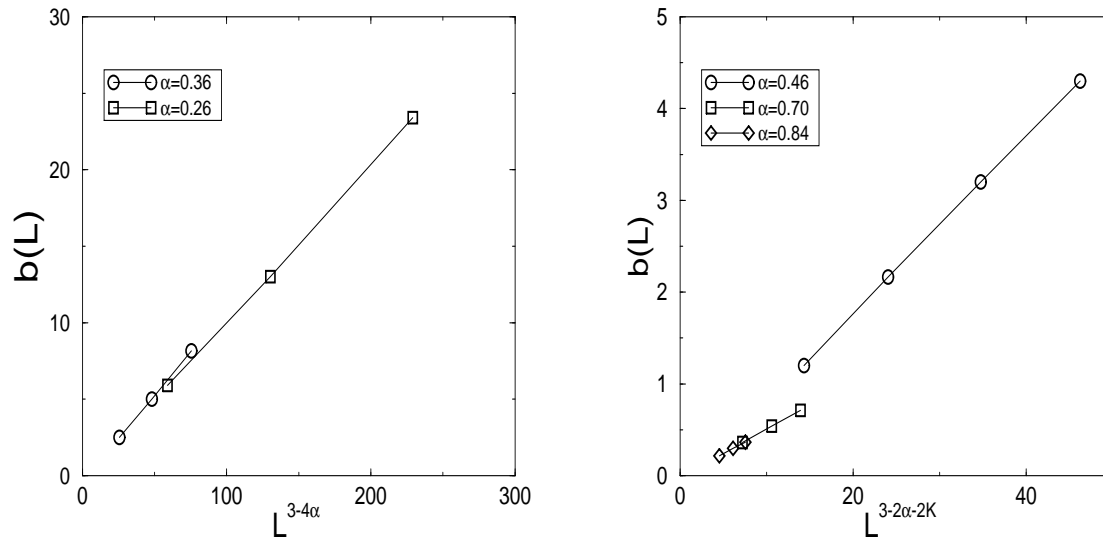


FIG. IV.9 – Coefficient $b(L)$ (voir texte) en fonction de la taille renormalisée par les interactions selon la loi donnée par l'analyse diagrammatique [186] pour $\alpha < \alpha_{2P}$ (à gauche) et $\alpha > \alpha_{2P}$ (à droite). Figure extraite de la référence [190], publication n° 5.

par la limite thermodynamique, il faudrait prendre la limite de volume infinie d'abord, puis analyser les données à petit couplage $\lim_{t_{\perp} \rightarrow 0} \{\lim_{L \rightarrow \infty} \delta n(k_F)\}$. Afin d'appliquer cette procédure, nous allons rechercher une loi d'échelle pour cette quantité.

iii) Loi d'échelle et universalité

Nous allons reprendre le développement de $\delta n(k_F)$ que nous avons vérifié numériquement

$$\delta n(k_F) = (a_0 + a_1 L^{1-2\alpha}) t_{\perp} - (b_0 + b_1 L^{\gamma}) t_{\perp}^3 + \dots \quad (\text{IV.42})$$

dans laquelle les a_i et b_i sont des constantes. En principe, a_0 et b_0 peuvent être négligées pour $L \gg 1$ et $\alpha < 1/2$. Toutefois, en pratique, vu les tailles étudiées, il est nécessaire de tenir compte de a_0 . Considérons tout d'abord le cas $\alpha < \alpha_{2P}$.

Dans ce régime, le coefficient d'ordre n dans le développement de Taylor est homogène à $t_{\perp}^n L^{n(1-\alpha)-\alpha}$, et on peut donc regrouper ces termes dans une fonction d'échelle $G_{\alpha}(y)$ ne dépendant que de $y = t_{\perp} L^{1-\alpha}$ (voir (IV.35)). En outre, il faut imposer que la série donne un résultat fini dans la limite thermodynamique et cela se traduit par $G_{\alpha}(y) L^{-\alpha} = \tilde{G}_{\alpha}(y) y^{\alpha/(1-\alpha)} L^{-\alpha} = t_{\perp}^{\alpha/(1-\alpha)} \tilde{G}_{\alpha}(y)$ ou bien, de manière équivalente :

$$\delta n(k_F) = a_0 t_{\perp} + t_{\perp}^{\alpha/(1-\alpha)} F_{\alpha}(L t_{\perp}^{1/(1-\alpha)}), \quad (\text{IV.43})$$

où $F_{\alpha}(x) = G_{\alpha}(x^{1-\alpha})$ est une fonction dépendant de α qui a une limite finie en l'infini [186, 190].

Jusqu'à présent, la forme (IV.43) a été vérifiée dans le cas où $t_{\perp} \ll L^{-(1-\alpha)}$, c'est-à-dire pour x petit. Par contre, si la resommation de la série de Taylor est justifiée, cette écriture sous forme d'une loi d'échelle n'est pas limitée au domaine $x \ll 1$ mais

est vraie pour tout x et, en particulier, dans la limite $x \rightarrow \infty$ qui correspond à la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$ à t_{\perp} fixé. Dans ce cas, on s'attend à ce que F_{α} tende vers une valeur finie c_{α} (puisque $\delta n(k_F)$ est fini) et, par conséquent, le résultat final s'écrit :

$$\delta n(k_F) = c_{\alpha} t_{\perp}^{\alpha/(1-\alpha)}. \quad (\text{IV.44})$$

Notons que, si cette formule est vérifiée, le terme linéaire $a_0 t_{\perp}$ sera sous-dominant dans la limite thermodynamique, et cela justifiera *a posteriori* qu'il puisse être négligé.

Mais, pour l'instant, il ne s'agit que de conjectures et nous allons passer à l'analyse des résultats.

À partir des données obtenues pour divers couplages et tailles, nous construisons la quantité

$$F'_{\alpha}(L, t_{\perp}) = (\delta n(k_F) - a_0 t_{\perp}) / t_{\perp}^{\alpha/(1-\alpha)} \quad (\text{IV.45})$$

qui dépend *a priori* à la fois de la taille L et de t_{\perp} indépendamment. Nous avons tracé sur la figure IV.10 cette quantité en fonction de la variable combinée $L t_{\perp}^{1/(1-\alpha)}$ et, comme on le voit immédiatement, dans le régime $\alpha < \alpha_{2P}$, toutes les données se trouvent sur *une seule courbe*. L'hypothèse de loi d'échelle est donc vérifiée avec une très bonne précision. Cette courbe définit la fonction d'échelle $F_{\alpha}(x)$ et il est également clair sur la figure que cette fonction tend vers une limite finie en l'infini. D'après la discussion qui précède, cela implique que la loi asymptotique (IV.44) est valable dans la limite thermodynamique.

Pour mieux se rendre compte de l'importance des effets de taille finie, nous montrons sur la figure IV.11 les données brutes ainsi que les extrapolation déduites de la loi d'échelle. Il est clair d'après cette figure que les corrections de taille finie sont particulièrement importantes quand t_{\perp} est petit. Cela peut se comprendre par l'argument suivant. La longueur typique de la transition se comporte comme $t_{\perp}^{-1/(1-\alpha)}$ et elle augmente très rapidement à petit t_{\perp} .

Nos résultats sont en excellent accord avec les approches diagrammatiques [179, 186] et ceci reste vrai tant que les processus à deux particules ne sont pas importants c'est-à-dire jusqu'à α_{2P} . La raison pour laquelle les corrections de vertex ne sont pas importantes tient au fait que les diagrammes à tous les ordres se ressemblent de manière homogène.

iv) Processus à deux particules

Au-delà de $\alpha_{2P} \sim 0,41$, les processus de sauts de paires interchaînes dominant par rapport au saut à une particule. Ce changement a été vu dans le comportement de l'exposant γ (figure IV.8) par exemple. En fait, l'analyse diagrammatique montre que les contributions à différents ordres en t_{\perp} ne sont pas homogènes et ne peuvent pas être resommer de façon à obtenir une loi d'échelle du type de (IV.43). ARRIGONI a proposé de ne tenir compte que des diagrammes les plus divergents à chaque ordre et il montre que dans ce cas, il existe une loi d'échelle [186]

$$\delta n(k_F) = a_0 t_{\perp} + t_{\perp}^{\alpha/(1-K)} F_K(L t_{\perp}^{1/(1-K)}) \quad (\text{IV.46})$$

En particulier, dans ce régime, l'exposant de $\delta n(k_F)$ en fonction de t_{\perp} vaut $\alpha/(1-K)$, qui est réduit par rapport au cas précédent ($\alpha/(1-\alpha)$), si bien que le régime linéaire

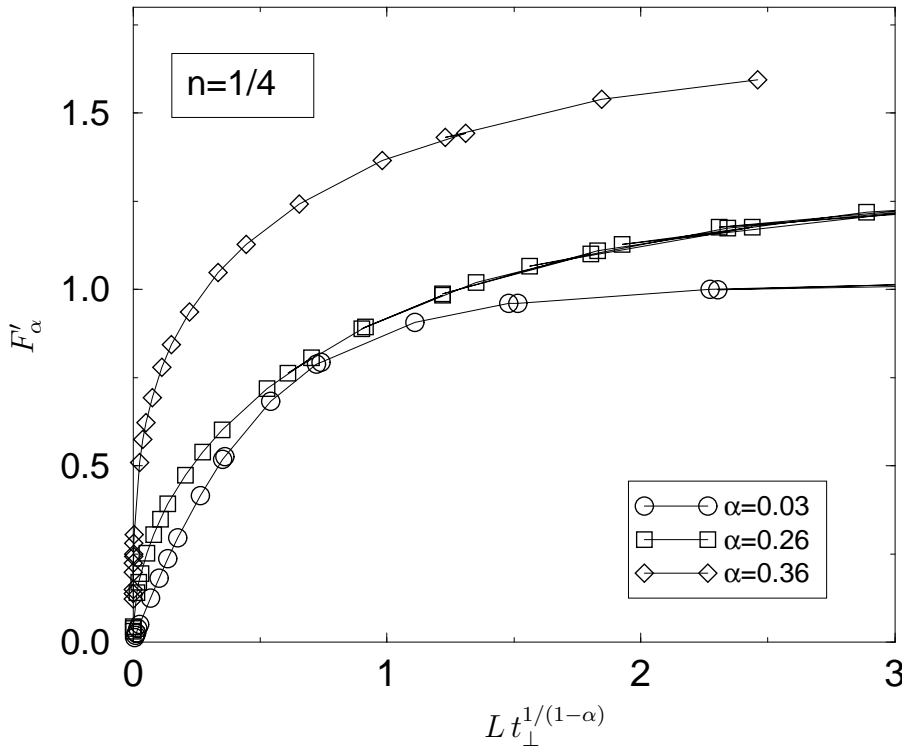


FIG. IV.10 – F'_α (défini en (IV.45)) tracé en fonction d'une seule variable $x = Lt_\perp^{1/(1-\alpha)}$ pour différentes valeurs de l'interaction. Dans chaque cas, il existe plusieurs données, obtenues avec diverses valeurs de t_\perp et sur des tailles $L = 8, 12, 16$ et 20 , qui s'alignent sur une même courbe ce qui démontre l'existence d'une loi d'échelle (IV.43). (Figure extraite de la référence [190], publication n° 5).

n'apparaît pas jusqu'à $\alpha = 2/3$ (voir la figure IV.5), alors que la réponse linéaire et l'approche RPA prédisent un comportement linéaire pour $\alpha > 1/2$.

L'équation (IV.46) a été obtenue en tronquant le développement diagrammatique à un certain ordre en t_\perp mais, à cause de l'inhomogénéité des diagrammes, il se pourrait que cette procédure ne donne pas le bon résultat, et il est donc important de vérifier numériquement si on observe ou non une déviation à la loi d'échelle (IV.43) pour $\alpha > \alpha_{2P}$ et, si c'est le cas, de tester la loi (IV.46).

Malheureusement, la présence de plusieurs échelles différentes rend également l'analyse des données numériques difficile. Nous avons tracé sur la figure IV.12 diverses tentatives de lois d'échelle dans le cas $\alpha = 0,7$. Nous calculons la quantité

$$F'_\eta = (\delta n(k_F) - a_0 t_\perp) / t_\perp^{\alpha/(1-\eta)}$$

en fonction de $x_\eta = Lt_\perp^{1/(1-\eta)}$ où η peut prendre les valeurs $\eta = \alpha$ (cas (a)) et $\eta = K$ (cas (b)) correspondant aux lois (IV.43) et (IV.46) respectivement.

Dans ces deux cas, l'hypothèse de loi d'échelle n'est pas bien vérifiée ce qui montre que quelque chose a changé pour ces valeurs de α puisque la loi (IV.43) ne marche plus. Afin d'augmenter la précision, nous devons soustraire toute la contribution linéaire qui

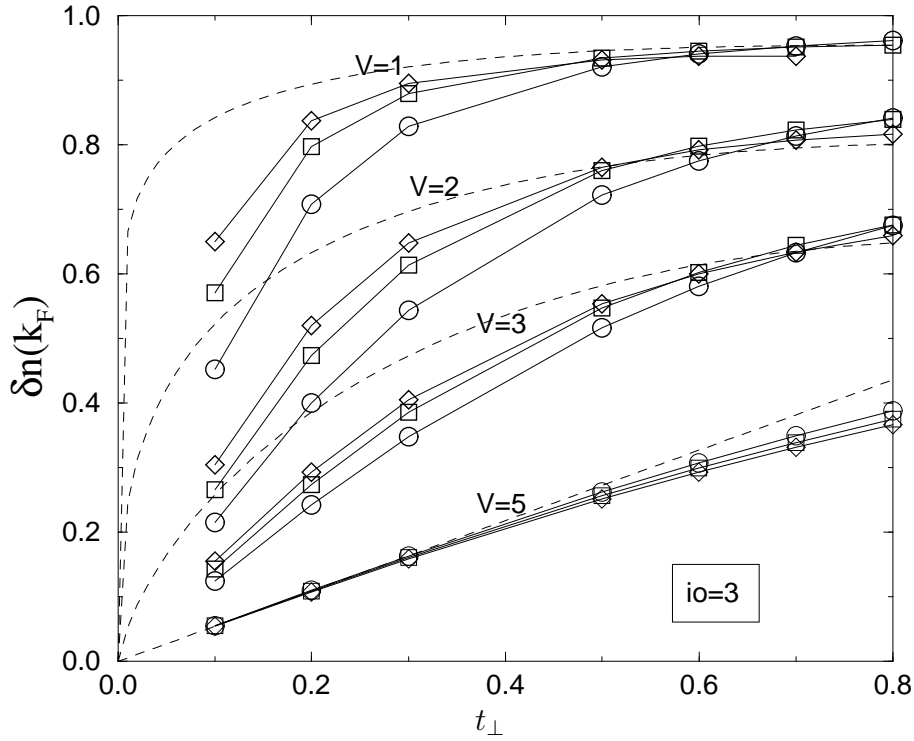


FIG. IV.11 – $\delta n(k_F)$ en fonction de t_{\perp} pour plusieurs modèles calculés sur des échelles 2×8 (\circ), 2×12 (\square) et 2×16 (\diamond). Les limites thermodynamiques $\delta n = c_{\alpha} t_{\perp}^{\alpha/(1-\alpha)} + a_0 t_{\perp}$ pour $\alpha < 1/2$ (c_{α} a été calculé précédemment et le terme linéaire est sous-dominant à petit t_{\perp}) sont également tracées en lignes pointillées. Les interactions $V = 1, 2, 3$ et 5 correspondent respectivement à $\alpha = 0,10, 0,26, 0,46$ et 1 . Pour $\alpha = 1$, la courbe en pointillé est linéaire. (Figure extraite de la référence [190], publication n° 5).

ne dépend que du saut à une particule afin d'espérer observer les autres termes de la série de Taylor qui doivent se ressommer selon la loi (IV.46). Ainsi, la partie (c) de la figure IV.12 représente la quantité :

$$F'_{\eta,L}(L, t_{\perp}) = (\delta n(k_F) - a(L)t_{\perp})/t_{\perp}^{\alpha/(1-\eta)},$$

tracée en fonction de $x_{\eta} = L t_{\perp}^{1/(1-\eta)}$, pour $\eta = K$. Le fait d'avoir soustrait le terme linéaire ne doit pas changer le comportement thermodynamique puisque, pour $\alpha > 1/2$, $a(L \rightarrow \infty) \rightarrow a_0$, ce qui conduit à un terme linéaire fini et sous-dominant. Par contre, cette opération élimine des termes inhomogènes vis-à-vis des contributions à deux particules. En effet, la courbe (c) nous montre une loi d'échelle bien vérifiée et cela indique que le comportement (IV.46) semble être valable dans ce régime. Le seul point négatif à cette conclusion est qu'il n'est pas évident que la fonction $F_{\eta}(x)$ ait une limite finie dans la limite thermodynamique. Une explication possible consiste à dire que les tailles des systèmes étudiés ne sont pas suffisantes pour voir ce régime, ce qui est compatible avec le fait qu'il faille soustraire la contribution linéaire car, pour ces systèmes, les différences de comportement entre les divers termes ne sont pas très marquées.

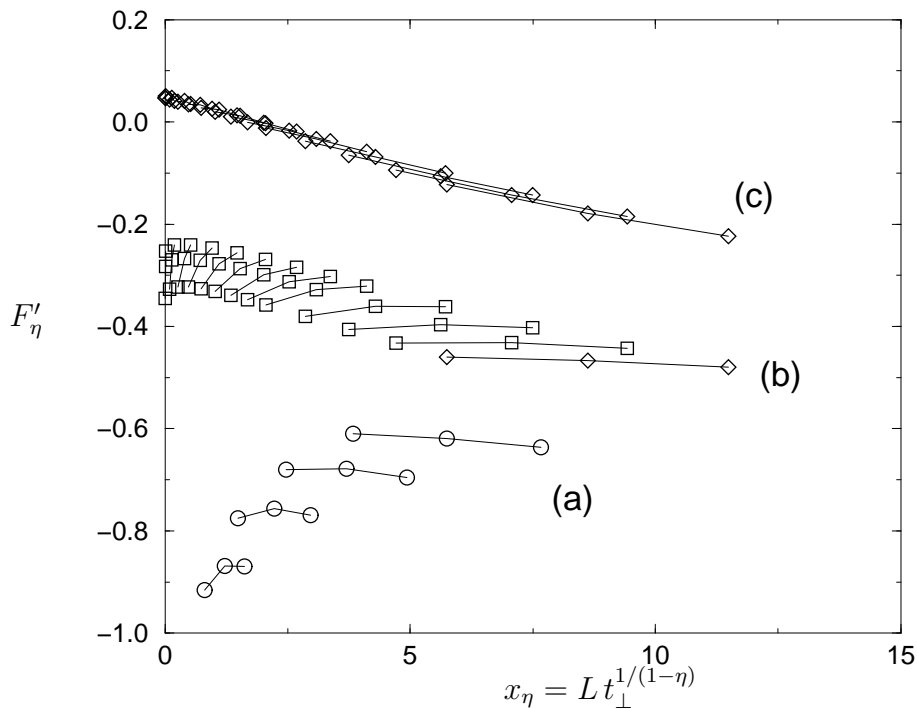


FIG. IV.12 – $F'_\eta(L, t_\perp)$ tracés pour $\eta = \alpha$ (a) et $\eta = K$ (b) et $F'_{\eta,L}(L, t_\perp)$ pour $\eta = K$ (c) calculés avec les tailles $L = 8, 12$ et 16 en fonction de la variable $x_\eta = L t_\perp^{1/(1-\eta)}$. L 'interaction $V = 4$, $i_0 = 3$ correspond à $\alpha = 0,7$. (Figure extraite de la référence [190], publication n° 5).

Enfin, une illustration de l'importance des processus de sauts de paire peut être donnée par la fonction de corrélation connexe à quatre opérateurs (III.12) :

$$C = \langle n(-k_F)n(k_F) \rangle_C = \langle \Phi_0 | n(-k_F)n(k_F) | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | n(-k_F) | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | n(k_F) | \Phi_0 \rangle \quad (\text{IV.48})$$

qui représente la valeur moyenne du saut de deux particules au niveau de Fermi. On soustrait la contribution triviale des sauts monoparticulaires pour ne conserver que les processus corrélés de sauts de particules.

Après extrapolation des résultats de taille finie, on obtient la figure IV.13 qui montre que les sauts de paires existent pour toute valeur de α .

v) Conclusion

Les lois d'échelles supposées être valables dans le cas d'un grand nombre de chaînes couplées ont été vérifiées dans le modèle le plus simple constitué d'une échelle de fermions sans spin. En particulier, la valeur effective du terme de saut est renormalisée par les interactions, en accord avec les arguments de groupe de renormalisation. L'importance des processus de sauts impliquant des paires de particules est également soulignée; ils sont dominants dans la région des interactions fortes ($\alpha > \alpha_{2P} \simeq 0,41$) et modifient la renormalisation de t_\perp .

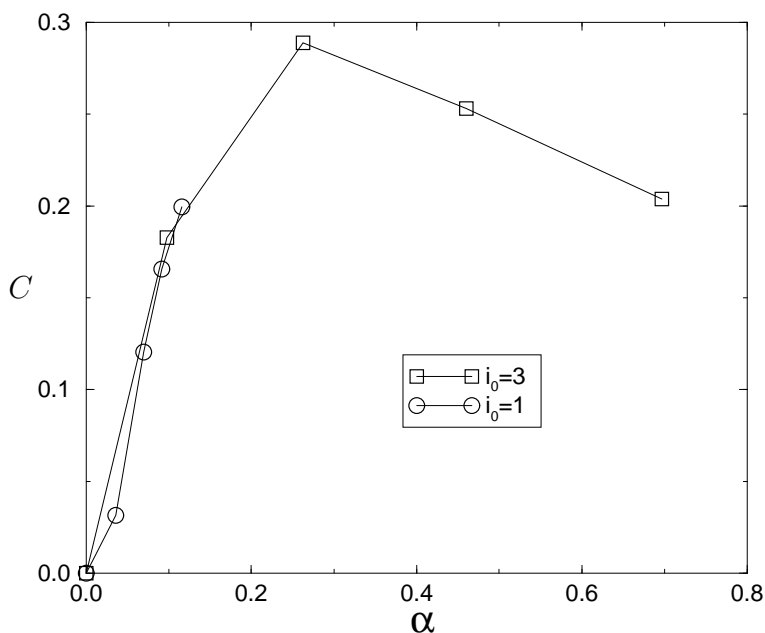


FIG. IV.13 – Valeurs extrapolées de la fonction de corrélation connexe de paires (IV.48) en fonction de α pour différents modèles de portée indiquée sur la figure. α semble être le seul paramètre pour cette fonction.

4 Diagramme de phase de deux chaînes

D'après l'approche de NERSESYAN *et coll.* résumée au début de ce chapitre, un système de deux chaînes de fermions sans spin présente un gap dans un des deux modes, et se comporte donc de manière effective comme un liquide de Luttinger, entièrement caractérisé par ses deux paramètres u et K . Nous allons vérifier cette prédiction en deux temps.

4.1 Relation de dispersion

Nous commençons par calculer les deux branches d'excitations en fonction du nombre d'onde pour un modèle quart-rempli en présence d'un couplage t_{\perp} . Nous montrons les résultats dans la figure IV.14.

On en conclut qu'il existe bien un gap dans une des excitations et, par conséquent, à basse énergie, un seul mode est pertinent. De surcroît, pour ce mode sans gap, l'impulsion transverse est nulle pour k_x voisin de 0, mais elle vaut π autour de $k_x = 2k_F$. On vérifie également en étudiant d'autres tailles que les énergies à $k_x = 0$ et $2k_F$ sont dégénérées à la limite thermodynamique et il existe un seul mode sans gap avec une seule vitesse (qui est la même autour des deux points). On peut donc caractériser cette vitesse et, à l'aide d'autres quantités thermodynamiques, on peut calculer un K effectif qui détermine complètement les propriétés de basse énergie.

Parmi les opérateurs pertinents pour le problème de deux chaînes de fermions sans spin (qui ont été décrits précédemment), on peut se convaincre à l'aide des for-

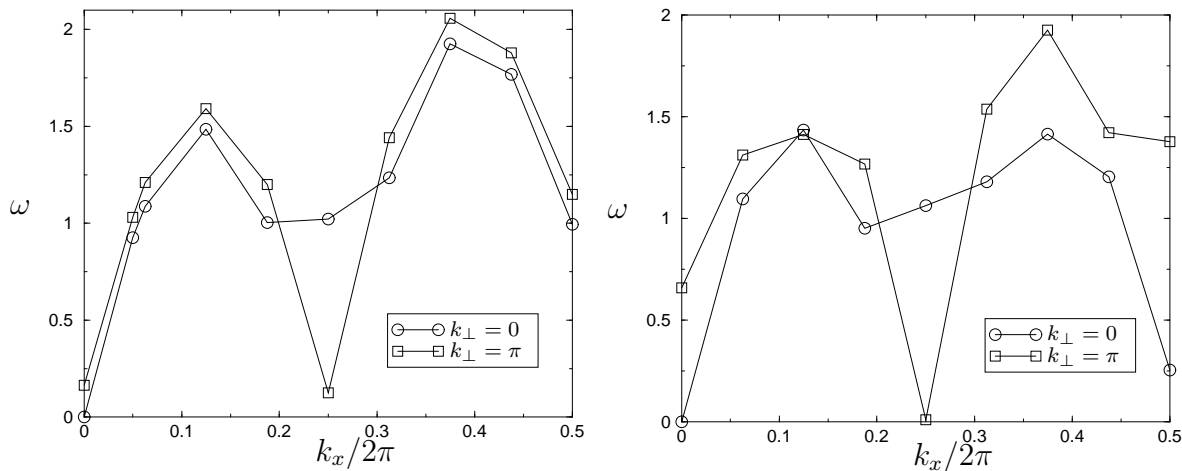


FIG. IV.14 – Branches d'excitations en fonction de k_x et k_\perp pour un système 2×16 de fermions sans spin au quart-remplissage avec des interactions sur chaîne $V = 3$, $i_0 = 3$ et un couplage $t_\perp = 0,3$ (à gauche) et $t_\perp = 0,5$ (à droite).

mules IV.13 que les impulsions des opérateurs décrivant les fluctuations supraconductrices sont $(0,0)$ tandis qu'elle est $(2k_F, \pi)$ pour l'antiferromagnétisme orbital et l'onde de densité de charge. Nous confirmons numériquement que ce sont les seuls modes sans gap.

4.2 Diagramme de phase

À l'aide de la compressibilité et du pic de Drude, nous calculons le paramètre K de Luttinger en fonction du couplage t_\perp . Bien entendu, les quantités dépendent faiblement de ce couplage et on s'attend à avoir des valeurs proches de celles obtenues pour une seule chaîne. Par exemple, une échelle t - V demi-remplie va subir une transition métal-insolant lorsque son paramètre effectif K atteint $1/2$. Nous montrons sur la figure IV.15 les valeurs du poids de Drude pour différentes interactions.

Sur cette figure, nous voyons que t_\perp n'a que peu d'effets et la transition semble se produire pour $V \sim 2$, comme dans le cas d'une seule chaîne.

En conclusion, les effets du couplage interchaîne sont difficiles à observer sur le diagramme de phase. Nous allons donc nous concentrer sur les propriétés spectrales qui permettent d'étudier finement l'évolution des modes sous l'action de t_\perp .

5 Propriétés spectrales d'une échelle de fermions sans spin

L'approche la plus simple pour étudier la cohérence interchaîne consiste à regarder l'évolution des fonctions spectrales de deux chaînes quand on allume le couplage. Nous allons reprendre la référence [189].

En l'absence d'interactions, le terme de saut transverse conduit à la formation de deux bandes, une liante et une antiliante, correspondant à une impulsion transverse de

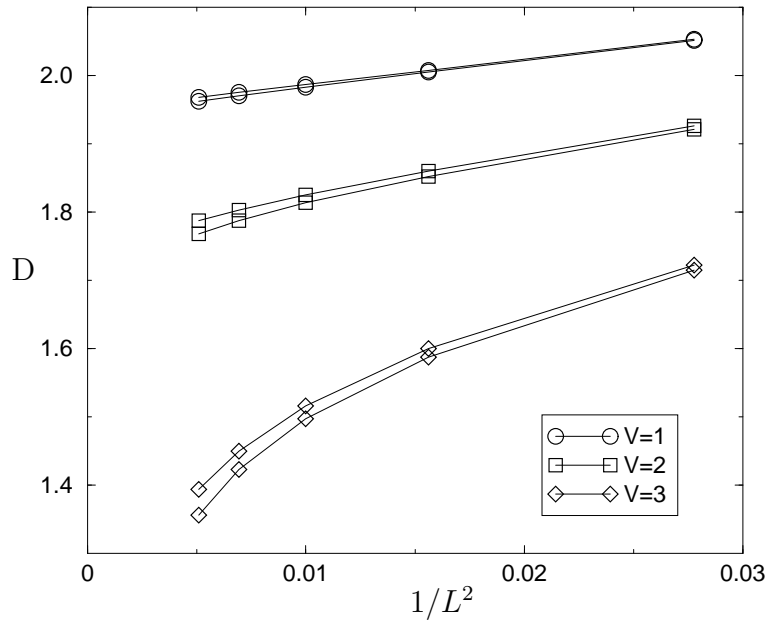


FIG. IV.15 – Valeurs du poids de Drude en fonction de $1/L^2$ pour des échelles $2 \times L$ de fermions sans spin soumis au hamiltonien $t-V$ ($t=1$). Pour chaque valeur de V , les cas $t_{\perp} = 0,1$ et $t_{\perp} = 0,3$ sont considérés (de haut en bas).

0 et π respectivement, qui sont représentées schématiquement sur la figure IV.16. La séparation en énergie de $2t_{\perp}$ de ces bandes est responsable d'un comportement cohérent (cf. équation (IV.16)). Nous allons étudier comment varie cette quantité en présence d'interactions sur les chaînes.

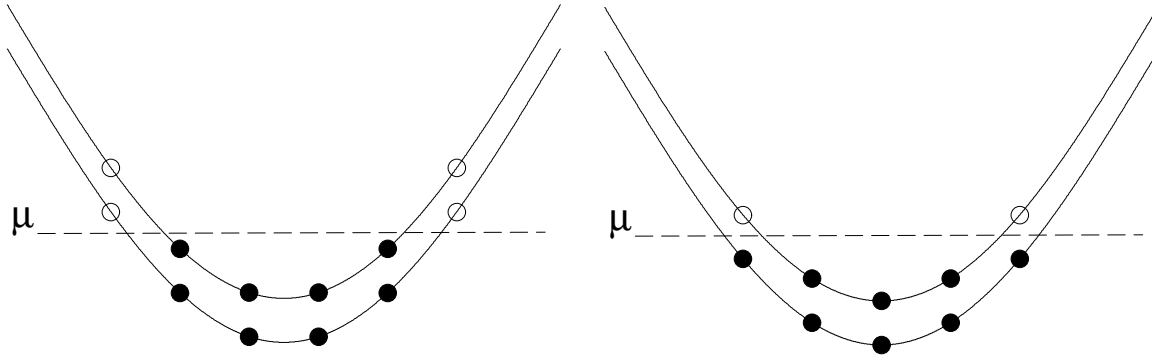


FIG. IV.16 – Relation de dispersion de deux chaînes en l'absence d'interactions pour des couches fermées (à gauche) ou ouvertes (à droite). μ désigne le potentiel chimique (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

On définit habituellement la fonction spectrale comme proportionnelle à la partie imaginaire de la fonction de Green retardée. Pour la fonction spectrale de type « trou »

$$A_h(\vec{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \Im m \left\{ \langle \phi_0 | c_{\vec{k}}^{\dagger} \frac{1}{\omega + i\varepsilon - H + E_0} c_{\vec{k}} | \phi_0 \rangle \right\} \quad (\text{IV.49})$$

où $\vec{k} = (k, k_\perp)$, et la fonction spectrale de type électron, A_e s'obtient en échangeant les opérateurs $c_{\vec{k}}^\dagger$ et $c_{\vec{k}}$.

Notons que cette quantité est observable expérimentalement par photoémission.

Un comportement cohérent existe si les fonctions spectrales pour des impulsions transverses différentes sont séparées. Le paramètre d'ordre ΔE est donc égal à la séparation des pics de basse énergie dans les fonctions spectrales.

5.1 Cas des couches fermées

À l'aide de l'algorithme de Lanczos, nous avons accès à ces grandeurs dynamiques sous la forme de fractions continues (III.5) et nous les avons calculées pour des échelles $2 \times 4p$ avec $p = 1, \dots, 5$ au quart-remplissage. Sur la figure IV.17, nous présentons les résultats pour les vecteurs d'onde proches de k_F pour un réseau 2×16 avec des conditions aux bords qui donnent des couches fermées (figure IV.16).

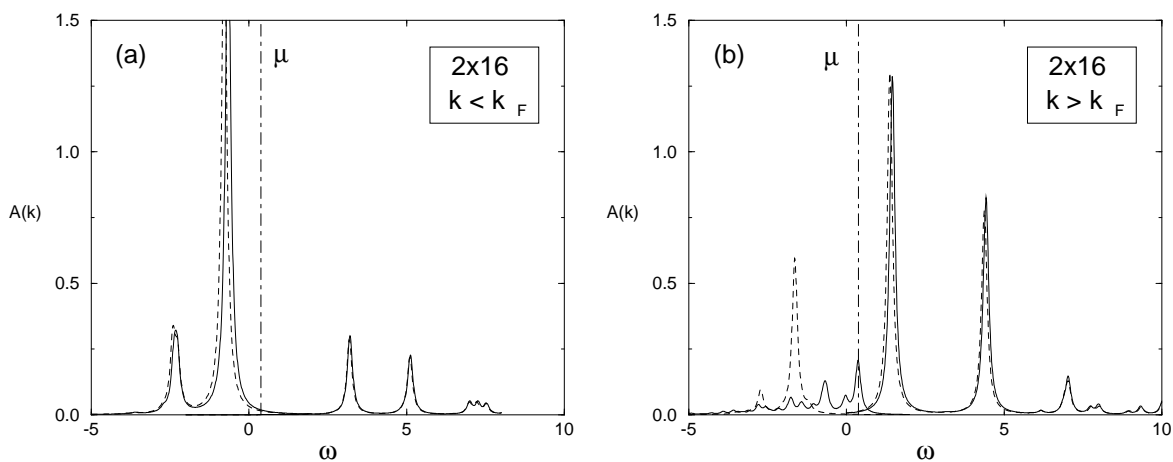


FIG. IV.17 – Fonctions spectrales en fonction de la fréquence ω pour le cas $V = 5$ et $i_0 = 2$ ($\alpha \sim 0,5$). Les régions $\omega < \mu$ et $\omega > \mu$ correspondent à A_h et A_e respectivement qui sont définies dans le texte (formules (IV.49)). Les lignes pleines (pointillées) correspondent à $k_\perp = 0$ ($k_\perp = \pi$). Une largeur artificielle ε a été ajoutée à la fréquence ($\omega \rightarrow \omega + i\varepsilon$) pour donner une largeur aux pics δ (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

La structure émergant pour $\omega < \mu$ et $k > k_F$ est uniquement due aux interactions, et a été prédite par VOIT en utilisant la technique de bosonisation [191, 25]. On notera également que les effets de taille finie empêchent de pouvoir observer la structure fine de ces singularités du liquide de Luttinger.

Étude de la séparation des bandes

L'analyse des données révèle que ΔE se comporte comme $a(L)t_\perp + b(L)t_\perp^3$ pour les petites valeurs du saut interchaîne. Dès lors, on peut procéder à l'analyse de taille finie du coefficient dominant $a(L)$ afin d'extrapoler des résultats dans la limite thermodynamique.

Afin de minimiser les effets de taille finie, nous avons considéré la moyenne des séparations de bandes au-dessus et au-dessous du niveau de Fermi. Les résultats, ainsi

que l'extrapolation, sont présentés sur la figure IV.18

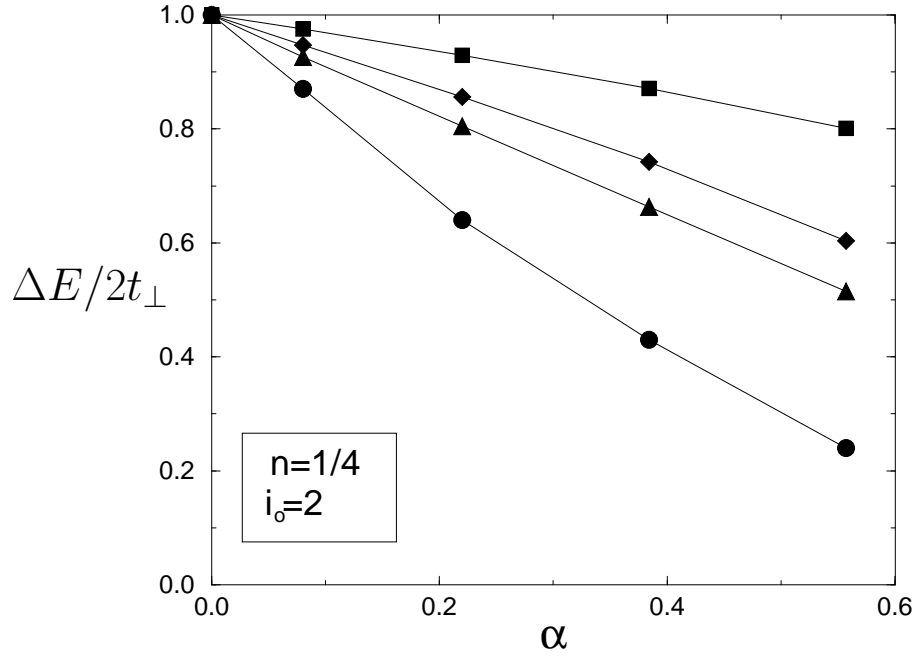


FIG. IV.18 – $\lim_{t_{\perp} \rightarrow 0} \Delta E/2t_{\perp}$ ($=a$) en fonction de α pour différentes tailles. On travaille avec des couches fermées et on a moyenné ΔE avec ses valeurs au-dessus et au-dessous du niveau de Fermi. $N = 16$, $N = 24$ et $N = 32$ correspondent aux symboles ■, ◆, ▲ respectivement (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

Cette différence d'énergie normalisée par sa valeur en l'absence d'interactions est bien sûr réduite en présence d'interactions, mais ne semble pas s'annuler pour $\alpha \sim 0,5$, en accord avec le fait que le terme de saut est pertinent jusqu'à $\alpha = 1$. Il faut toutefois rester vigilant quant à l'interprétation de ces résultats.

Premièrement, le critère de cohérence défini par la probabilité de retour dans l'état initial dépend du comportement des fonctions spectrales pour toutes les fréquences, alors que nous nous sommes concentrés sur les propriétés de basse énergie. Or, pour de fortes interactions, on sait que du poids spectral va être transféré à haute énergie, où l'effet de t_{\perp} est bien moindre (voir les figures IV.17) et, par conséquent, on peut imaginer un régime dans lequel $P(t)$ aurait un comportement incohérent tout en gardant un ΔE fini.

Deuxièmement, dans les extrapolations de résultats obtenus sur des systèmes de taille finie, il faut faire très attention à l'ordre des limites considérées. Ici, la limite $t_{\perp} \rightarrow 0$ a été prise avant de faire l'extrapolation $L \rightarrow \infty$. Or, le comportement linéaire de ΔE n'est peut-être valide que pour un domaine de t_{\perp} qui diminue avec la taille et éventuellement disparaît pour un système infini.

Pour ces deux raisons, nous allons considérer le cas des couches ouvertes schématisées sur la figure IV.16.

5.2 Cas des couches ouvertes

Dans ce cas, on peut ajouter ou enlever une particule exactement au niveau de Fermi qui est défini uniquement par le remplissage et ne dépend pas de la taille.

L'énergie nécessaire à une excitation de type particule (resp. trou) est $E_0(N_e + 1, \vec{k}_e) - E_0(N_e)$ (resp. $E_0(N_e - 1, \vec{k}_h) - E_0(N_e)$) où $E_0(N_e)$ désigne l'énergie de l'état fondamental comportant $N_e = nN$ électrons, et l'impulsion de l'excitation est $\vec{k}_e = (k_F, \pi)$ (resp. $\vec{k}_h = (k_F, 0)$)

On peut là encore définir la séparation des deux bandes comme la différence de ces deux énergies d'excitation :

$$\Delta E = E_0(N_e + 1, \vec{k}_e) + E_0(N_e - 1, \vec{k}_h) - 2E_0(N_e). \quad (\text{IV.50})$$

Dans le cas sans interactions, cette grandeur vaut exactement $2t_\perp$ même pour un système de taille finie. Par contre, pour $t_\perp = 0$ mais en présence d'interactions, ΔE est fini pour des systèmes finis, et il faut vérifier que les extrapolations thermodynamiques redonnent bien une séparation nulle puisque les deux bandes sont confondues dans ce cas. C'est effectivement ce qui est observé sur la figure IV.19. On y voit également que des corrections de taille finie d'ordre $1/L$ sont toujours adéquates quand t_\perp est fini.

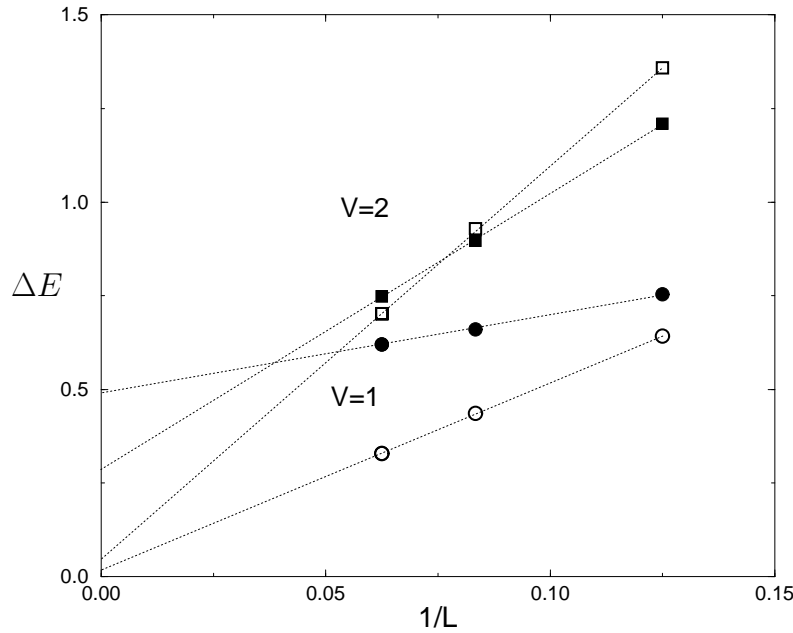


FIG. IV.19 – ΔE défini en (IV.50) en fonction de $1/L$ pour $t_\perp = 0$ (symboles ouverts) et $t_\perp = 0,3$ (symboles pleins). L'interaction est d'amplitude V précisée sur la figure et de portée $i_0 = 2$ (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

Après avoir extrapolé ces valeurs pour différentes interactions, on peut tracer la quantité $\Delta E/2t_\perp$ en fonction de α (figure IV.20). Là encore, les interactions sur chaîne

réduisent énormément cette séparation des bandes, ce qui représente une tendance à un comportement incohérent. En outre, ces résultats suggèrent qu'il existe une valeur critique $\alpha^*(t_\perp)$ au-delà de laquelle apparaît un comportement incohérent. Comme on s'y attendrait, $\alpha^*(t_\perp)$ augmente avec t_\perp mais pour des valeurs raisonnables de $t_\perp \sim 0,2$, $\alpha^*(t_\perp)$ peut ne pas excéder 0,4. La valeur limite $\alpha^*(t_\perp = 0) = \alpha_0$ ne peut pas être calculer précisément par notre méthode, mais elle est probablement bien inférieure à 0,4.

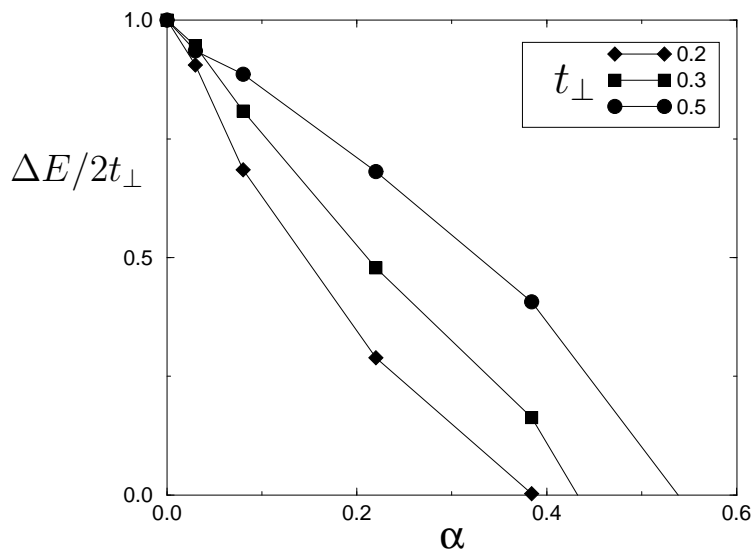


FIG. IV.20 – Valeurs extrapolées de $\Delta E/2t_{\perp}$ défini en (IV.50) en fonction de α pour différentes valeurs de t_{\perp} indiquées sur la figure. L'interaction est de portée $i_0 = 2$ (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

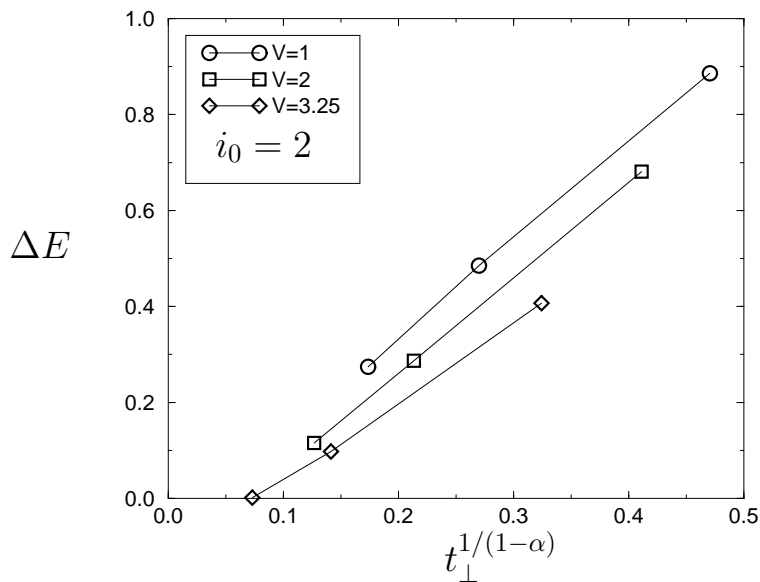


FIG. IV.21 – Valeurs extrapolées de ΔE en fonction de $t_{\perp}^{1/(1-\alpha)}$ pour différentes valeurs de V indiquées sur la figure. L'interaction est de portée $i_0 = 2$ (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

Loi d'échelle

Pour aller plus loin dans l'analyse des résultats, nous pouvons suivre la proposition déduite des équations de renormalisation [34] qui stipule que ΔE doit se comporter comme $t_{\perp}^{1/(1-\alpha)}$. Nous reprenons nos données pour plusieurs interactions et nous les traçons en fonction de cette quantité sur la figure IV.21.

5.3 Discussion

En comparant les figures IV.18 et IV.20, on peut être troublé par des résultats en apparence contradictoires. Une explication possible réside dans le fait que les limites $t_{\perp} \rightarrow 0$ et $L \rightarrow \infty$ ne commutent pas. Nous avons justifié ce point en observant que le domaine de linéarité de ΔE diminuait en augmentant la taille. Toutefois, les résultats obtenus sont relativement rassurants puisque la loi d'échelle prédite par les approches du groupe de renormalisation est encore observée sur la séparation des bandes.

Nous étudions de la même manière un modèle incluant les degrés de liberté de spin.

6 Échelle de Hubbard : rôle du spin

Nous avons mentionné que la séparation spin-charge à elle seule ne supprimait pas la cohérence interchaîne car il faut avant tout des interactions suffisamment fortes et étendues, c'est-à-dire des valeurs de α élevées. Toutefois, cet argument n'était valide que pour un modèle bien précis et on peut se demander s'il s'agit bien du comportement générique. À cet effet, nous étudions à nouveau la séparation des bandes dans un système de deux chaînes de Hubbard couplées.

6.1 Hamiltonien

Nous étudions un modèle, incluant des degrés de spins, de deux chaînes de Hubbard couplées par un terme de saut dont le hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{i,\lambda,\sigma} (c_{i,\lambda,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\lambda,\sigma} + h.c.) + U \sum_{i,\lambda} n_{i,\lambda,\uparrow} n_{i,\lambda,\downarrow} \\
 & - t_{\perp} \sum_{i,\sigma} (c_{i,1,\sigma}^{\dagger} c_{i,2,\sigma} + h.c.) + V \sum_{r,i,\lambda} V_r n_{i,\lambda} n_{i+r,\lambda}.
 \end{aligned}
 \tag{IV.51}$$

En plus de l'interaction habituelle répulsive sur site, nous incluons éventuellement un terme étendu de la forme $V_r = U/(r+1)$, limité à $r = 1$ ou 2 , qui brise l'intégrabilité du hamiltonien pour une chaîne, et permet d'obtenir des valeurs de α plus élevées⁶. Ces valeurs sont calculées par la procédure habituelle décrite dans le chapitre III.

6.2 Critère de cohérence

Au lieu de considérer la probabilité de retour $P(t)$ définie à la page 95 et afin de faciliter les calculs numériques, nous étudions une quantité assez proche qui correspond

⁶ Le modèle de Hubbard unidimensionnel est intégrable pour toutes les valeurs de l'interaction et $0 < \alpha < 1/8$.

à la valeur moyenne du saut interchaîne que nous avons étudiée extensivement pour l'échelle de fermions sans spin (équation (IV.40))

$$P(\tau) = |\langle c_{k,1}(\tau)c_{k,2}^\dagger \rangle|^2. \quad (\text{IV.52})$$

La signification de cette fonction est la suivante. On crée à l'instant 0 une particule supplémentaire sur une chaîne que l'on propage pendant un temps τ avec le hamiltonien global. À nouveau, un comportement cohérent se caractérise par des oscillations dans cette quantité.

Lien avec les propriétés spectrales

L'intérêt supplémentaire de ce nouveau critère de cohérence est qu'il peut être relié aux propriétés spectrales du système que nous avons également étudiées. Nous allons expliciter ce lien.

Pour un système de deux chaînes, il est pratique de définir les bandes liante et antiliante dans l'espace de Fourier :

$$c_{k,0} = \frac{c_{k,1} + c_{k,2}}{\sqrt{2}} \quad (\text{IV.53})$$

$$c_{k,\pi} = \frac{c_{k,1} - c_{k,2}}{\sqrt{2}} \quad (\text{IV.54})$$

En remplaçant dans l'équation (IV.52), on obtient :

$$P(\tau) = \frac{1}{4} |\langle c_{k,0}(\tau)c_{k,0}^\dagger - c_{k,\pi}(\tau)c_{k,\pi}^\dagger \rangle|^2. \quad (\text{IV.55})$$

Puis, en introduisant une base complète d'états et en effectuant une transformée de Fourier, on peut réécrire chacun des termes ci-dessus comme :

$$\int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau} \langle c_{k,0}(\tau)c_{k,0}^\dagger \rangle = \frac{\pi}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} |\langle n|c_{k,0}|m \rangle|^2 \delta(\omega - (E_m - E_n)).$$

À partir de cette expression, on remarque la ressemblance avec la fonction spectrale en représentation de Lehmann [76] :

$$A(k, k_\perp, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle n|c_{k,k_\perp}|m \rangle|^2 e^{-\beta E_n} (1 + e^{-\beta\omega}) \delta(\omega - (E_m - E_n)), \quad (\text{IV.57})$$

et on obtient finalement la transformée de Fourier de $P(\tau)$ comme une convolution des fonctions spectrales :

$$P(E) = \frac{\pi}{4} \int_{-\infty}^\infty \frac{A(k, \omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \frac{A(k, \omega - E)}{1 + e^{-\beta(\omega - E)}} d\omega, \quad (\text{IV.58})$$

où, $A(k, \omega) = (A(k, 0, \omega) - A(k, \pi, \omega))/2$, est la différence des fonctions spectrales d'impulsion transverse 0 et π .

6.3 Résultats

i) Méthode de Monte-Carlo Quantique

Afin de calculer cette quantité, on peut utiliser l'algorithme de Monte-Carlo Quantique BSS pour calculer la fonction spectrale pour les fréquences de Matsubara. Puis, afin d'obtenir des résultats physiques, on utilise une technique d'Entropie Maximale. Ces méthodes sont décrites dans le chapitre III.

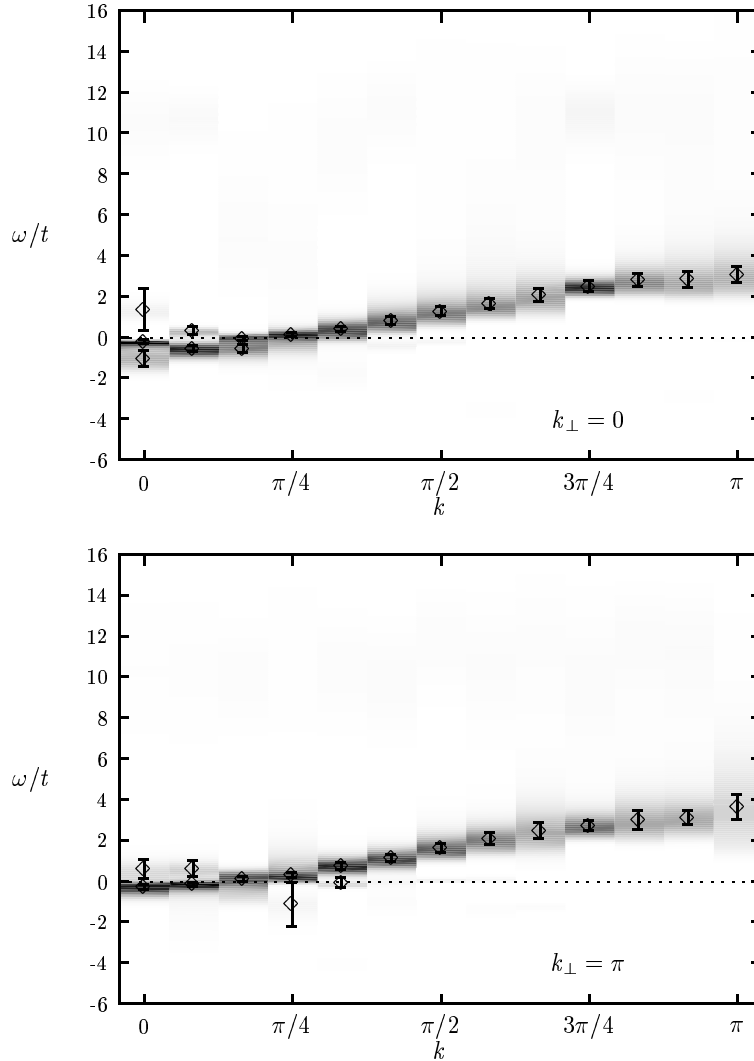


FIG. IV.22 – Résultats par la méthode de Monte-Carlo quantique des fonctions spectrales $A(k, k_{\perp}, \omega)$ pour deux chaînes de 24 sites au tiers-remplissage avec $U/t = 8$, $t_{\perp}/t = 0,15$ et une température inverse $\beta t = 10$. Les graphes (a) et (b) représentent respectivement les branches $k_{\perp} = 0$ et $k_{\perp} = \pi$. Les zones les plus ombragées correspondent au poids spectral les plus grands tandis que les points avec barres d'erreur indiquent les positions des pics. (Figure extraite de la référence [192], publication n° 1).

Pour des chaînes strictement de Hubbard ($V = 0$) et même avec une répulsion

importante, l'effet du terme de saut transverse est de séparer les deux bandes comme on le voit sur la figure IV.22.

On remarque également sur la figure IV.22 que la séparation des bandes ΔE est de l'ordre de $2t_{\perp}$, qui est la valeur en l'absence d'interaction. En fait, même des valeurs élevées de l'interaction U ne conduisent qu'à de petites valeurs de α ($\alpha < 1/8$ pour le modèle de Hubbard) et, par conséquent, on retrouve des résultats similaires au cas sans spin.

ii) Diagonalisation Exacte

Afin de vérifier ces résultats qui peuvent être entachés d'erreurs du fait de la continuation analytique, nous présentons les mêmes quantités obtenues par une diagonalisation exacte sur un plus petit système et nous obtenons un bon accord qualitatif (figure IV.23).

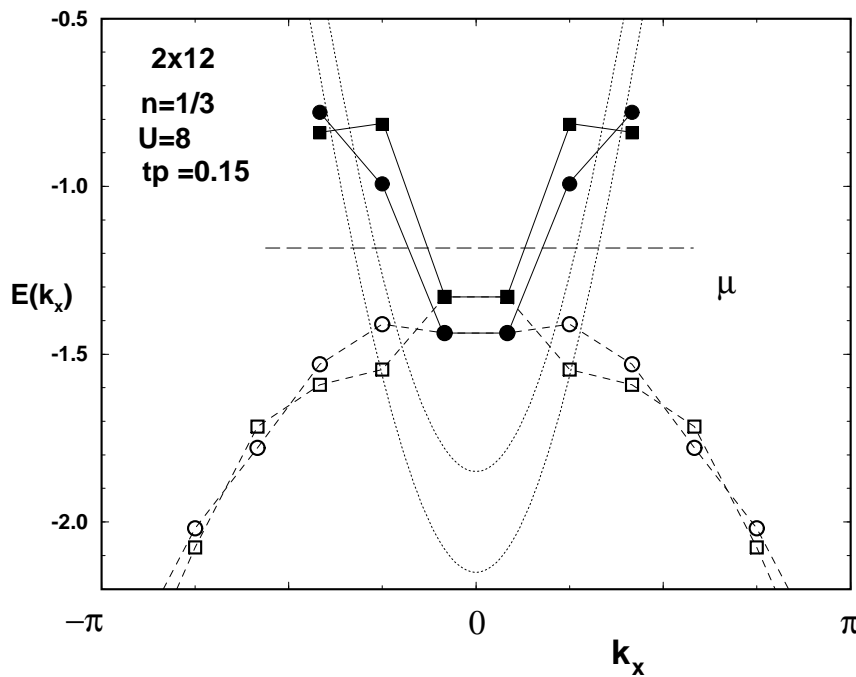


FIG. IV.23 – Résultats par diagonalisation exacte des fonctions spectrales $A(k, k_{\perp}, \omega)$ pour deux chaînes de 12 sites au tiers remplissage avec $U/t = 8$, $t_{\perp}/t = 0,15$. Les symboles pleins désignent les branches liante et antiliante, tandis que les symboles vides représentent d'autres pôles des fonctions spectrales avec moins de poids. Les lignes en pointillés symbolisent le cas sans interactions. (Figure extraite de la référence [192], publication n° 1).

Séparation des bandes

De manière analogue au cas sans spin présenté à la page 122, nous étudions la séparation qui existe entre les deux bandes pour plusieurs interactions, tailles etc. En

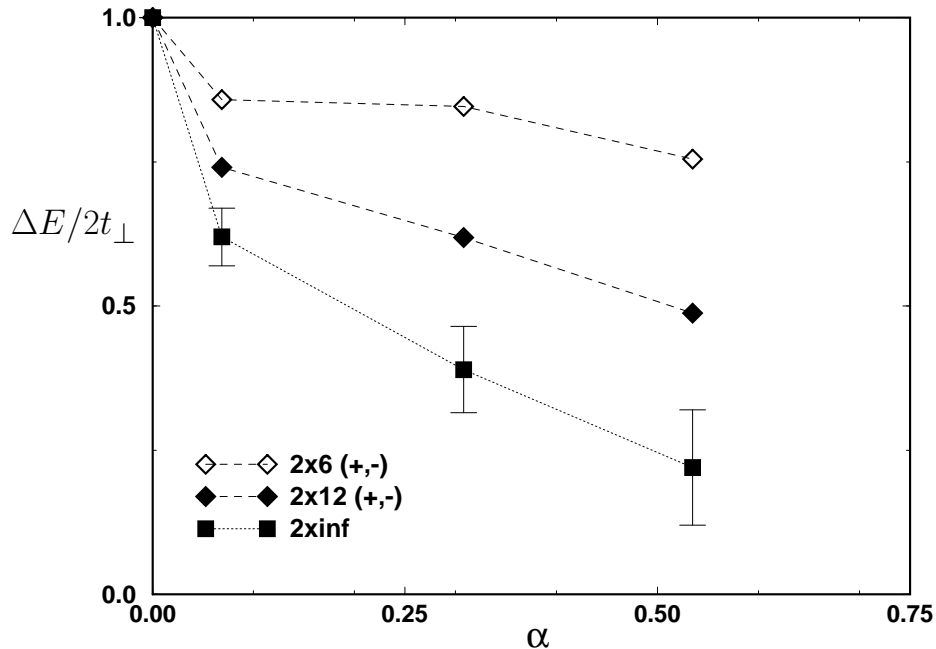


FIG. IV.24 – Séparation normalisée des deux bandes en fonction du paramètre de Luttinger α . Il s'agit des résultats obtenus par Diagonalisation Exacte sur des systèmes 2×6 et 2×12 dans la limite $t_{\perp} \rightarrow 0$, ainsi que les valeurs extrapolées à la limite thermodynamique. (Figure extraite de la référence [192], publication n° 1).

jouant avec les paramètres et la portée de l'interaction, on remarque que α semble être le *seul* paramètre clé.

Enfin, en extrapolant les résultats par une loi d'échelle du même type que pour des fermions sans spin ($1/L_x$), nous obtenons la courbe IV.24 qui est très similaire à la figure IV.18.

Ce résultat confirme une fois de plus que pour cette quantité, le couplage interchaîne reste pertinent au moins jusqu'à $\alpha = 1$, en accord avec les prédictions du groupe de renormalisation (IV.5). Toutefois, le critère de cohérence présenté en premier lieu fait intervenir tout le domaine de fréquence des fonctions spectrales et, par conséquent, il n'est pas évident que la séparation qui se produit à basse énergie puisse donner lieu à un comportement cohérent. Ceci repose sur l'observation suivante : pour des valeurs de α importantes, il apparaît de plus en plus de poids à fréquence élevée et ces pics sont beaucoup moins affectés par le terme de saut (phénomène que nous avons déjà identifié pour des fermions sans spin sur la figure IV.17).

Calcul de $P(\tau)$

À l'aide des fonctions spectrales précédemment calculées et de la relation (IV.58), nous pouvons calculer le critère de cohérence de l'équation (IV.52). On observe plusieurs structures sur la figure IV.25 qui ont des origines physiques distinctes.

Tout d'abord, il se produit des oscillations rapides dues à la structure fine de la

fonction spectrale unidimensionnelle, puisque celle-ci présente des pics fins qui peuvent être attribués à des replis de bandes (ou *shadow bands* en anglais) [193]. Or, à la limite thermodynamique, on s'attend à ce que ces pics s'élargissent et donc que les oscillations rapides soient atténuées voire supprimées.

Mais, ce sont les oscillations lentes de pseudo-périodes d'ordre $\pi/\Delta E$ dues à t_{\perp} qui entrent en jeu dans le mécanisme de cohérence. Effectivement, on observe un amortissement plus fort pour les grandes valeurs de α (voir la figure IV.25) mais malheureusement, il est difficile de dire si ces oscillations vont disparaître à la limite thermodynamique ou non.

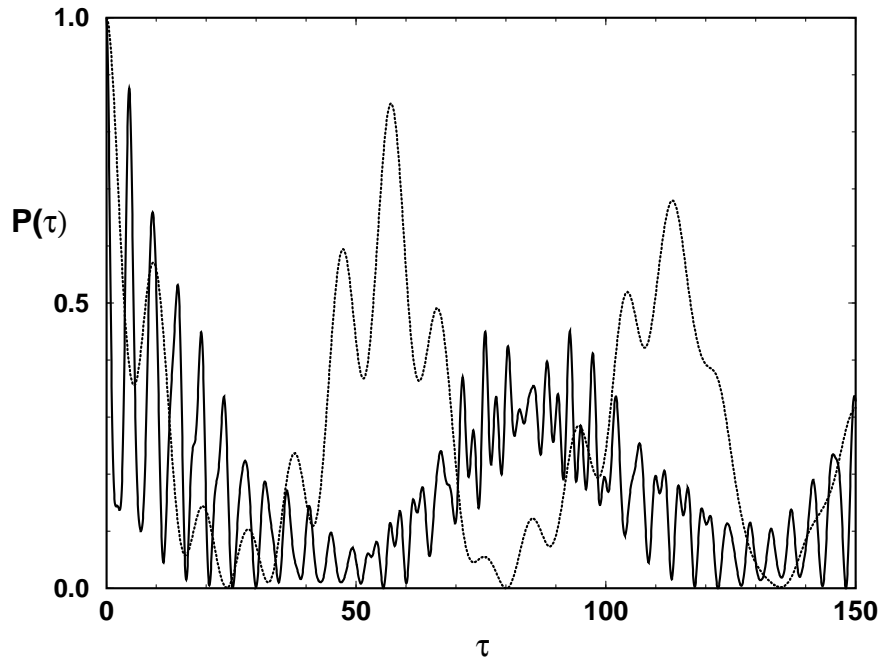


FIG. IV.25 – Probabilité $P(\tau)$ définie en (IV.55) calculée par Diagonalisation Exacte pour un système tiers-rempli 2×12 auquel on ajoute un trou à une impulsion longitudinale $k = \pi/12 < k_F$. La ligne en trait plein correspond à une répulsion de type Hubbard $U = 8$, celle en tirets à un modèle de portée intermédiaire $U = 6$, $V_1 = 3$ et $V_2 = 2$. (Figure extraite de la référence [192], publication n° 1).

Ainsi, il semble se produire une séparation des bandes quel que soit t_{\perp} quand il est pertinent, c'est-à-dire $\alpha < 1$. Par contre, ce mécanisme de basse énergie n'est peut être pas suffisant pour engendrer un comportement cohérent, puisque le critère de cohérence fait intervenir la différence des fonctions spectrales sur tout le spectre. En effet, il semble que la majeure partie du poids spectral soit dans la partie incohérente à fréquence finie et cela pourrait jouer un rôle crucial en limitant par exemple la cohérence interchaîne.

Nous allons donc étudier un modèle particulier dont les propriétés thermodynamiques sont sensibles à la cohérence du saut interchaîne.

7 Étude de la cohérence dans une géométrie particulière

Comme nous l'avons rappelé, il est possible que, pour des chaînes couplées, le transport soit cohérent dans la direction des chaînes mais incohérent dans la direction transverse. Afin d'étudier cette question pour un modèle simple, nous avons calculé les propriétés du transport électronique dans une échelle de Möbius traversée par un flux Aharonov-Bohm $(\hbar c/e)\Phi$ [194] (voir la figure IV.26).

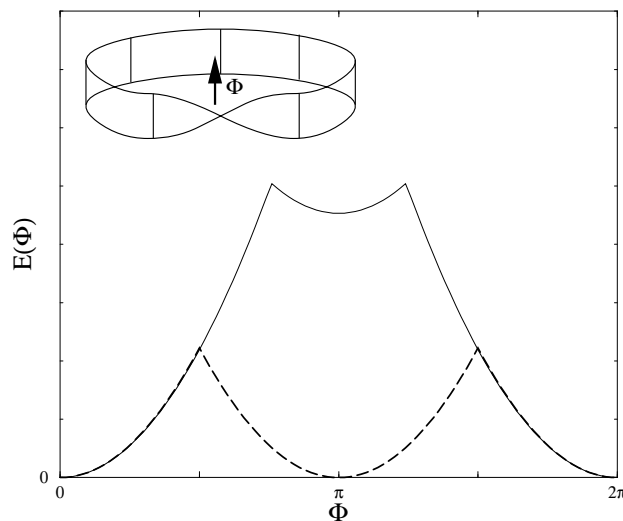


FIG. IV.26 – Schémas génériques de la dépendance de l'énergie en fonction du flux. Les courbes solides et en tirets correspondent respectivement aux cas $t_{\perp}/t = 0,2$ et $t_{\perp}/t = 0$. En insert, schéma d'une échelle de Möbius traversée par un flux $(\hbar c/e)\Phi$ (figure extraite de la référence [194], publication n° 4).

En effet, on s'attend à ce que la périodicité de l'énergie en fonction du flux soit doublée pour des interactions suffisamment répulsives puisque, dans ce cas, les électrons ne peuvent plus sauter de manière cohérente entre les chaînes et doivent parcourir la totalité des sites pour revenir au point de départ c'est-à-dire qu'ils encerclent deux fois le flux Φ . Nous introduisons le courant permanent dans ce système qui est une quantité mesurable, directement liée à la cohérence de phase de la fonction d'onde du système, et dont l'expression à température nulle est :

$$I(\Phi) = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \Phi}, \quad (\text{IV.59})$$

où E est l'énergie du fondamental.

L'invariance de jauge implique que E est une fonction périodique du flux avec une période de $\phi_0 = 2\pi$ [195, 196] et par conséquent $I(\Phi)$ peut être exprimé sous la forme

d'une série de Fourier :

$$I(\Phi) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n \sin(n\Phi). \quad (\text{IV.60})$$

Des expériences de mesures d'aimantation permettent de mesurer les premiers coefficients de cette série pour des anneaux métalliques [197, 198] ou semi-conducteurs [199, 200]. Par contre, dans une échelle de Möbius, lorsque le saut sur les barreaux est proscrit ($t_{\perp} = 0$), les électrons doivent tourner deux fois autour du flux pour revenir au point de départ, et il en résulte une périodicité réduite du courant permanent égale à $\phi_0/2$. Dans ce cas, toutes les harmoniques impaires de (IV.60) s'annulent.

En présence d'interactions et du saut le long des barreaux, on caractérise un comportement cohérent par une périodicité ϕ_0 , tandis que si la cohérence interchaîne est détruite par les interactions, le terme t_{\perp} ne sera plus important et la périodicité deviendra $\phi_0/2$. Ainsi, la disparition des harmoniques impaires de $I(\Phi)$ est une signature directe de la destruction de la cohérence interchaîne.

Dans cette étude, plutôt que de considérer les harmoniques impaires séparément, nous nous concentrons sur la différence d'énergie ΔE définie par

$$\Delta E = E(\Phi = \pi) - E(\Phi = 0) = -\frac{2\hbar}{e} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{I_{2n+1}}{2n+1} \quad (\text{IV.61})$$

La dépendance en flux typique est représentée sur la figure IV.26 où ΔE est fini. D'après la discussion qui précède, cette quantité doit s'annuler en l'absence de transport interchaîne cohérent. Avant d'aller plus loin, nous allons discuter les effets de taille finie étonnants qui apparaissent déjà dans le cas sans interactions.

7.1 Cas sans interactions

Comme nous l'avons déjà souligné, les effets de spin ne sont pas pertinents pour la cohérence et donc, nous travaillons avec des fermions sans spin. En l'absence d'interactions, le hamiltonien pour une échelle de Möbius comportant N barreaux s'écrit :

$$H = -t \sum_i^{2N} (e^{i\Phi/N} c_i^{\dagger} c_i + h.c.) - t_{\perp} \sum_i^{2N} c_i^{\dagger} c_{i+N}, \quad (\text{IV.62})$$

avec les conditions aux limites périodiques $c_{i+2N} = c_i$. La relation de dispersion s'en déduit immédiatement :

$$\epsilon_k = -2t \cos(ka + \Phi/N) - t_{\perp} \cos(Nka), \quad (\text{IV.63})$$

avec $k = p(2\pi/2Na)$, où p est un entier et a le pas du réseau. La structure particulière de cette échelle de Möbius est entièrement contenue dans cette expression, puisqu'il existe deux bandes (liante et antiliante) ; mais la différence essentielle par rapport à une échelle usuelle est que les vecteurs d'onde $k = p(2\pi/2Na)$ sont restreints à la bande liante pour p pair et à celle antiliante pour p impair.

Considérons alors la périodicité de l'énergie du fondamental dans un tel système. Si t_{\perp} est très grand devant la largeur de bande, tous les fermions sont dans la bande liante

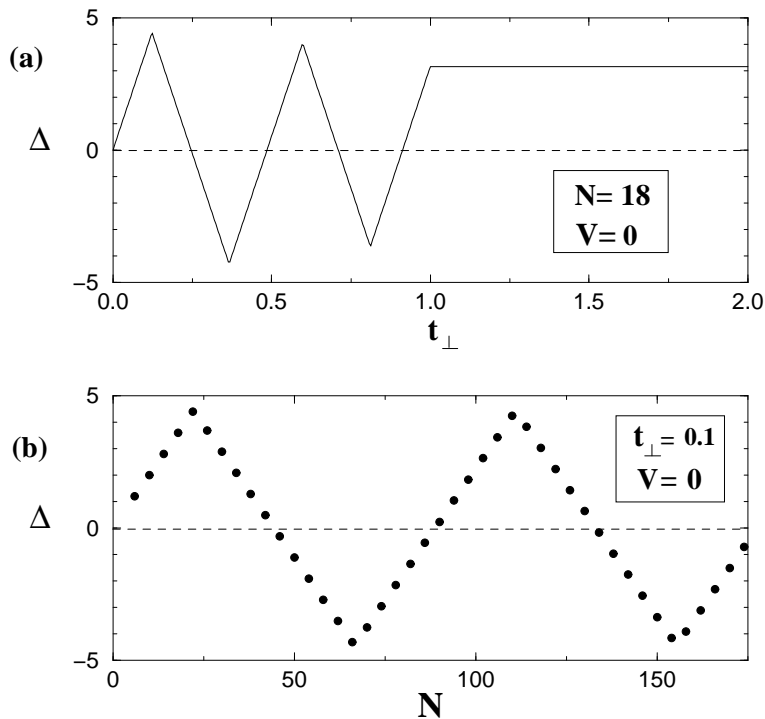


FIG. IV.27 – Dépendance de Δ (équation (IV.64)) pour des fermions sans spin et sans interactions au quart-remplissage : (a) en fonction de t_{\perp} pour une taille fixée (en haut) ; (b) en fonction de N pour $t_{\perp} = 0,1$ (en bas). Figure extraite de la référence [194], publication n° 4.

et le fondamental possède une période 2π . Dans le cas où $t_{\perp} = 0$, les deux bandes sont dégénérées et la période devient π . Pour des valeurs intermédiaires de t_{\perp} , la périodicité est de 2π sauf pour quelques valeurs particulières où elle devient π . Le nombre de ces valeurs augmente avec le nombre n de particules du système. Afin de comprendre ce résultat, considérons la différence d'énergie normalisée par la taille du système

$$\Delta = (-1)^{\frac{n-1}{2}} N \Delta E \quad (\text{IV.64})$$

où n est le nombre de particules qui est choisi impair afin d'avoir un fondamental unique. Un signe est ajouté pour que cette quantité soit positive dans la limite $t_{\perp} \rightarrow 0$, et le facteur N permet d'avoir des résultats non nuls dans la limite thermodynamique.

Le comportement typique de Δ est montré sur la figure IV.27. D'après la relation de dispersion (IV.63), $E(0)$ et $E(\pi)$, et donc Δ , sont des fonctions linéaires par morceaux de t_{\perp} ; en effet, la pente de Δ change toutes les fois où une paire de particules change de bande, ce qui arrive forcément lorsque t_{\perp} augmente. Bien entendu, ces transitions ne se produisent pas pour les mêmes valeurs de t_{\perp} pour des flux différents et il en résulte le comportement de Δ indiqué. Enfin, lorsque t_{\perp} est suffisamment grand et que la bande antiliante est complètement vide, Δ reste constant. Entre chaque changement de pente, Δ s'annule et cela correspond aux points où la périodicité de l'énergie est π . Or, puisque les particules changent de bande par paires, le nombre de tels points est

grossièrement égal à la moitié du nombre de particules (c'est exactement $2n + 1$ pour $4n + 1$ particules et on trouve des résultats semblables pour les autres remplissages).

Le même effet s'observe sur la dépendance de Δ en fonction de la taille (voir la figure IV.27). Il existe des oscillations dont les extremums se produisent lorsque la différence des nombres de particules sur chaque branche change de 2. La courbe est linéaire par morceaux et la pente alterne entre $2t_{\perp}$ et $-2t_{\perp}$. Par conséquent, la périodicité de l'énergie du fondamental pour des fermions sans interactions n'est pas bien définie dans la limite thermodynamique

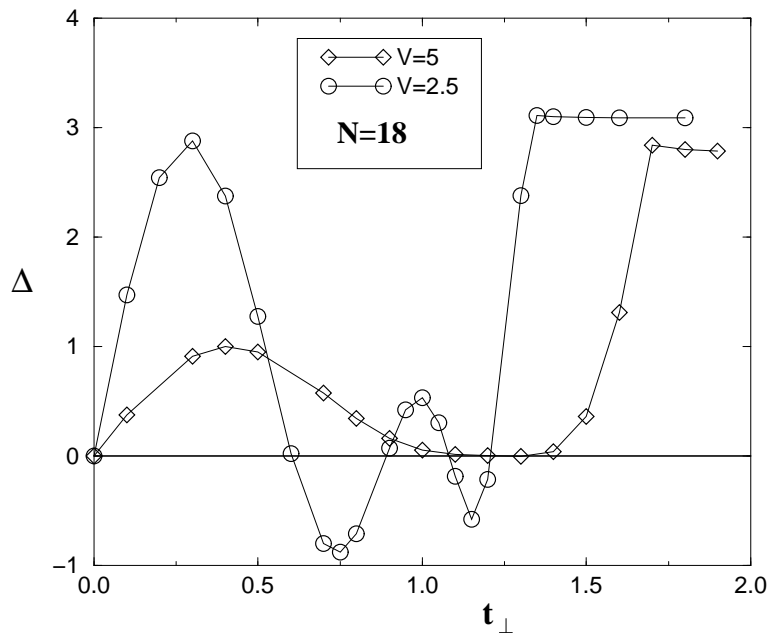


FIG. IV.28 – Dépendance de Δ (équation (IV.64)) en fonction de t_{\perp} pour des fermions sans spin au quart-remplissage avec une interaction $V/t = 2,5$ ($\alpha = 0,36$) et $V/t = 5$ ($\alpha = 1$) pour une taille fixée $L = 2N = 36$ (figure extraite de la référence [194], publication n° 4).

7.2 Effet des interactions

Considérons maintenant l'effet d'une interaction électronique sur la périodicité de l'énergie. Nous prendrons le même type d'interactions étendues que dans l'équation (IV.37) (avec une portée $i_0 = 3$), afin d'obtenir des valeurs de α aussi grandes que possibles (voir la figure IV.6)

$$H_{\text{int}} = \sum_i \left(V n_i n_{i+1} + \frac{2V}{3} n_i n_{i+2} + \frac{V}{2} n_i n_{i+3} \right)$$

Grâce à la méthode de Diagonalisation Exacte, nous pouvons calculer Δ pour différentes tailles jusqu'à 36 sites et plusieurs interactions. Nous montrons quelques résultats sur la figure IV.28 et nous voyons que les effets de l'interaction sont cruciaux. La première oscillation devient dominante et la première valeur de t_{\perp} pour laquelle Δ

s'annule augmente considérablement : la courbe pour $\alpha = 0,36$ est déjà très différente de celle sans interactions (figure IV.27a). Mais, l'effet le plus important est la disparition des oscillations pour $V/t = 5$, c'est-à-dire $\alpha = 1$. En outre, cette valeur critique est indépendante de la taille. Or, en revenant à l'origine de ces oscillations qui est le transfert de particules entre les bandes, l'absence de ces oscillations signifie que cette idée n'est plus vraie lorsque les interactions sont suffisamment fortes. En d'autres termes, l'opérateur de saut t_{\perp} n'est plus suffisant pour produire la séparation des bandes dans le spectre de basse énergie du système.

Dépendance en taille

Bien entendu, notre discussion des effets de taille est limitée à 36 sites qui est la taille maximale accessible par Diagonalisation Exacte à ce remplissage. Pour ces tailles et pour $t_{\perp} = 0,1$, nous nous situons dans la première portion de la figure IV.27 (b) où la pente vaut $2t_{\perp}$ sans interactions. L'effet des interactions est de réduire considérablement ce coefficient (voir la figure IV.29) qui change même de signe au-delà de $V/t = 5$, ce qui signifie que Δ diminue avec la taille dans ce régime. Étant donné l'absence d'oscillations en fonction de t_{\perp} pour ces interactions, il semble raisonnable de supposer que Δ ne change pas de signe non plus en fonction de la taille. Cela nous amène à la conclusion que Δ s'annule dans la limite thermodynamique quand $\alpha \geq 1$.

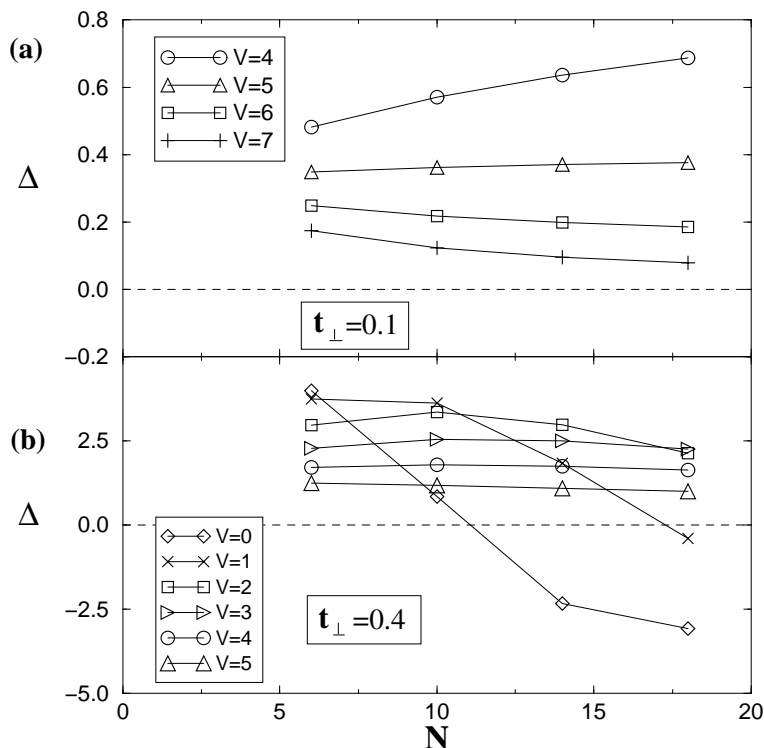


FIG. IV.29 – Dépendance de Δ en fonction du nombre de barreaux N pour diverses interactions V et plusieurs valeurs de t_{\perp} : $t_{\perp} = 0,1$ en haut et $t_{\perp} = 0,4$ en bas (figure extraite de la référence [194], publication n° 4).

Toutefois, des effets importants sont également présents pour des interactions plus

faibles. Par exemple avec $t_{\perp} = 0,4$, Δ change de signe entre $N = 10$ et $N = 14$ dans le cas sans interactions (figure IV.29) mais, même pour une interaction relativement faible $V/t = 2$, Δ ne change pas de signe pour les tailles considérées et la courbe devient très plate pour $V/t = 3$ ($\alpha = 0,46$). Par conséquent, il serait possible que, pour ces interactions plus faibles, Δ tende vers 0 avec des oscillations amorties. Bien entendu ce résultat mériterait d'être confirmé par d'autres études. Enfin, mentionnons que ces oscillations existent également pour une simple échelle, par contre le changement de périodicité est propre à la géométrie de l'échelle de Möbius.

7.3 Conclusion

Il ressort de cette étude que la notion de bandes séparées a totalement disparue lorsque $\alpha = 1$. Bien sûr, ce résultat est consistant avec l'argument du groupe de renormalisation qui suggère que t_{\perp} n'est plus pertinent lorsque $\alpha > 1$ (équation (IV.5)). Toutefois, ce résultat est limité aux petits couplages t_{\perp} , tandis que notre observation montre que, même de « grandes » valeurs du saut interchaîne sont sans effets si $\alpha > 1$. En outre, dans le cas où t_{\perp} est pertinent, nous observons tout de même des effets intéressants ce qui est tout à fait en accord avec nos études ultérieures.

Enfin, mentionnons que les oscillations que nous discutons doivent être distinguées de celles qui apparaissent naturellement en fonction de la parité du nombre de particules [201] et qui ont été prises en compte dans la définition de Δ à l'aide d'un signe adéquat (voir la définition (IV.64)). Précisons également que cet effet est distinct d'un comportement similaire calculé pour une seule chaîne de Hubbard avec U infini [202] puisque, dans ce cas, il s'agit d'un effet de spin alors que dans notre étude, les degrés de liberté de spin sont négligés et les effets sont observables pour des valeurs finies de l'interaction.

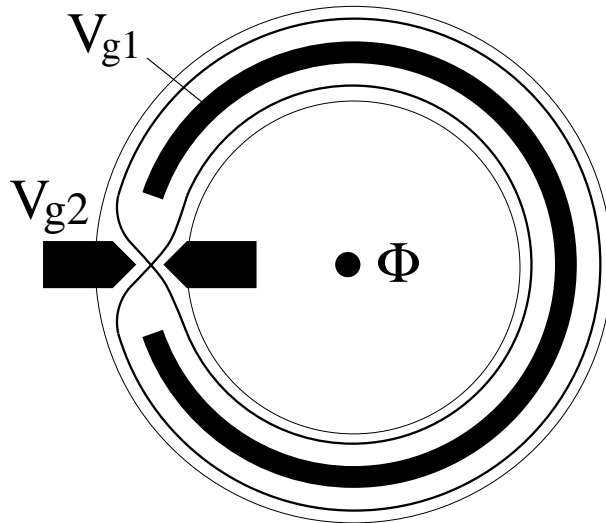


FIG. IV.30 – Schéma potentiel d'une réalisation d'une échelle de Möbius expérimentale à partir d'un large fil quantique. Le couplage entre les bords et le croisement sont réglés par des grilles $g1$ et $g2$ respectivement.

7.4 Perspective expérimentale

L'effet dont nous venons de parler étant relié à des grandeurs thermodynamiques, il devrait être mesurable expérimentalement assez facilement. Bien sûr, la géométrie très particulière de l'échelle de Möbius apparaît difficile à réaliser mais on peut proposer le montage suivant, schématisé sur la figure IV.30.

À suffisamment basse densité, les électrons dans un large fil quantique (hétérostructure GaAs) forment deux liquides de Luttinger sur les bords et le transfert entre ces bords par effet tunnel peut être modulé par une grille (g_1 sur la figure IV.30). Un pont contrôlé par g_2 où le transport est balistique permet l'échange des rôles des bords. Le courant permanent d'une telle structure peut être déterminé expérimentalement grâce à des mesures d'aimantation qui permettent d'accéder aux premières harmoniques I_n . Or, en négligeant les harmoniques d'ordres élevés (ce qui est toujours le cas expérimentalement), l'équation (IV.61) montre que I_1 est proportionnel à ΔE , Par conséquent, I_1 devrait être très sensible à t_\perp et au nombre de particules dans le régime cohérent tandis qu'il devrait s'annuler en l'absence d'effet tunnel cohérent entre les bords. Expérimentalement donc, les effets de taille finie prédits devraient pouvoir être mesurés dans de tels systèmes mésoscopiques. Ce sont de bons candidats pour tester l'effet des interactions sur les processus tunnels interchaînes.

8 Étude numérique du transport transverse

Le plus petit système dans lequel on peut étudier le transport perpendiculairement aux chaînes est composé de trois chaînes avec une géométrie de tore, c'est-à-dire des conditions aux limites fermées dans les deux directions avec éventuellement un flux Aharonov-Bohm dans chaque direction.

Comme nous nous intéressons à la conductivité qui est une propriété liée à la charge, nous travaillons avec des fermions sans spin en utilisant le même hamiltonien que précédemment (IV.37). Nous allons reprendre les références [189, 203] (publications n° 2 et 3).

8.1 Transport transverse

Nous allons considérer la conductivité optique transverse $\sigma_{yy}(\omega)$ qui est la réponse à un champ électrique uniforme appliqué perpendiculairement aux chaînes à la fréquence ω .

Nous nous concentrons sur la partie réelle de la conductivité. Celle-ci comporte deux contributions qui sont la réponse à fréquence nulle, dite cohérente ou pic de Drude, et la partie incohérente à fréquence finie

$$\sigma_{yy}(\omega) = 2\pi D_{yy} \delta(\omega) + \sigma_{yy}^{reg}(\omega) \quad (\text{IV.66})$$

dans laquelle D_{yy} est appelée la « rigidité de charge » alors que le poids de Drude vaut $2\pi D_{yy}$.

Nous avons déjà beaucoup discuté de cette quantité puisqu'elle permet d'accéder expérimentalement aux valeurs des paramètres du modèle et elle renseigne sur la

cohérence du transport. Le poids du pic de Drude en particulier sert de paramètre d'ordre pour la transition métal-isolant [120].

i) Règle de somme

Un avantage indéniable lorsque l'on travaille sur des données de conductivité est qu'il existe une règle de somme [204] qui a un intérêt à la fois dans la discussion des expériences mais aussi qui constitue un très bon test pour les méthodes numériques. En effet, le poids total de la conductivité est relié de manière simple à la valeur moyenne de l'énergie cinétique pour *tout* modèle à une seule bande et quelle que soit l'interaction :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\omega \sigma_{yy}(\omega) &= \frac{\pi e^2}{2N} \langle t_\perp \sum_{j,\beta} (c_{j,\beta+1}^\dagger c_{j,\beta} + \text{H.c.}) \rangle \\ &= -\frac{\pi e^2}{2N} T_{yy}, \end{aligned} \quad (\text{IV.67})$$

où l'expression entre crochets représente la valeur moyenne de l'opérateur de saut interchaîne dans l'état fondamental c'est-à-dire l'énergie cinétique transverse.

Dans nos simulations numériques faites avec l'algorithme de Lanczos, nous pouvons calculer indépendamment la conductivité en fréquence et l'énergie cinétique ce qui permet de vérifier cette règle de somme.

8.2 Étude du poids du pic de Drude transverse

Pour calculer la contribution à fréquence nulle, on peut utiliser une propriété remarquable notée par KOHN [120] qui stipule que le poids du pic de Drude peut se calculer également comme la réponse du système à l'application d'un flux extérieur :

$$2\pi D_{yy}(\Phi_y) = \frac{m^2}{4\pi} \frac{\partial^2 (E_0/N)}{\partial \Phi_y^2}, \quad (\text{IV.68})$$

pour un système de $N = m \times L$ sites. Cette formule est la généralisation à plusieurs chaînes de (III.7).

Ainsi, on peut calculer exactement ce poids de Drude pour des systèmes en interaction de taille finie $3 \times L$ avec $L = 4, 8$ et 12 . Bien entendu, on moyennera ces résultats par rapport au flux transverse afin de minimiser les effets de taille finie (il s'agit d'une des motivations pour introduire un flux que nous avons déjà discuté) :

$$\langle D_{yy} \rangle_{\Phi_y} = \int_{-1/2}^{1/2} d\Phi_y D_{yy}(\Phi_y). \quad (\text{IV.69})$$

Effectivement, en utilisant une seule valeur du flux (c'est-à-dire un seul type de conditions aux limites), on est beaucoup plus sensible aux effets de taille finie. Il suffit de regarder la variation typique de l'énergie du fondamental en fonction du flux (figure IV.31) pour se convaincre que la courbure, proportionnelle à D d'après (IV.68), varie sensiblement en fonction du flux.

De la même manière que nous avons dû traiter séparément les cas de couches fermées et ouvertes dans l'étude des propriétés spectrales, nous allons présenter successivement ces deux géométries.

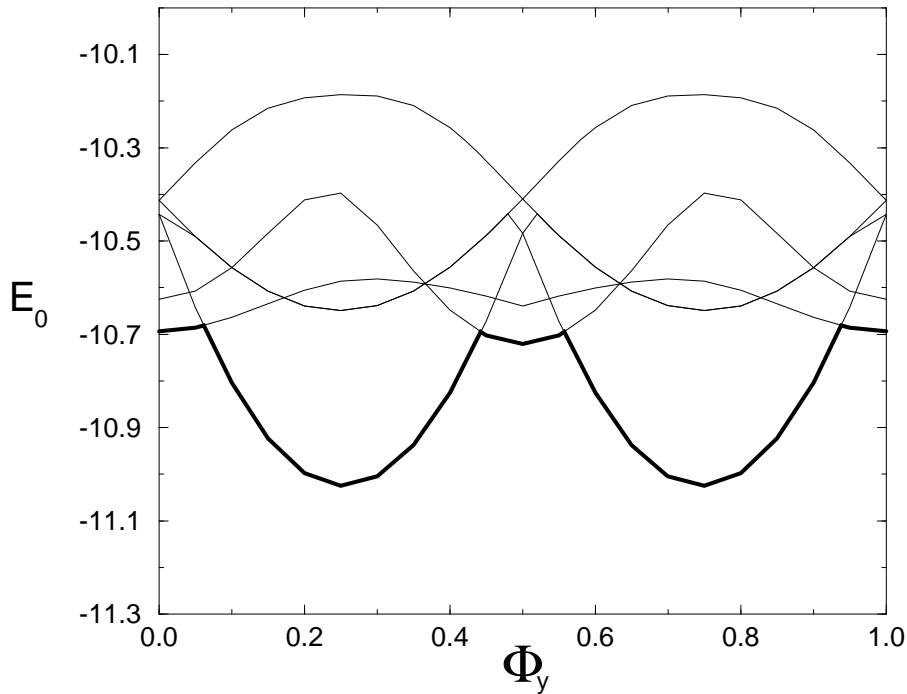


FIG. IV.31 – Énergie de l'état fondamental pour un système 3×8 avec une interaction $V = 2$ de portée $i_0 = 2$ et des conditions aux limites de couches fermées au quart-remplissage. On observe les croisements de niveaux des différents secteurs de symétrie et la courbe en gras désigne le fondamental absolu (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

i) Couches fermées

Sans interactions

Rappelons que dans le cas sans interactions, l'effet du terme de saut est de former trois branches séparées dans l'espace des impulsions par une énergie d'ordre t_{\perp} . Nous les avons schématisées sur la figure IV.32. En outre, pour des conditions périodiques ou antipériodiques ($\Phi = 0$ ou $\Phi = \pi$), deux d'entre elles vont être dégénérées.

Dans cette configuration et pour une taille finie, il va falloir une valeur minimale t_{\perp}^* de t_{\perp} afin de pouvoir transférer une particule d'une branche sur une autre sans dépense d'énergie ; et ce seuil va dépendre de la valeur du flux transverse Φ_y . La valeur minimale est $t_{\perp}^* = \sqrt{2/3} \sin(\pi/L)$. En deçà de cette valeur, aucun transport à fréquence nulle ne peut se produire et le poids de Drude est donc rigoureusement nul.

Avec interactions

Le fait de brancher les interactions ne va pas modifier l'image précédente et on s'attend donc à avoir une valeur de seuil t_{\perp}^* pour observer du transport cohérent. C'est effectivement ce que nous observons sur la figure IV.33 où il existe une brusque transition du poids de Drude qui passe d'une valeur quasi nulle à une valeur finie. Bien sûr, cet effet est purement de taille finie et il faut faire attention dans l'extrapolation

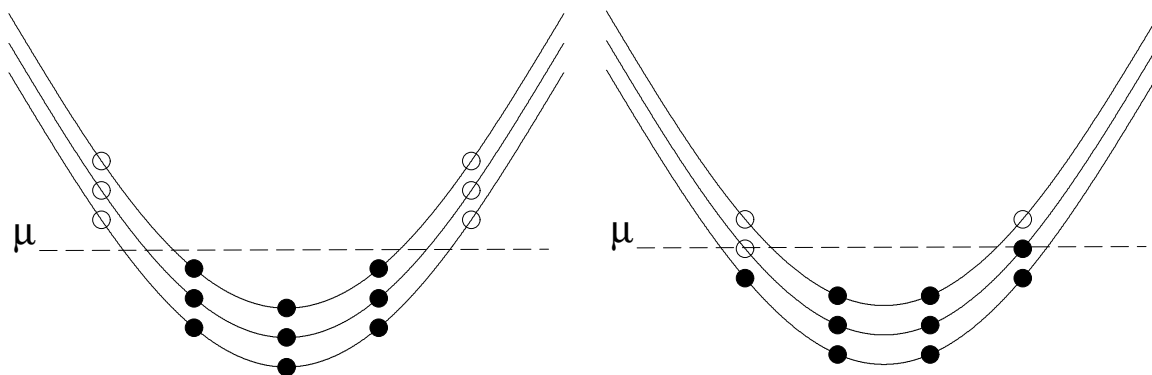


FIG. IV.32 – Schémas du remplissage des bandes du fondamental pour un système 3×12 sans interactions et quart-rempli. On applique un flux Φ_y transverse et, dans la direction des chaînes, on utilise des conditions aux limites qui permettent d'avoir une configuration dite de couches fermées (à gauche) ou bien ouvertes (à droite). μ désigne le potentiel chimique. Figure extraite de la référence [189], publication n° 2.

des résultats.

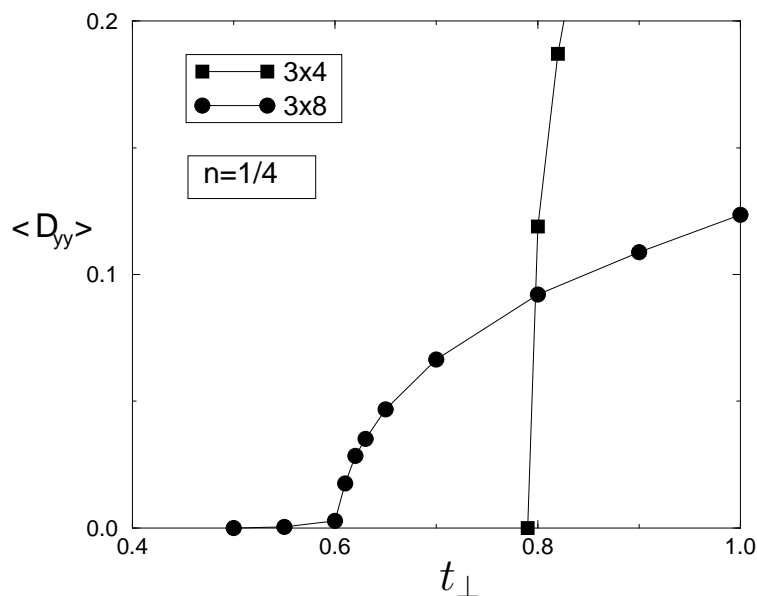


FIG. IV.33 – Poids de Drude en unités arbitraires en fonction de t_{\perp} pour le cas d'une interaction $V = 2$ de portée $i_0 = 3$ sur les réseaux 3×4 et 3×8 . Une moyenne sur Φ_y a été faite.

Deux scénarios peuvent se produire lorsqu'on augmente la taille du système. Premièrement, il peut exister une valeur $t_{\perp}^*(\infty)$ finie ce qui signifierait l'absence de transport transverse pour des valeurs de t_{\perp} suffisamment petites. Deuxièmement, la valeur critique peut s'extrapoler à 0 auquel cas, on s'attend à ce que la physique soit qualitativement la même que dans le cas des fermions libres.

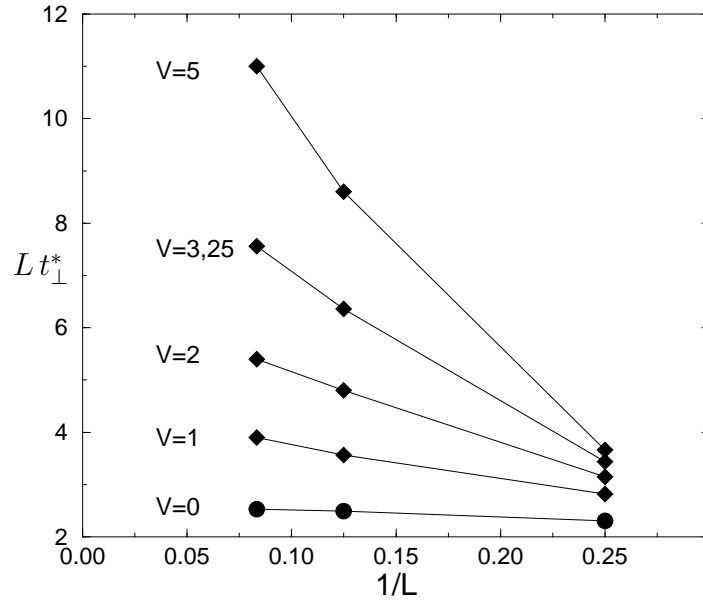


FIG. IV.34 – $Lt_{\perp}^*(L)$ en fonction de $1/L$ en l'absence d'interactions (●) et pour des interactions de portée $i_0 = 2$ et d'amplitudes $V = 1, 2, 3, 25$ et 5 (◆) (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

En d'autres termes et en s'appuyant sur la signification de t_{\perp}^* en l'absence d'interaction, cette quantité doit être reliée à la séparation des bandes étudiée précédemment. Nous allons montrer que c'est effectivement le cas.

Supposons que $t_{\perp}^*(L)$ satisfasse la relation suivante :

$$\max_{\Phi_y}(\Delta E(t_{\perp}^*, \Phi_y)) \sim \frac{2\pi}{L} u_{\rho}, \quad (\text{IV.70})$$

où u_{ρ} désigne une vitesse de charge. Dans ces conditions, t_{\perp}^* doit se comporter de la manière suivante : $t_{\perp}^*(L) = A/L + B/L^2$. Ce sont effectivement les effets de taille finie qui sont observés sur la figure IV.34 pour des interactions faibles et qui permettent d'extrapoler une valeur finie de A . Par contre, pour des interactions plus fortes, il semble que Lt_{\perp}^* diverge, ce qui indique une valeur finie de $t_{\perp}^*(\infty)$ et, dans ce cas, un comportement incohérent peut avoir lieu. D'après l'équation (IV.70), si $\Delta E(t_{\perp}^*, \Phi_y)$ se comporte linéairement avec t_{\perp} lorsque celui-ci est petit, alors $1/A$ doit être directement proportionnel à cette quantité. Afin de vérifier ce point, nous normalisons A par rapport au cas sans interaction pour lequel $A_0 = \sqrt{2/3}\pi$ au quart-remplissage. Nous traçons alors le rapport A_0/A en fonction de α (figure IV.35) que nous comparons à la séparation des bandes ΔE calculée précédemment.

La première constatation est que, aux erreurs d'extrapolation près (indiquées grâce aux barres d'erreur), le comportement de t_{\perp}^* ne dépend une fois encore que de α . Il s'agit bien du seul paramètre pertinent dans ces études. Deuxièmement, les quantités $1/A$ et ΔE ne correspondent pas exactement. L'origine de cette différence peut être attribuée à plusieurs facteurs : (i) l'image que nous proposons est qualitative, (ii) la

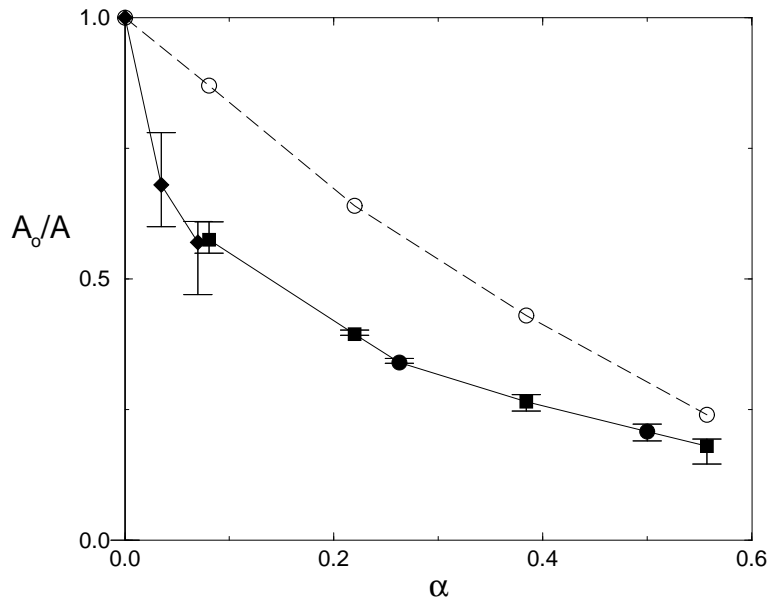


FIG. IV.35 – Valeurs extrapolées de A_0/A (voir texte) en fonction de α pour différentes portées d'interactions $i_0 = 1$ (\blacklozenge), $i_0 = 2$ (\blacksquare) et $i_0 = 3$ (\bullet). Par comparaison, les valeurs extrapolées de ΔE de la figure IV.18 sont reproduites (cercles). Figure extraite de la référence [189], publication n° 2.

vitesse de charge introduite dans l'équation (IV.70) dépend fortement de α , (iii) et surtout, nous avons vu que ΔE dépendait des conditions aux limites choisies et il semble que les valeurs obtenues dans le cas des couches ouvertes soient meilleures (figure IV.20). De surcroît, les extrapolations faites ci-dessus supposent que t_{\perp}^* a une valeur thermodynamique nulle, c'est-à-dire que le comportement est cohérent; or, il est possible que cette limite de t_{\perp}^* soit faible mais finie, ce qui serait en très bon accord avec les résultats obtenus pour la séparation des bandes dans le cas de couches ouvertes.

En conclusion de cette étude, il semble que la valeur finie $t_{\perp}^*(L)$ soit un artefact dû au type de conditions aux limites et, dans la limite thermodynamique, le poids du pic de Drude transverse est fini. Cette conclusion est étayée par nos analyses de taille finie pour des interactions faibles, mais des questions demeurent posées pour des interactions plus fortes. En effet, nous observons le même type de comportement que pour la séparation des bandes, ce qui suggère la possibilité d'une valeur seuil de t_{\perp} en deçà de laquelle le transport soit purement incohérent. Aussi, nous modifions les conditions aux bords de notre système pour obtenir une meilleure compréhension de ce cas.

ii) Couches ouvertes

En choisissant astucieusement les conditions aux limites, on peut se placer dans des configurations électroniques ayant des couches ouvertes (voir la figure IV.32). Dans ce cas, le poids de Drude ainsi que l'énergie cinétique transverse restent finis quelle que soit la valeur de l'intégrale de saut transverse.

Pour simplifier, nous choisissons le flux transverse Φ_y de telle sorte à avoir l'énergie du fondamental la plus basse possible (cette valeur du flux est quasiment indépendante de la force de l'interaction et de la taille). On peut alors calculer la courbure de l'énergie en ce point et la relier au poids de Drude par la formule (IV.68) et nous montrons les résultats obtenus sur la figure IV.36.

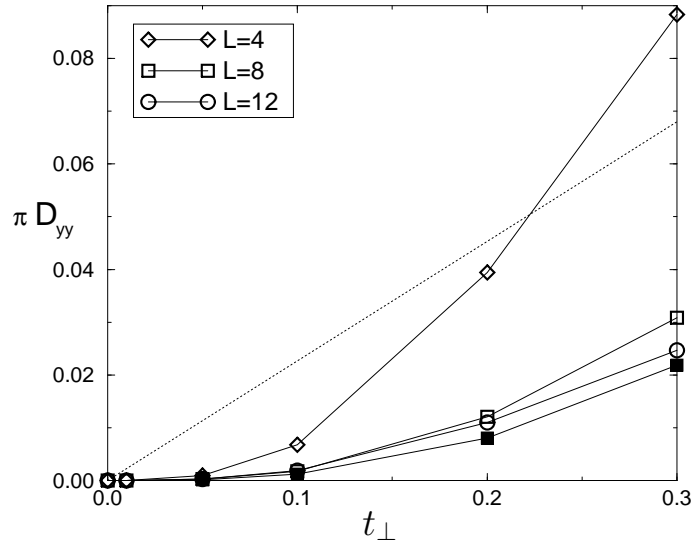


FIG. IV.36 – Poids de Drude transverse en fonction de t_{\perp} pour le cas d'un flux Φ_y fixé et d'une interaction $V = 2$ de portée $i_0 = 3$ sur les réseaux 3×4 , 3×8 et 3×12 de haut en bas (symboles ouverts). À titre de comparaison, la même quantité moyennée par rapport au flux transverse pour le réseau 3×8 est montrée (carrés pleins) et le cas sans interactions est représenté par la ligne en pointillés (figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

Sur cette figure, on vérifie une fois encore que le fait de moyennner par rapport au flux transverse permet de réduire les effets de taille finie puisque le résultat obtenu sur le réseau 3×8 moyenné par rapport aux conditions aux limites est meilleur que le résultat obtenu pour 3×12 sans moyennner. Dans la suite, on notera cette opération par le symbole $\langle \dots \rangle_{\Phi_y}$.

8.3 Règle de somme

Soit $I_{yy} = \langle \int_0^{\infty} \sigma_{yy}(\omega) d\omega \rangle_{\Phi_y}$ le poids total de la conductivité intégrée sur les fréquences. Nous allons nous intéresser à la fraction du poids spectral qui est contenue dans le pic de Drude en utilisant la règle de somme (IV.67) :

$$r = \frac{\pi \langle D_{yy} \rangle_{\Phi_y}}{I_{yy}} = \frac{m^2}{4\pi^2} \left\langle \frac{\partial^2 E_0}{\partial \Phi_y^2} \right\rangle_{\Phi_y} / \langle -T_{yy} \rangle_{\Phi_y}. \quad (\text{IV.71})$$

L'algorithme de Lanczos nous permet de calculer séparément le numérateur et le dénominateur de cette fraction. D'après la figure IV.37, ces deux quantités semblent

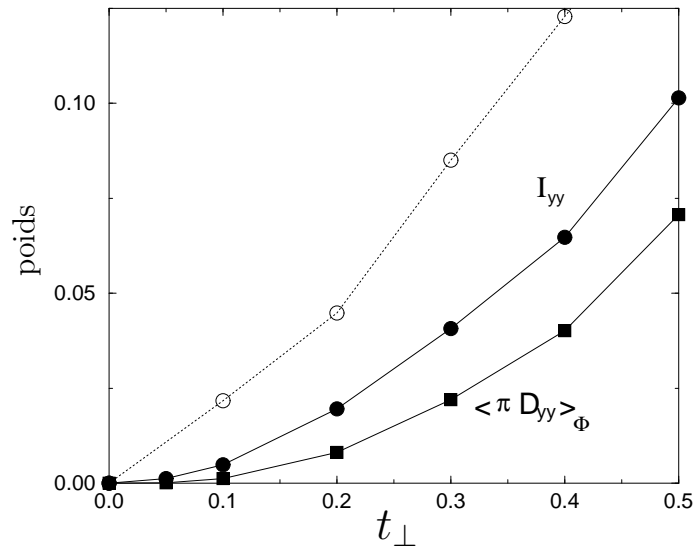


FIG. IV.37 – Poids de Drude et poids total en fonction de t_{\perp} pour le cas d'une interaction $V = 2$ de portée $i_0 = 3$ sur le réseau 3×8 . À titre de comparaison, le cas sans interactions est montré en ligne pointillée. (Figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

avoir le même comportement en fonction de t_{\perp} qui est peut-être quadratique comme dans le cas sans interactions. Mais en regardant plus en détail et en étudiant le rapport r défini ci-dessus, on constate que ce ne sont pas les mêmes lois de puissance puisque, pour les petites valeurs de t_{\perp} , le rapport r tend vers 0 comme cela est montré sur la figure IV.38.

On obtient un résultat qui est en désaccord complet avec l'image sans interactions et qui montre que pour de fortes interactions et des intégrales de saut suffisamment petites (rappelons que dans les composés organiques t_{\perp} n'exède pas 10% de t_{\parallel}), l'essentiel du poids spectral est transféré à fréquence finie et la partie dite cohérente ne contient que quelques pour cent du poids total. D'un point de vue expérimental, un tel système aurait des propriétés de transport transverses anormales proches de celles qui sont observées même si le pic de Drude n'a pas complètement disparu. Ainsi, il existe des cas où le transport transverse n'est pas à proprement parler incohérent mais il se comporte tout comme puisque la partie cohérente peut être négligeable. Afin de confirmer ce scénario, nous pouvons étudier la dépendance en fréquence de la conductivité optique.

8.4 Étude de la conductivité en fréquence

La théorie de la réponse linéaire permet d'exprimer la conductivité en fonction de l'opérateur courant par l'intermédiaire de la formule de Kubo (II.36). En insérant les

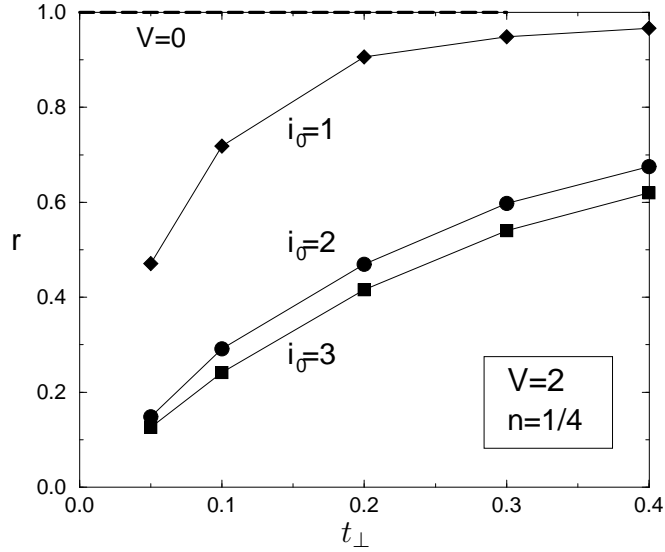


FIG. IV.38 – Rapport entre le poids de Drude et le poids total en fonction de t_{\perp} pour une interaction $V = 2$ de portée variable i_{σ} . Le cas sans interaction est en pointillé. (Figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

vecteurs de base $|\phi_n\rangle$, on peut réécrire cette formule sous la forme :

$$\Re \sigma_{yy}(\omega) = 2\pi D_{yy} \delta(\omega) + \frac{\pi}{N} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle \phi_0 | \hat{j}_y | \phi_n \rangle|^2}{E_n - E_0} \delta(\omega - (E_n - E_0)), \quad (\text{IV.72})$$

dans laquelle \hat{j}_y désigne l'opérateur de courant transverse et la somme est sur tous les états excités.

À partir de cette forme de Lehmann et en utilisant un développement en fractions continues (III.5), nous pouvons calculer cette grandeur dynamique pour des systèmes de taille finie.

Tout d'abord, il est nécessaire de calculer le vecteur fondamental du système en interactions ; puis, on lui applique l'opérateur courant et enfin, à partir de ce nouvel état, on procède à un nouvel algorithme de Lanczos pour construire la fraction continue. En l'absence d'interactions, l'opérateur courant commute avec le hamiltonien et par conséquent, on obtient uniquement un pic de Drude. Par contre, pour des interactions finis, une structure apparaît à fréquence finie comme le montre la figure IV.39.

Afin de déterminer précisément la position du poids à fréquence finie, on peut calculer le premier moment de la distribution puisque l'on sait que les résultats donnés par l'algorithme de Lanczos sont très fiables pour les premiers moments et, en outre, on peut supposer que les moments évoluent continûment avec les paramètres tant qu'il n'y a pas de transition. On définit donc l'échelle caractéristique

$$\langle \omega \rangle = \int_{0+}^{\infty} \sigma_{yy}^{\text{reg}}(\omega) \omega d\omega / \int_{0+}^{\infty} \sigma_{yy}^{\text{reg}}(\omega) d\omega. \quad (\text{IV.73})$$

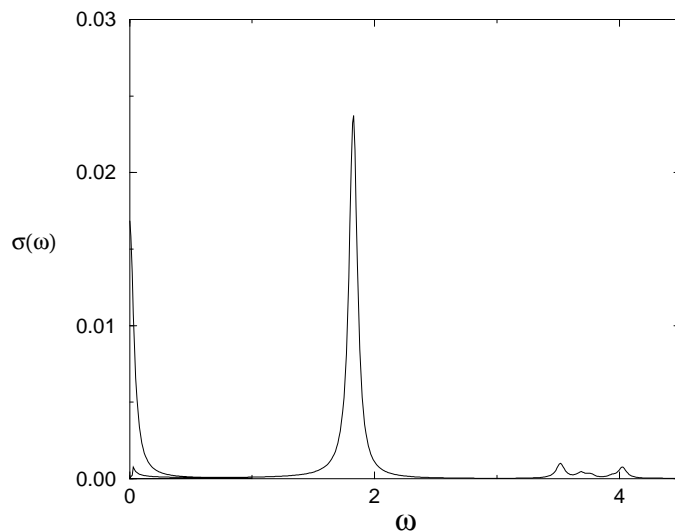


FIG. IV.39 – Conductivité optique transverse pour un système 3×8 quart-rempli avec une interaction $V = 2$ de portée $i_0 = 3$ et un terme de saut $t_{\perp} = 0,1$. Une largeur artificielle $\varepsilon = 0,04$ a été ajoutée aux pics delta. (Figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

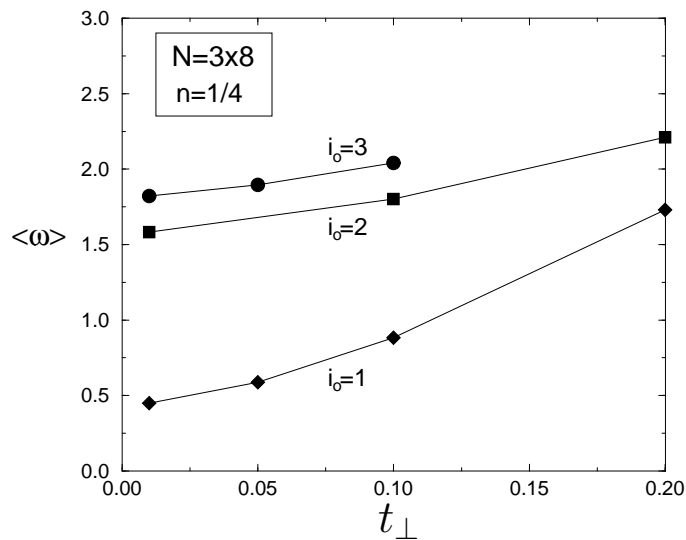


FIG. IV.40 – Premier moment de la conductivité optique transverse (IV.73) pour un système 3×8 quart-rempli, avec une interaction $V = 2$ de portée variable i_0 indiquée sur la figure, en fonction de t_{\perp} . (Figure extraite de la référence [189], publication n° 2).

Effectivement, ce premier moment possède une limite finie quand t_{\perp} tend vers 0 (figure IV.40). La signification physique de ce résultat est simple : dès que le couplage interchaîne est présent, il se produit un transfert de poids spectral essentiellement vers des fréquences finies de l'ordre de l'interaction (ou de la largeur de bande) qui représentent des transitions interbandes. Cette fréquence augmente soit avec la portée

soit avec l'amplitude des interactions.

8.5 Conclusion sur le transport

Dans les parties précédentes, nous avons discuté des différents régimes qui existent selon les valeurs de l'intégrale de saut t_{\perp} et surtout, des interactions, caractérisées par l'exposant α du liquide de Luttinger. Or, dans l'étude du transport transverse, il ressort que le comportement observé est le même qualitativement pour tous les modèles étudiés. Les caractéristiques générales de la conductivité sont les suivantes. Premièrement, le poids du pic de Drude ainsi que le poids spectral total augmentent moins rapidement que dans le cas sans interactions mais une étude précise de ces comportements reste à faire. Deuxièmement, bien que le poids de Drude reste fini lorsque t_{\perp} est pertinent, le transport est essentiellement incohérent pour t_{\perp} « petit », c'est-à-dire que le poids spectral est majoritairement à fréquence finie alors que le pic de Drude ne contient qu'une fraction négligeable de ce poids.

Par contre, la valeur de t_{\perp} qui est nécessaire pour être dans ce régime faiblement cohérent dépend directement de la force des interactions. Citons comme exemple que le poids de Drude n'excède pas 10% du poids total dans le cas, physiquement réaliste, d'une anisotropie $t_{\perp}/t = 0,1$ et d'une interaction caractérisée par $\alpha = 0,2$. Ce phénomène pourrait expliquer le transport anormal observé expérimentalement.

Conclusion

Dans la compréhension des effets de corrélations dans des modèles de conducteurs quasi unidimensionnels, les concepts de lois d'échelle apparaissent essentiels. Cela permet d'expliquer les échelles d'énergies, éventuellement renormalisées par les interactions, qui sont caractéristiques des changements de régimes observés dans les diagrammes de phase de ces modèles.

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à l'influence d'un couplage interchaîne sur les propriétés du liquide de Luttinger, qui est le comportement générique d'un système métallique unidimensionnel. Les effets des processus de saut à une particule ainsi que par paires, qui sont prédits par le groupe de renormalisation pour un grand nombre de chaînes couplées, avec des exposants non triviaux, ont été mis en évidence numériquement de manière quantitative pour des modèles microscopiques réalistes de deux chaînes seulement.

À suffisamment basse température, ces instabilités vont donner lieu soit à des phases avec symétrie brisée, soit à un liquide de Fermi, mais la théorie d'échelle de cette transition prévoit que ce changement se fait continûment et peut se représenter par une fonction d'échelle. C'est effectivement ce que nous observons avec notre modèle. En particulier, l'effet des corrélations fortes est majeur puisqu'il renormalise fortement cette température caractéristique du changement de régime.

Nous avons analysé également la cohérence du saut interchaîne puisqu'il a été proposé que, pour des interactions suffisamment fortes et bien que le couplage interchaîne soit pertinent, le transport transverse puisse être complètement incohérent. Dans un premier temps, nous avons vérifié que ce couplage conduit à une dispersion transverse, et donc une dynamique cohérente dans toutes les directions quelle que soit la valeur de l'interaction. En particulier, les degrés de liberté de spin, supposés favoriser cette tendance à l'incohérence du fait de la séparation spin-charge qui existe en une dimension, ont très peu d'influence sur la mise en place de cette dynamique interchaîne cohérente. Rappelons tout de même que l'effet des interactions est crucial puisque la séparation des bandes est fortement réduite.

Nous avons étudié le cas d'une échelle de Möbius pour laquelle la cohérence interchaîne se traduit directement sur la périodicité de l'énergie vis-à-vis d'un flux. Or, il apparaît que le comportement est qualitativement le même tant que le couplage interchaîne est pertinent. Cependant, là encore, les interactions changent quantitativement les comportements.

Enfin, le transport transverse complète cette image. En effet, le couplage interchaîne est toujours présent, sauf éventuellement pour des interactions très fortes, puisqu'il existe un pic de Drude à fréquence nulle dans la conductivité transverse, synonyme

d'un transport cohérent dans cette direction. Par contre, d'un point de vue pratique et en utilisant des paramètres réalistes, cette conductivité se comporte comme si elle était incohérente puisque la majeure partie du poids spectral se trouve à fréquence finie.

En résumé, disons que l'analyse numérique de modèles microscopiques a permis de renforcer les idées du groupe de renormalisation en montrant comment elles s'appliquent dans le cas d'un faible nombre de chaînes couplées. Il apparaît par conséquent que le couplage interchaîne est une variable pertinente dans l'étude de ces modèles. Par contre, l'effet des interactions peut être suffisant pour aboutir à une situation très proche de celle d'un régime incohérent.

En ce qui concerne la situation expérimentale des sels de Bechgaard résumée dans le premier chapitre, il persiste une difficulté dans l'interprétation des données. En effet, un consensus semble exister autour du fait que les corrélations dans ces matériaux sont importantes ; de ce fait, l'échelle de température de transition dimensionnelle devrait être considérablement réduite. C'est ce qui est observé par des mesures RMN, mais il persiste également des anomalies à des températures de l'ordre du couplage non renormalisé. Il est possible qu'afin d'obtenir un accord quantitatif, on doive prendre en compte les processus de paires qui sont dominants dans ces régimes d'interactions fortes, ainsi que les effets du spin qui, dans ce cas, ont un effet inverse de celui des interactions dans la renormalisation du couplage interchaîne.

Publications

D. Poilblanc, H. Endres, F. Mila, M. Zacher, S. Capponi et W. Hanke
“One particle interchain hopping in coupled Luttinger liquids”
Phys. Rev. B **54**, 10 261 (1996).

S. Capponi, D. Poilblanc et F. Mila
“Confinement and transverse conductivity in coupled Luttinger liquids”
Phys. Rev. B **54**, 17 547 (1996).

S. Capponi et D. Poilblanc
“Transverse transport in coupled Luttinger liquids”
Z. Phys. B **103**, 173 (1997).

F. Mila, C. Stafford et S. Capponi
“Persistent currents in a Möbius ladder: a test of interchain coherence of interacting electrons”, Phys. Rev. B **57**, 1457 (1998).

S. Capponi, D. Poilblanc et E. Arrigoni
“Universal scaling behavior of coupled chains of interacting fermions”
Phys. Rev. B **57**, 6360 (1998).

S. Capponi et D. Poilblanc
“Truncated Lanczos algorithm”, en préparation.

Sujets annexes:

S. Capponi, N. Guihéry, J.P. Malrieu, B. Miguel et D. Poilblanc
“Bond alternation of polyacetylene as a spin-Peierls distortion”
Chem. Phys. Letter **255**, 238 (1996).

A. W. Sandvik, S. Capponi, D. Poilblanc et E. Dagotto
“Numerical calculations of the B_{1g} Raman spectrum of the 2D Heisenberg model”
Phys. Rev. B **57**, 8478 (1998).

E. Dagotto, S. Yunoki, A. L. Malvezzi, A. Moreo, J. Hu,
S. Capponi, D. Poilblanc et N. Furukawa
“Ferromagnetic Kondo model for manganites :
Phase diagram, charge segregation, and influence of quantum localized spins”
Phys. Rev. B **58**, 6414 (1998).

Bibliographie

- [1] L. D. Landau. "The theory of a Fermi liquid." *Sov. Phys. JETP* **3** 920 (1957).
- [2] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Plenum (1981).
- [3] N. D. Mermin et H. Wagner. *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133 (1966).
- [4] W. A. Little. *Phys. Rev.* **134A** 1416 (1964).
- [5] R. E. Peierls. *Ann. Phys. Leipzig* **4** 121 (1930).
- [6] J. P. Pouget, S. K. Khanna, F. Denoyer, R. Comès, A. F. Garito et A. J. Heeger. *Phys. Rev. Lett.* **37** 437 (1976).
- [7] D. Jérôme et H. J. Schulz. "Organic conductors and superconductors." *Adv. Phys.* **31** 299 (1982).
- [8] F. Zwick, D. Jérôme, G. Margaritondo, M. Onellion, J. Voit et M. Grioni. "Band mapping and quasiparticle suppression in the one-dimensional organic conductor TTF-TCNQ." *Phys. Rev. Lett.* **81** 2974 (1998).
- [9] K. Bechgaard, C. S. Jacobsen, K. Mortensen, J. H. Pederson et N. Thorup. *Solid State Commun.* **33** 1119 (1980).
- [10] C. Bourbonnais et D. Jérôme. "The normal phase of quasi-one-dimensional organic superconductors." *Proceedings Synthetic Metals* (1999). prépublication cond-mat/9903101 (1999).
- [11] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault et K. Bechgaard. "Supraconductivity in a synthetic organic conductor $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$." *J. Phys. Lett., Paris* **41** L95 (1980).
- [12] T. Ishiguro, K. Yamaji et G. Saito. *Organic superconductors - Second edition*. Springer Verlag (1998).
- [13] H. J. Schulz. "Fermi liquids and non-Fermi liquids." *Int. J. Mod. Phys. B* **5** 57 (1991).
- [14] T. Giamarchi. "Mott transition in one dimension." *Physica B* **230-232** 975 (1999).
- [15] J. P. Pouget, R. Moret et R. Comes. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **79** 129 (1982).
- [16] M. Tsuchiizu, Y. Suzumura et T. Giamarchi. "Renormalized inter-chain hopping vs charge gap in two coupled chains." *Prog. Theor. Phys.* **101** 763 (1999).
- [17] D. Jérôme. "Low dimensional organic conductors: what is unconventional in transport and magnetic properties." Dans *Proceedings of the XXXIst Rencontres de Moriond* (T. Martin, G. Montambaux et J. Trân Thanh Vân, édés.). Frontiers (1996).
- [18] D. Pines et P. Nozières. *The Theory of Quantum Liquids: Normal Fermi Liquids*. Benjamin (1966).

- [19] P. Garoche, R. Brusetti et K. Bechgaard. “Influence of the cooling rate on the superconducting properties of the organic solid $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$.” *Phys. Rev. Lett.* **49** 1346 (1982).
- [20] K. G. Wilson. “The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem.” *Rev. Mod. Phys.* **47** 773 (1975).
- [21] T. Moriya. *Progr. Theor. Phys.* **16** 2 (1956).
- [22] C. Bourbonnais, P. Wzietek, F. Creuzet, D. Jérôme, P. Batail et K. Bechgaard. “Scaling relation between nuclear relaxation and magnetic susceptibility in organic conductors: evidence for 1D paramagnon effects.” *Phys. Rev. Lett.* **62** 1532 (1989).
- [23] B. Dardel, D. Malterre, M. Grioni, P. Weibel, Y. Baer, J. Voit et D. Jérôme. “Possible observation of a Luttinger-liquid behaviour from photoemission spectroscopy of one-dimensional organic conductors.” *Europhys. Lett.* **24** 687 (1993).
- [24] K. Behnia, L. Balicas, W. Kang, S. Jérôme, P. Carretta, Y. Fagot-Revurat, C. Berthier, M. Horvatić, P. Ségransan, L. Hubert et C. Bourbonnais. “Confinement in Bechgaard salts: Anomalous magnetoresistance and nuclear relaxation.” *Phys. Rev. Lett.* **74** 5272 (1995).
- [25] J. Voit. “Charge-spin separation and the spectral properties of Luttinger liquids.” *Phys. Rev. B* **47** 6740 (1993).
- [26] V. Meden et K. Schönhammer. “Spectral functions for the Tomonaga-Luttinger model.” *Phys. Rev. B* **46** 15 753 (1992).
- [27] F. Zwick, S. Brown, G. Margaritondo, C. Merlion, M. Onellion, J. Voit et M. Grioni. “Absence of quasiparticles in the photoemission spectra of quasi-one-dimensional Bechgaard salts.” *Phys. Rev. Lett.* **79** 3982 (1997).
- [28] J. Voit et H. J. Schulz. “Electron-phonon interaction and phonon dynamics in one-dimensional conductors.” *Phys. Rev. B* **37** 10 068 (1988).
- [29] T. Giamarchi. “Umklapp process and resistivity in one-dimensional fermion systems.” *Phys. Rev. B* **44** 2905 (1991).
- [30] J. Moser, M. Gabay, P. Auban-Senzier, D. Jérôme, K. Bechgaard et J. M. Fabre. “Transverse transport in $(\text{TM})_2\text{X}$ organic conductors: possible evidence for a Luttinger liquid.” *Eur. Phys. J. B* **1** 39 (1998).
- [31] D. G. Clarke, S. P. Strong et P. W. Anderson. “Conductivity between Luttinger Liquids in the Confinement Regime and c-axis Conductivity in the Cuprate Superconductors.” *Phys. Rev. Lett.* **74** 4499 (1995).
- [32] P. W. Anderson, T. V. Ramakrishnan, S. Strong et D. G. Clarke. “Coherence and localization in 2D Luttinger liquids.” *Phys. Rev. Lett.* **77** 4241 (1996).
- [33] C. Bourbonnais et L. G. Caron. “Renormalization group approach to quasi-one-dimensional conductors.” *Int. J. Mod. Phys. B* **5** 11 033 (1991).
- [34] D. Boies, C. Bourbonnais et A.-M. Tremblay. “One-Particle and Two-Particle Instability of Coupled Luttinger Liquids.” *Phys. Rev. Lett.* **74** 968 (1995).
- [35] A. Schwartz, M. Dressel, G. Grüner, V. Vescoli et L. Degiorgi. “On-chain electrodynamics of metallic $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ salts: Observation of Tomonaga-Luttinger liquid response.” *Phys. Rev. B* **58** 1261 (1998).

- [36] M. Dressel, A. Schwartz, G. Grüner et L. Degiorgi. “Deviations from Drude response in low-dimensional metals: Electrodynamics of the metallic state of $(\text{TMTTF})_2\text{PF}_6$.” *Phys. Rev. Lett.* **77** 398 (1996).
- [37] J. Favand. *Propriétés dynamiques de fermions fortement corrélés unidimensionnels sur réseau: fonctions spectrales, conductivité optique et courant tunnel*. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse III (1998).
- [38] C. S. Jacobsen, D. B. Tanner et K. Bechgaard. “Dimensionality crossover in the organic superconductor $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$.” *Phys. Rev. Lett.* **46** 1142 (1981).
- [39] Y. Suzumura, M. Tsuchiizu et G. Grüner. “Confinement of interchain hopping by umklapp scattering in two coupled chains.” *Phys. Rev. B* **57** R15040 (1998).
- [40] V. Vescoli, L. Degiorgi, W. Henderson, G. Grüner, K. P. Starkey et L. K. Montgomery. “Dimensionality-driven insulator-to-metal transition in the Bechgaard salts.” *Science* **281** 1181 (1998).
- [41] L. P. Gorkov et A. G. Lebed. *J. Phys. Lett.* **45** L433 (1984).
- [42] D. Poilblanc. *Théorie des phases Onde de Densité de Spin induites par le champ magnétique dans des conducteurs très anisotropes*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud, Orsay (1988).
- [43] A. G. Lebed. “Anisotropy of an instability for a spin density wave induced by a magnetic field in a $Q1D$ conductor.” *JETP Lett.* **43** 174 (1986).
- [44] A. G. Lebed et P. Bak. “Theory of unusual anisotropy of magnetoresistance in organic superconductors.” *Phys. Rev. Lett.* **63** 1315 (1989).
- [45] W. Kang, S. T. Hannahs et P. M. Chaikin. “Lebed’s magic angle effects in $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$.” *Phys. Rev. Lett.* **69** 2827 (1992).
- [46] P. M. Chaikin. ““Hot spots”, magic angles, and magnetoresistance in quasi-1D-metals.” *Phys. Rev. Lett.* **69** 2831 (1992).
- [47] S. P. Strong, D. G. Clarke et P. W. Anderson. “Magnetic Field Induced Confinement in Strongly Correlated Anisotropic Materials.” *Phys. Rev. Lett.* **73** 1007 (1994).
- [48] G. M. Danner et P. M. Chaikin. “Non-Fermi-liquid behavior in transport in $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$.” *Phys. Rev. Lett.* **75** 4690 (1995).
- [49] R. H. McKenzie et P. Moses. “Incoherent interlayer transport and angular-dependent magnetoresistance oscillations in layered metals.” *Phys. Rev. Lett.* **81** 4492 (1998).
- [50] G. M. Danner, W. Kang et P. M. Chaikin. “Measuring the Fermi surface of quasi-one-dimensional metals.” *Phys. Rev. Lett.* **72** 3714 (1994).
- [51] P. Moses et R. H. McKenzie. “Comparison of coherent and weakly incoherent transport models for the interlayer magnetoresistance of layered Fermi liquids.” *Phys. Rev. B* **60** 7988 (1999).
- [52] T. Osada, S. Kagoshima et N. Miura. “Third angular effect of magnetoresistance in quasi-one-dimensional conductors.” *Phys. Rev. Lett.* **77** 5261 (1996).
- [53] B. Dardel, D. Malterre, M. Grioni, P. Weibel, Y. Baer et F. Lévy. “Unusual photoemission spectral function of quasi-one-dimensional metals.” *Phys. Rev. Lett.* **67** 3144 (1991).

- [54] M. Nakamura, A. Sekiyama, H. Namatame, A. Fujimori, H. Yoshihara, T. Ohtani, A. Misu et M. Takano. “Metal-semiconductor transition and Luttinger-like behavior in quasi-one-dimensional BaVS₃ studied by photoemission spectroscopy.” *Phys. Rev. B* **56** R1645 (1997).
- [55] M. A. Kastner. “The single-electron transistor.” *Rev. Mod. Phys.* **64** 849 (1992).
- [56] E. Orignac. *Effets de désordre dans les échelles*. Thèse de doctorat, Université Paris-Sud, Orsay (1998).
- [57] H. Maurey et T. Giamarchi. “Transport properties of a quantum wire in the presence of impurities and long-range Coulomb forces.” *Phys. Rev. B* **51** 10 833 (1995).
- [58] T. W. Ebbesen. “Carbon nanotubes.” *Physics Today* **49** 26 (1996).
- [59] S. J. Tans, M. H. Devoret, H. Dai, A. Thess, R. E. Smalley, R. E. Georliga et C. Dekker. “Individual single-wall carbon nanotubes as quantum wires.” *Nature* **386** 474 (1997).
- [60] R. Egger et A. O. Gogolin. “Effective low-energy theory for correlated carbon nanotubes.” *Phys. Rev. Lett.* **79** 5082 (1997).
- [61] C. Kane, L. Balents et M. P. A. Fisher. “Coulomb interactions and mesoscopic effects in carbon nanotubes.” *Phys. Rev. Lett.* **79** 5086 (1997).
- [62] X.-G. Wen. “Chiral Luttinger liquid and the edge excitations in the fractional quantum Hall states.” *Phys. Rev. B* **41** 12 838 (1990).
- [63] F. P. Milliken, C. P. Umbach et R. A. Webb. *Solid State Commun.* **97** 309 (1996).
- [64] K. Moon et S. M. Girvin. “Effect of interedge Coulomb interactions on the transport between quantum Hall edge states.” *Phys. Rev. B* **54** 4448 (1996).
- [65] K. Moon, H. Yi, C. L. Kane, S. M. Girvin et M. P. A. Fisher. “Resonant tunneling between quantum Hall edge states.” *Phys. Rev. Lett.* **71** 4381 (1993).
- [66] C. L. Kane et M. P. A. Fisher. “Transport in a one-channel Luttinger liquid.” *Phys. Rev. Lett.* **68** 1220 (1992).
- [67] J. G. Bednorz et K. A. Müller. *Z. Physik B* **64** 189 (1986).
- [68] Y. Nakamura et S. Uchida. “Anisotropic transport properties of single-crystal La_{2-x}Sr_xCuO₄: Evidence for the dimensional crossover.” *Phys. Rev. B* **47** 8369 (1993).
- [69] N. P. Ong. *Physica C* **221** 235 (1994).
- [70] S. L. Cooper, P. Nyhus, D. Reznik, M. V. Klein, W. C. Lee, D. M. Ginsberg, B. M. Veal, A. P. Paulikas et B. Dabrowski. “Interbilayer charge dynamics in YBa₂Cu₃O_{6+x}.” *Phys. Rev. Lett.* **70** 1533 (1993).
- [71] K. Tamasaku, T. Ito, H. Takagi et S. Uchida. “Interplane charge dynamics in La_{2-x}Sr_xCuO₄.” *Phys. Rev. Lett.* **72** 3088 (1994).
- [72] P. B. Allen, W. E. Pickett et H. Krakauer. “Anisotropic normal-state transport properties predicted and analysed for high-T_c oxide superconductors.” *Phys. Rev. B* **37** 7482 (1988).
- [73] P. W. Anderson. *The theory of superconductivity in the high-T_c cuprates*. Princeton University Press (1997).

- [74] D. G. Clarke, S. P. Strong et P. W. Anderson. “Incoherence of Single Particle Hopping between Luttinger Liquids.” *Phys. Rev. Lett.* **72** 3218 (1994).
- [75] D. G. Clarke et S. P. Strong. “Single particle hopping between Luttinger liquids: a spectral function approach.” *Ferroelectrics* **177** 1 (1996).
- [76] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov et I. E. Dzyaloshinski. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover (1963).
- [77] S.-I. Tomonaga. “Remarks on Bloch’s method of sound waves applied to many-fermion problems.” *Prog. Theor. Phys.* **5** 544 (1950).
- [78] J. M. Luttinger. “An exactly soluble model of a many-fermion system.” *J. Math. Phys.* **4** 1154 (1963).
- [79] F. D. M. Haldane. ““Luttinger liquid theory” of one dimensional quantum fluids: I. Properties of the Luttinger mode and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas.” *J. Phys. C* **14** 2585 (1981).
- [80] J. Voit. “One-dimensional Fermi liquids.” *Rep. Prog. Phys.* **58** 977 (1995).
- [81] J. von Delft et H. Schoeller. “Bosonization for beginners – Refermionization for experts.” *Annalen Phys.* **7** 225 (1998).
- [82] A. Luther et I. Peschel. “Single-particle states, Kohn anomaly, and pairing fluctuations in one dimension.” *Phys. Rev. B* **19** 2911 (1974).
- [83] R. Heidenreich, R. Seiler et D. A. Uhlenbrock. *J. Stat. Phys.* **22** 27 (1980).
- [84] P. Jordan et E. Wigner. “Über das Paulische Äquivalenzverbot.” *Z. Phys.* **47** 631 (1928).
- [85] J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick et D. R. Nelson. “Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model.” *Phys. Rev. B* **16** 1217 (1977).
- [86] T. Giamarchi et H. J. Schulz. “Correlation functions of one-dimensional systems.” *Phys. Rev. B* **39** 4620 (1989).
- [87] J. Voit. “An improved method for computing correlation functions of one-dimensional fermion systems.” *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21** L1141 (1988).
- [88] J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless. “Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems.” *J. Phys. C* **6** 1181 (1973).
- [89] S.-T. Chui et P. A. Lee. “Equivalence of a one-dimensional fermion model and the two-dimensional Coulomb gas.” *Phys. Rev. Lett.* **35** 315 (1975).
- [90] A. Luther et V. J. Emery. “Backward scattering in the one-dimensional electron gas.” *Phys. Rev. Lett.* **33** 589 (1974).
- [91] A. Luther. “Eigenvalue spectrum of interacting massive fermions in one dimension.” *Phys. Rev. B* **14** 2153 (1976).
- [92] J. Sólyom. “The Fermi gas model of one-dimensional conductors.” *Adv. Phys.* **28** 201 (1979).
- [93] C. Di Castro et W. Metzner. “Ward identities and the β function in the Luttinger liquid.” *Phys. Rev. Lett.* **67** 3852 (1991).
- [94] F. D. M. Haldane. “General relation of correlation exponents and spectral properties of one-dimensional Fermi systems: Application to the anisotropic $S = 1/2$ Heisenberg chain.” *Phys. Rev. Lett.* **45** 1358 (1980).

- [95] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy et M. P. Nightingale. “Conformal invariance, the central charge and universal finite-size amplitudes at criticality.” *Phys. Rev. Lett.* **56** 742 (1986).
- [96] I. Affleck. “Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly.” *Phys. Rev. Lett.* **56** 746 (1986).
- [97] H. Frahm et V. E. Korepin. “Critical exponents for the one-dimensional Hubbard model.” *Phys. Rev. B* **42** 10 553 (1990).
- [98] H. J. Schulz. “Correlation exponents and the metal-insulator transition in the one-dimensional Hubbard model.” *Phys. Rev. Lett.* **5** 57 (1991).
- [99] N. Kawakami et S.-K. Yang. “Conductivity in one-dimensional highly correlated electron systems.” *Phys. Rev. B* **44** 7844 (1991).
- [100] H. Frahm et V. E. Korepin. “Correlation functions of the one-dimensional Hubbard model in a magnetic field.” *Phys. Rev. B* **43** 5653 (1991).
- [101] M. Ogata, M. U. Luchini, S. Sorella et F. F. Assaad. “Phase diagram of the one-dimensional t - J model.” *Phys. Rev. Lett.* **66** 2388 (1991).
- [102] N. Kawakami et S.-K. Yang. “Correlation functions in the one-dimensional t - J model.” *Phys. Rev. Lett.* **65** 2309 (1990).
- [103] F. Mila et X. Zotos. “Phase diagram of the one-dimensional extended Hubbard model at quarter-filling.” *Europhys. Lett.* **24** 133 (1993).
- [104] C. Hayward et D. Poilblanc. “Luttinger liquid behavior and superconducting correlations in t - J ladders.” *Phys. Rev. B* **53** 11 721 (1996).
- [105] H. J. Schulz. “Wigner Crystal in One Dimension.” *Phys. Rev. Lett.* **71** 1864 (1993).
- [106] F. Guinea et G. Zimanyi. “Luttinger liquids in higher dimensions.” *Phys. Rev. B* **47** 501 (1993).
- [107] P.-A. Bares et X.-G. Wen. “Breakdown of the Fermi liquid due to long-range interactions.” *Phys. Rev. B* **48** 8636 (1993).
- [108] D. V. Khveshchenko, R. Hlubina et T. M. Rice. “Non-Fermi-liquid behavior in two dimensions due to long-ranged current-current interactions.” *Phys. Rev. B* **48** 10 766 (1993).
- [109] R. Hlubina. “Luttinger liquid in a solvable two-dimensional model.” *Phys. Rev. B* **50** 8252 (1994).
- [110] K. Ueda et T. M. Rice. “ $1 + \varepsilon$ expansion for interacting fermions.” *Phys. Rev. B* **29** 1514 (1984).
- [111] C. Castellani, Di Castro et W. Metzner. “Dimensional Crossover from Fermi to Luttinger Liquid.” *Phys. Rev. Lett.* **72** 316 (1994).
- [112] P. W. Anderson. ““Luttinger-liquid” behavior of the normal metallic state of the 2D Hubbard model.” *Phys. Rev. Lett.* **64** 1839 (1990).
- [113] P. W. Anderson. “Singular forward scattering in the 2D Hubbard model and a renormalized Bethe ansatz ground state.” *Phys. Rev. Lett.* **65** 2306 (1990).
- [114] J. Feldman, J. Magnen, V. Rivasseau et E. Trubowitz. “The state of matter.” Dans *Advances Series in Mathematical Physics* (M. Aizenmann et H. Araki, eds.). World Scientific (1994).

- [115] J. Feldman, H. Knörrer, D. Lehmann et E. Trubowitz. “Fermi liquids in two space time dimensions.” Dans *Constructive physics* (V. Rivasseau, éd.). Springer lectures notes in physics (1995).
- [116] E. Dagotto. “Correlated electrons in high-temperature superconductors.” *Rev. Mod. Phys.* **66** 763 (1994).
- [117] D. Poilblanc. “Exact diagonalization methods for models of strongly correlated fermions.” Dans *Numerical methods for lattice quantum many-body systems*. Perseus Books Frontiers in Physics Series (à paraître).
- [118] C. Lánczos. “An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators.” *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **45** 255 (1950).
- [119] E. R. Davidson. “The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real-symmetric matrices.” *J. Comp. Phys.* **17** 87 (1975).
- [120] W. Kohn. “Theory of the insulating state.” *Phys. Rev.* **133** A 171 (1964).
- [121] H. J. Schulz. “The metal-insulator transition in one dimension.” Dans *Strongly correlated electronic materials: The Los Alamos symposium* (K. S. B. et coll., éd.). Addison-Wesley, Reading, Massachusetts (1994).
- [122] S. Sorella, A. Parola, M. Parrinello et E. Tosatti. “Non-Fermi liquid exponents of the one-dimensional Hubbard model.” *Europhys. Lett.* **12** 721 (1990).
- [123] C. Bourbonnais, H. Néglise, A. Reid et A.-M. S. Tremblay. “Fermi surface of the one-dimensional Hubbard model.” *Phys. Rev. B* **40** 2297 (1989).
- [124] D. Poilblanc, S. Yunoki, S. Maekawa et E. Dagotto. “Insulator-metal transition in one dimension induced by long-range electronic interactions.” *Phys. Rev. B* **56** R1645 (1997).
- [125] W. Wenzel et K. G. Wilson. “Basis set reduction in Hilbert space.” *Phys. Rev. Lett.* **69** 800 (1992).
- [126] J. Riera et E. Dagotto. “Many-body basis-set reduction applied to the two-dimensional t - J_z model.” *Phys. Rev. B* **47** 15 346 (1993).
- [127] J. Riera et E. Dagotto. “Cluster diagonalization in systematically expanded Hilbert spaces: Application to models of correlated electrons.” *Phys. Rev. B* **48** 9515 (1993).
- [128] E. Dagotto, G. B. Martins, J. Riera, A. L. Malvezzi et C. Gazza. “Diagonalization in reduced Hilbert spaces using a systematically improved basis: Application to spin dynamics in lightly doped ladders.” *Phys. Rev. B* **58** 12 063 (1998).
- [129] S. R. White. “Density matrix formulations for quantum renormalization groups.” *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863 (1992).
- [130] S. R. White. “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups.” *Phys. Rev. B* **48** 10 345 (1993).
- [131] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura et S. Uchida. “Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors.” *Nature* **375** 561 (1995).

- [132] J. M. Tranquada, J. D. Axe, N. Ichikawa, A. R. Moodenbaugh, Y. Nakamura et S. Uchida. “Coexistence of, and competition between superconductivity and charge-stripe order in $\text{La}_{1.6-x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.” *Phys. Rev. Lett.* **78** 338 (1997).
- [133] S. R. White et D. J. Scalapino. “Phase separation and stripe formation in the 2D t - J model: a comparison of numerical results.” prépublication cond-mat/9907375 (1999).
- [134] W. Krauth. “Introduction to Monte-Carlo algorithms.” Dans *Advances in computer simulation* (J. Kertesz et I. Kondor, édés.). Springer Verlag (1998). prépublication cond-mat/9812186.
- [135] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino et R. Sugar. “Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems.” *Phys. Rev. D* **24** 2278 (1981).
- [136] J. E. Hirsch, R. L. Sugar, D. J. Scalapino et R. Blankenbecler. “Monte-Carlo simulations of one-dimensional fermion systems.” *Phys. Rev. B* **26** 5033 (1982).
- [137] M. G. Zacher, E. Arrigoni, W. Hanke et J. R. Schrieffer. “Systematic numerical study of spin-charge separation in one dimension.” *Phys. Rev. B* **56** R1645 (1998).
- [138] M. Suzuki. *Progr. Theor. Phys.* **56** 1454 (1976).
- [139] M. Suzuki, S. Miyashita et A. Kuroda. *Progr. Theor. Phys.* **58** 1377 (1977).
- [140] J. E. Hirsch. *Phys. Rev. B* **28** 4059 (1983).
- [141] J. E. Hirsch. “Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study.” *Phys. Rev. B* **31** 4403 (1985).
- [142] R. N. Silver, D. S. Sivia et J. E. Gubernatis. “Maximum-entropy method for analytic continuation of quantum Monte-Carlo data.” *Phys. Rev. B* **41** 2380 (1990).
- [143] J. E. Gubernatis, M. Jarell, R. N. Silver et D. S. Sivia. “Quantum Monte-Carlo simulations and maximum entropy: Dynamics from imaginary-time data.” *Phys. Rev. B* **44** 6011 (1991).
- [144] M. Jarell et J. E. Gubernatis. *Phys. Rep.* **269** 133 (1996).
- [145] M. Uehara, T. N. and J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Môri et K. Kinoshita. *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** 2764 (1996).
- [146] P. W. Anderson. ““Confinement” in the One-Dimensional Hubbard Model: Irrelevance of Single-Particle Hopping.” *Phys. Rev. Lett.* **67** 3844 (1991).
- [147] C. Bourbonnais et L. G. Caron. “New mechanisms for phase transitions in quasi-one-dimensional conductors.” *Europhys. Lett.* **5** 209 (1988).
- [148] A. A. Nersesyan, A. Luther et F. V. Kusmartsev. “Scaling properties of the two-chain model.” *Phys. Lett. A* **176** 363 (1993).
- [149] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan et A. M. Tsvelik. *Bosonization and strongly correlated systems*. Cambridge University Press (1998).
- [150] V. M. Yakovenko. “Once again about interchain hopping.” *JETP Lett.* **56** 5101 (1992).
- [151] T. Giamarchi et H. J. Schulz. “Theory of spin-anisotropic electron-electron interactions in quasi-one-dimensional metals.” *J. Phys. (France)* **49** 819 (1988).

-
- [152] F. Guinea, V. Hakim et A. Muramatsu. “Bosonization of a two-level system with dissipation.” *Phys. Rev. B* **32** 4410 (1985).
- [153] S. Chakravarty et J. Rudnick. “Dissipative dynamics of a two-state system, the Kondo problem, and the inverse-square Ising model.” *Phys. Rev. Lett.* **75** 501 (1995).
- [154] F. Mila et D. Poilblanc. “Integrability and coherence of hopping between 1D correlated electrons systems.” *Phys. Rev. Lett.* **76** 287 (1996).
- [155] M. Fabrizio et A. Parola. “Spin-Charge Separation in a Model of Two Coupled Chains.” *Phys. Rev. Lett.* **70** 226 (1993).
- [156] N. Shannon, Y. Li et N. d’Ambrumenil. “Spin-charge separation, anomalous scaling, and the coherence of hopping in exactly solved two-chain models.” *Phys. Rev. B* **55** 12 963 (1997).
- [157] L. Bartosch et P. Kopietz. “Exactly solvable model of N coupled Luttinger chains.” *Phys. Rev. B* **55** 15 360 (1997).
- [158] M. Fabrizio, A. Parola et E. Tosatti. “Strong-coupling phases of two Hubbard chains with interchain hopping.” *Phys. Rev. B* **46** 3159 (1992).
- [159] M. Fabrizio. “Role of transverse hopping in a two-coupled-chains model.” *Phys. Rev. B* **48** 15 838 (1993).
- [160] L. Balents et M. P. A. Fisher. “Weak coupling phase diagram of the 2-chain Hubbard model.” *Phys. Rev. B* **53** 12 133 (1996).
- [161] E. Arrigoni. “Spin and charge excitations in a Three-Legs Fermionic Ladder: a Renormalization-Group study.” *Phys. Lett. A* **215** 91 (1996).
- [162] H.-H. Lin, L. Balents et M. P. A. Fisher. “The N-chain Hubbard model in weak coupling.” *Phys. Rev. B* **56** 6569 (1997).
- [163] V. J. Emery, S. A. Kivelson et O. Zachar. “Classification and stability of phases of the multicomponent one-dimensional electron gas.” *Phys. Rev. B* **59** 15 641 (1999).
- [164] D. V. Khveshchenko et T. M. Rice. “Spin-gap fixed points in the double-chain problem.” *Phys. Rev. B* **50** 252 (1994).
- [165] H. J. Schulz. “Phases of two coupled Luttinger liquids.” *Phys. Rev. B* **53** R2959 (1996).
- [166] E. Dagotto, J. Riera et D. J. Scalapino. “Superconductivity in ladders and coupled planes.” *Phys. Rev. B* **45** 5744 (1992).
- [167] R. M. Noack, S. R. White et D. J. Scalapino. “Correlations in a two-chain Hubbard model.” *Phys. Rev. Lett.* **73** 882 (1994).
- [168] D. Poilblanc, H. Tsunetsugu et T. M. Rice. “Spin gaps in coupled t–J ladders.” *Phys. Rev. B* **50** 6511 (1994).
- [169] D. Poilblanc, D. J. Scalapino et W. Hanke. “Spin and charge modes of the t–J ladder.” *Phys. Rev. B* **52** 6796 (1995).
- [170] C. A. Hayward, D. Poilblanc, R. M. Noack, D. J. Scalapino et W. Hanke. “Evidence for a superfluid density in t–J ladders.” *Phys. Rev. Lett.* **75** 926 (1995).
- [171] Y. Park, S. Liang et T. K. Lee. “Phase diagram of the two-chain Hubbard model.” *Phys. Rev. B* **59** 2587 (1999).

- [172] C. Castellani, C. Di Castro et W. Metzner. “Instabilities of Anisotropic Interacting Fermi Systems.” *Phys. Rev. Lett.* **69** 1703 (1992).
- [173] P. Kopietz. *Bosonization of interacting electrons in arbitrary dimensions*. Springer Verlag (1997).
- [174] P. Kopietz, V. Meden et K. Schönhammer. “Crossover between Luttinger and Fermi-liquid behavior in weakly coupled metallic chains.” *Phys. Rev. B* **56** 7232 (1997).
- [175] H. J. Schulz. *J. Phys. C* **16** 6769 (1983).
- [176] P. Kopietz, V. Meden et K. Schönhammer. “Anomalous Scaling and Spin-Charge Separation in Coupled Chains.” *Phys. Rev. Lett.* **74** 2997 (1995).
- [177] W. Metzner, C. Castellani et C. Di Castro. “Fermi systems with strong forward scattering.” *Adv. Phys.* **47** 317 (1998).
- [178] S. A. Brazovskii et V. Yakovenko. “On the theory of organic superconducting materials.” *Sov. Phys. JETP* **62** 1342 (1985).
- [179] X. G. Wen. “Metallic non-Fermi-liquid fixed point in two and higher dimensions.” *Phys. Rev. B* **42** 6623 (1990).
- [180] C. Bourbonnais. Thèse de doctorat, Université de Sherbrooke (1985).
- [181] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams et A. E. Ruckenstein. “Phenomenology of the normal state of Cu-O high-temperature superconductors.” *Phys. Rev. Lett.* **63** 1996 (1989).
- [182] D. G. Clarke et S. P. Strong. “New evidence for “confined coherence” in weakly coupled Luttinger liquids.” *J. Phys.: Condens. Matter* **9** 3853 (1997).
- [183] D. G. Clarke et S. P. Strong. ““Confined coherence” in strongly correlated, anisotropic metals.” *Adv. Phys.* **46** 545 (1997).
- [184] K. Schönhammer. “Confined coherence and analytic properties of Green’s functions.” *Phys. Rev. B* **58** 3494 (1998).
- [185] W. Metzner. “Linked-cluster expansion around the atomic limit of the Hubbard model.” *Phys. Rev. B* **43** 8549 (1991).
- [186] E. Arrigoni. “Interchain coherence of coupled Luttinger liquids at all orders in perturbation theory.” *Phys. Rev. Lett.* **80** 790 (1998).
- [187] D. Poilblanc. “Twisted boundary conditions in cluster calculations of the optical conductivity in two-dimensional lattice models.” *Phys. Rev. B* **44** 9562 (1991).
- [188] C. Gros. *Z. Physik B* **86** 359 (1992).
- [189] S. Capponi, D. Poilblanc et F. Mila. “Confinement and transverse conductivity in coupled Luttinger liquids.” *Phys. Rev. B* **54** 17 547 (1996).
- [190] S. Capponi, D. Poilblanc et E. Arrigoni. “Universal scaling behavior of coupled chains of interacting fermions.” *Phys. Rev. B* **57** 6360 (1998).
- [191] J. Voit. “Charge-spin separation and the spectral properties of Luttinger liquids.” *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 8305 (1993).
- [192] D. Poilblanc, H. Endres, F. Mila, M. Zacher, S. Capponi et W. Hanke. “One particle interchain hopping in coupled Luttinger liquids.” *Phys. Rev. B* **54** 10 261 (1996).

-
- [193] K. Penc, K. Hallberg, F. Mila et H. Shiba. “Shadow band in the one-dimensional infinite-U Hubbard model.” *Phys. Rev. Lett.* **77** 1390 (1996).
- [194] F. Mila, C. A. Stafford et S. Capponi. “Persistent currents in a Moebius ladder: a test of interchain coherence of interacting electrons.” *Phys. Rev. B* **57** 1457 (1998).
- [195] Y. Aharonov et D. Bohm. *Phys. Rev.* **115** 485 (1959).
- [196] N. Byers et C. N. Yang. “Theoretical considerations concerning quantized flux insuperconducting cylinders.” *Phys. Rev. Lett.* **7** 46 (1961).
- [197] L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir et H. Bouchiat. “Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents.” *Phys. Rev. Lett.* **64** 2074 (1990).
- [198] V. Chandrasekhar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen, W. J. Gallagher et A. Kleinsasser. “Magnetic response of a single, isolated gold loop.” *Phys. Rev. Lett.* **67** 3578 (1991).
- [199] D. Mailly, C. Chapelier et A. Benoit. “Experimental observation of persistent currents in GaAs-AlGaAs single loop.” *Phys. Rev. Lett.* **70** 2020 (1993).
- [200] B. Reulet, M. Ramin, H. Bouchiat et D. Mailly. “Dynamic response of isolated Aharonov-Bohm rings coupled to an electromagnetic resonator.” *Phys. Rev. Lett.* **75** 124 (1995).
- [201] D. Loss. “Parity effects in a Luttinger liquid: Diamagnetic and paramagnetic ground states.” *Phys. Rev. Lett.* **69** 343 (1992).
- [202] N. Yu et M. Fowler. “Persistent current of a Hubbard ring threaded with a magnetic flux.” *Phys. Rev. B* **45** 11 795 (1992).
- [203] S. Capponi et D. Poilblanc. “Transverse transport in coupled strongly correlated electronic chains.” *Z. Physik B* **103** 173 (1997).
- [204] P. Maldague. “Optical spectrum of a Hubbard chain.” *Phys. Rev. B* **16** 2437 (1977).

Étude théorique du rôle des processus interchaînes dans des liquides de Luttinger couplés

Les systèmes métalliques unidimensionnels possèdent une physique bien particulière désignée par le terme de *liquide de Luttinger*. Les propriétés d'un tel système sont bien comprises du point de vue théorique et diffèrent énormément du comportement métallique en deux et trois dimensions qui est décrit par le liquide de Fermi. En outre, il existe de nombreuses réalisations expérimentales potentielles susceptibles d'être décrites dans ce cadre. Néanmoins, le rôle du couplage interchaîne reste encore mal compris et peut, en pratique, limiter l'observation du comportement de liquide de Luttinger à certains domaines des paramètres physiques (température, pression, etc.).

Il a été proposé que le couplage interchaîne était fortement réduit du fait des interactions. Nous démontrons, par des calculs numériques et grâce à l'utilisation de lois d'échelles, la validité de cette hypothèse pour des modèles microscopiques sur réseau et nous obtenons de manière *quantitative* la renormalisation du couplage interchaîne dans un certain régime. De surcroît, nous mettons en évidence, pour la première fois pour des modèles microscopiques, l'existence de processus à deux particules dans la physique des chaînes fortement corrélées couplées. Nous étudions également les autres types d'excitations qui existent au voisinage de la transition métal-isolant.

Nous discutons également, de façon générale, les propriétés de transport de ces matériaux à la lumière des résultats théoriques obtenus à partir d'un hamiltonien adéquat. Là encore, la présence des interactions fortes produit un effet essentiel par exemple en réduisant l'absorption optique de ces matériaux en accord avec les observations.

Theoretical study of the role of interchain processes in coupled Luttinger liquids

One-dimensional metallic systems are characterized by a very peculiar behaviour: the *Luttinger liquid phase*. The physical properties of such a system are well understood from a theoretical point of view and are quite different from the usual metallic phase in two and three dimensions, which is known as the Fermi liquid. Moreover, this description may be relevant to many experimental devices. However, the role of the interchain coupling is still not clear and the observation of the Luttinger liquid phase may be restricted to certain values of the physical parameters (temperature, pressure and so on) due to this coupling.

It has been proposed that the interchain coupling might be reduced due to the interactions. By using numerical techniques and scaling laws, we demonstrate the validity of such an approach for microscopic lattice models and we obtain in a *quantitative* way the renormalisation of the interchain coupling in some regime. Moreover, the effect of the particle-hole pair hopping is shown, for the first time with microscopic models, to be relevant for highly correlated coupled chains. We also study the various excitations that exist near the metal-insulator transition.

Transport properties are also discussed for these materials and compared to the theoretical results obtained with an adequate hamiltonian. Here again, the strong interactions are responsible for the strong suppression of the optical absorption which is indeed observed in these materials.