



HAL
open science

I – Comportement non liquide de Fermi dans un modèle Kondo généralisé II – Antiferromagnétisme et singulet de spin dans l'apparition de la supraconductivité à haute T_c

Damien Bensimon

► To cite this version:

Damien Bensimon. I – Comportement non liquide de Fermi dans un modèle Kondo généraliséII – Antiferromagnétisme et singulet de spin dans l'apparition de la supraconductivité à haute T_c. Matière Condensée [cond-mat]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2004. Français. NNT : . tel-00011524

HAL Id: tel-00011524

<https://theses.hal.science/tel-00011524>

Submitted on 1 Feb 2006

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.

THÈSE

présentée par

Damien Bensimon

pour obtenir le grade de

Docteur de

l'Université Joseph Fourier - Grenoble I

Spécialité : Physique

**I COMPORTEMENT NON LIQUIDE DE FERMI
DANS UN MODELE KONDO GENERALISE**

**II ANTIFERROMAGNETISME ET SINGULET DE SPIN
DANS L'APPARITION DE LA
SUPRACONDUCTIVITE A HAUTE T_c**

Soutenue le 29 octobre 2004 devant la Commission d'Examen :

M.	Michel Héritier	Président
Mme	Mireille Lavagna	Directrice de thèse
M.	Natan Andrei	Examinateur
M.	Patrick Azaria	Rapporteur
M.	Alex Hewson	Rapporteur
M.	Andrés Jerez	Examinateur

Thèse Préparée au sein du Service de Physique Statistique, Magnétisme et Supraconductivité, DRFMC, CEA Grenoble

Résumé

La première partie de la thèse est consacrée à l'étude des points fixes associés à un modèle Kondo généralisé. Ce travail a été motivé par la récente mise en évidence d'un comportement non liquide de Fermi dans certains composés de fermions lourds. Nous considérons un modèle Kondo à une impureté dont le spin est décrit par une représentation mixte du groupe $SU(N)$, combinant des degrés de liberté bosoniques et fermioniques. La stabilité du point fixe de couplage fort est discutée dans le cadre d'une théorie de perturbation au deuxième ordre autour de ce point fixe. Contrairement aux modèles Kondo étudiés jusqu'ici, nous trouvons une instabilité du point fixe de couplage fort pour certaines classes de représentations du spin de l'impureté en présence d'un seul canal d'électrons de conduction. Cette instabilité indique que la physique du système est décrite par un point fixe de couplage intermédiaire, caractérisé de façon générale par un comportement de type non liquide de Fermi. Nous développons une approche basée sur le groupe de renormalisation perturbatif afin d'identifier ce point fixe de couplage intermédiaire. Nous dérivons la fonction d'échelle β caractérisant le flot de renormalisation et en déduisons les propriétés de basses énergies du système.

Dans une seconde partie, nous étudions la supraconductivité à haute température critique des cuprates dopés en trous sur la base d'une interprétation de type magnétique. L'origine de l'instabilité supraconductrice est attribuée à la coexistence de deux mécanismes. Le premier mécanisme considéré correspond à la formation d'une onde de densité de spin, résultant de l'échange de fluctuations de spin dans un état presque antiferromagnétique, tel que proposé dans le cadre de la théorie de "spin-bag". Le second repose sur l'existence d'un état résonant de liaison de valence (RVB), supposant la formation d'un singulet de spin dans les plans de Cuivre-Oxygène. Les deux approches prédisent l'apparition d'une phase supraconductrice hors du demi-remplissage. Nous avons développé une théorie de champ moyen, permettant de prendre en compte la coexistence de ces deux mécanismes. A l'aide d'un formalisme d'intégration fonctionnelle, nous dérivons le potentiel effectif d'appariement entre quasiparticules de type BCS, médié par les fluctuations gaussiennes (au niveau RPA) des différents champs considérés. Nous discutons également la symétrie du gap supraconducteur.

Table des matières

Remerciements	9
Introduction générale	11
Physique de l'effet Kondo	11
Physique de la supraconductivité à haute température critique	22
Plan	27
I Instabilité du point fixe de couplage fort d'un modèle Kondo généralisé	29
1 Introduction	31
2 Définition du modèle Kondo généralisé et limite de couplage fort	39
2.1 Modèle Kondo $SU(N)$ à une impureté et un canal de conduction	39
2.1.1 Représentation du spin de l'impureté	39
2.1.2 Représentation du spin des électrons de conduction	40
2.1.3 Définition de l'hamiltonien Kondo $SU(N) \times SU(1)$	40
2.2 Point fixe de couplage fort	41
2.2.1 Etat fondamental de couplage fort	41
2.2.1.a Energie de l'état fondamental	42
2.2.1.b Description de l'état fondamental au point fixe de couplage fort	43
2.2.2 Description des états excités de couplage fort	45
2.2.2.a Formulation des états excités	46
2.2.2.b Energie des états excités	47
3 Stabilité du point fixe de couplage fort	49
3.1 Principe de la méthode	49
3.1.1 Etat fondamental de couplage fort en présence d'un électron de conduction sur le site voisin	49
3.1.2 Critère de stabilité du point fixe de couplage fort	50
3.2 Calcul perturbatif des effets du terme de saut	51
3.2.1 Processus 1: configuration symétrique	53
3.2.2 Processus 1: configuration antisymétrique	58
3.2.3 Processus 2	61

4	Résultats et discussion	63
4.1	Hamiltonien effectif et interaction de spin	63
4.1.1	Description de l'hamiltonien effectif	63
4.1.2	Décalages en énergie ΔE_0^S et ΔE_0^A	64
4.1.3	Dérivation de l'hamiltonien effectif	65
4.1.4	Interaction effective de spin et stabilité du point fixe de couplage fort	66
4.2	Interaction effective de charge	70
4.2.1	Résultats	70
4.2.2	Cas limite de la représentation complètement fermionique	72
4.2.3	Rôle de la symétrie électron-trou	73
4.3	Propriétés physiques du modèle	74
5	Conclusion	77
 II Analyse du point fixe de couplage intermédiaire d'un modèle Kondo généralisé multicanal		79
6	Introduction	81
7	Modèle Kondo généralisé multicanal: présentation et méthodes	87
7.1	Préambule	87
7.2	Modèle Kondo généralisé $SU(N) \times SU(K)$	88
7.2.1	Représentation du spin de l'impureté	89
7.2.2	Représentation du spin électronique	90
7.2.3	Expression de l'hamiltonien	91
7.3	Méthode d'intégrales fonctionnelles	91
7.3.1	Méthode de Popov et Fedotov	91
7.3.2	Détermination de la fonction de partition	93
8	Calcul perturbatif de la self-energy des électrons de conduction	95
8.1	Détermination des diagrammes perturbatifs	95
8.2	Calcul de la self-energy aux premiers ordres de perturbation en J_K	96
8.2.1	Calcul des facteurs de spin de la self-energy	98
8.2.1.a	Facteur de spin intervenant dans le calcul de la self-energy au second ordre	98
8.2.1.b	Facteur de spin intervenant dans le calcul de la self-energy au troisième ordre	99
8.2.1.c	Facteurs de spin intervenant dans le calcul de la self-energy au quatrième ordre	100
8.2.2	Expressions des propagateurs libres associés à l'impureté et aux électrons de conduction	102
8.2.2.a	Fonctionnelle génératrice	102
8.2.2.b	Dérivation des propagateurs libres	104
8.2.3	Expression de la self-energy aux premiers ordres d'une théorie de perturbation en J_K	105

9	Méthode du Groupe de Renormalisation perturbatif	109
9.1	Dérivation de la fonction d'échelle	109
9.1.1	Equation de Callan-Symanzik	109
9.1.2	Expression de la fonction d'échelle β	111
9.2	Analyse du point fixe de couplage intermédiaire	112
9.2.1	Représentation fondamentale du groupe $SU(2)$	112
9.2.2	Spin arbitraire du groupe $SU(2)$	114
9.2.3	Symétrie électron-trou dans le groupe $SU(N)$	115
10	Conclusion	117
III	Une approche de la supraconductivité à haute température critique	119
11	Introduction	121
12	Modèle et théorie de champ moyen	125
12.1	Formulation du modèle microscopique	125
12.1.1	Hamiltonien de départ	125
12.1.2	Découplage du terme d'interaction	126
12.2	Hypothèses de point selle et hamiltonien de champ moyen	128
12.2.1	Approximations de champ moyen	128
12.2.2	Expression de l'hamiltonien en champ moyen	129
12.2.3	Diagonalisation de l'hamiltonien de champ moyen	130
12.2.4	Apparition de l'anomalie de parité et fermions de Dirac	131
12.2.5	Fonctions de Green libres	133
13	Solution de point-selle et équations de champ moyen	135
13.1	Développement de l'action au premier ordre des fluctuations	135
13.1.1	Contribution bosonique	136
13.1.2	Contribution fermionique	136
13.2	Dérivation des équations de champ moyen	139
13.3	Solution de champ moyen	140
14	Fluctuations gaussiennes et appariement BCS	145
14.1	Action au deuxième ordre des fluctuations et fonctions de corrélation	145
14.1.1	Expression de la contribution bosonique	146
14.1.2	Evaluation de la contribution fermionique	148
14.1.3	Développement de l'action au second ordre des fluctuations	151
14.2	Définition de l'action effective	151
14.2.1	Action au premier ordre des fluctuations en terme de quasiparticules	152
14.2.2	Dérivation de l'action effective	153
14.3	Evaluation du potentiel d'appariement BCS	154
14.3.1	Expression analytique du potentiel d'appariement	154
14.3.2	Résultats numériques obtenus pour le potentiel d'appariement	156

14.4	Symétrie du gap supraconducteur	158
15	Discussion et conclusion	161
Appendices - Partie I		163
A	Composition de représentations fondamentales dans le groupe SU(3)	165
A.1	Composition de deux représentations fondamentales de SU(3)	166
A.2	Composition de trois représentations fondamentales de SU(3)	168
B	Etats de spin de l'impureté	173
B.1	Représentation complètement symétrique	173
B.2	Représentation complètement antisymétrique	174
B.3	Représentation de symétrie mixte	175
B.3.1	Description des états de plus haut poids	176
B.3.2	Dérivation des deux contraintes caractérisant la représentation de symétrie mixte	178
Appendices - Partie II		181
C	Propriétés des générateurs du groupe SU(N)	183
C.1	Représentation des électrons de conduction	183
C.2	Représentation associée au spin de l'impureté	184
D	Terme du troisième ordre en J_K de la self-energy électronique	187
D.1	Contribution de la partie de spin	188
D.2	Contribution apportée par les propagateurs	188
D.3	Contribution d'ordre 3 à la self-energy	191
Appendices - Partie III		192
E	Expression des intégrales thermiques	195
E.1	Expression générale	195
E.2	Calcul des intégrales F	195
E.3	Sommations sur les fréquences de Matsubara	199
F	Existence d'un mode de Goldstone	201
F.1	Action d'ordre 2 dans le plan du réseau	201
F.2	Susceptibilité statique transverse	202
Tables des figures		203
Bibliographie		209

Remerciements

J'adresse en premier lieu de profonds remerciements à Mireille Lavagna qui a dirigé ce travail de thèse, pour tous ses conseils et encouragements, pour sa constante disponibilité, et pour m'avoir fait bénéficier de sa grande compréhension des subtilités complexes relatives aux fortes corrélations dans les systèmes d'électrons.

J'exprime ma plus profonde gratitude au Professeur Naoto Nagaosa qui m'a accueilli dans son laboratoire de l'Université de Tokyo. Je le remercie pour sa grande disponibilité, permanente malgré ses très nombreuses responsabilités universitaires, pour son enthousiasme indestructible et si communicatif, et pour m'avoir fait partager en de nombreuses occasions sa vision globale et très originale de la théorie de la matière condensée. J'ai aussi grâce à lui pu découvrir ce pays si fascinant qu'est le Japon.

Il est souvent difficile de décèler précisément les influences qui nous poussent à suivre tel ou tel parcours, à explorer une voie plutôt qu'une autre. Dans mon cas, le cours du Professeur Michel Héritier, que j'ai eu la très grande chance de suivre durant mon année comme étudiant au D.E.A. de Physique des Solides, a constitué l'élément déterminant; j'ai ainsi choisi de poursuivre mes études doctorales dans ce domaine si passionnant qu'est la théorie de la matière condensée. Je lui suis profondément reconnaissant de m'avoir encouragé à continuer dans cette voie, et le remercie pour l'honneur qu'il m'a fait en présidant le jury chargé d'examiner cette thèse.

Ce travail doctoral a été mené en étroite coopération avec Andrés Jerez. J'ai pu profiter au cours de très nombreuses discussions de sa vision très claire des phénomènes complexes que nous avons étudiés, de sa rigueur constante et de sa grande intuition, bref de toutes ces choses si subtiles qui forment ce qu'on appelle communément le sens physique. Pour avoir autant contribué à ma formation et pour ses précieux encouragements je lui adresse de profonds remerciements.

J'ai bénéficié à plusieurs reprises de discussions très fructueuses avec le Professeur Natan Andrei. Ses explications lumineuses ont toujours permis des progrès très significatifs dans l'avancement de mon travail. Je le remercie pour ses constants encouragements et pour avoir accepté d'être membre du jury.

Le Professeur Alex Hewson et Patrick Azaria ont accepté une lourde charge en étant rapporteurs du manuscrit. Je les en remercie profondément, et j'ai grandement bénéficié des commentaires et suggestions qu'ils ont apportés.

J'exprime ma profonde reconnaissance au Professeur Philippe Nozières, qui a accepté de lire mon manuscrit, m'a prodigué de très précieux conseils et a tenu à être présent lors de ma soutenance de thèse.

J'adresse de grands remerciements à Louis Jansen, chef de service au SPSMS, pour sa disponibilité permanente qui a permis que mon séjour dans son laboratoire se passe dans les meilleures conditions, et pour ses précieux conseils notamment concernant la préparation des exposés.

Je remercie Vladimir Mineev, chef du Groupe Théorie au SPSMS, pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Stéfan Roche, qui a toujours manifesté une grande curiosité envers mon travail et m'a souvent fait part de remarques très instructives. Je lui suis énormément redevable pour m'avoir permis de partir au Japon durant un an et demi.

J'ai eu au cours des années de nombreuses et profitables discussions avec Michel Bonnet, Jacques Schweizer et Jacques Villain, membres du SPSMS. Qu'ils en soient remerciés.

J'ai grandement profité de l'ambiance règnant dans le bureau des apprentis théoriciens du SPSMS; cette ambiance a toujours été plus qu'agréable grâce à la présence de Pavel, Vu Hung, François et tous ceux qui sont passés par là au cours des nombreux mois de mon travail doctoral.

J'adresse de grands remerciements à Shuichi Murakami, Hitomi Sato, Ryuichi Shindou, Shigeki Onoda et Daisuke Yano, grâce auxquels mon séjour au Japon s'est déroulé à merveille. Je remercie également le Professeur Seiji Miyashita, pour toutes les conversations, en français, que nous avons eues en de multiples occasions.

Enfin je remercie plus que chaleureusement Bindu mon épouse, ma maman, mes tantes et oncles, mes cousins et cousines, et tous mes amis, tout particulièrement la famille Hornez, qui m'ont toujours prodigué de très précieux encouragements au fil des années, et ont tenu à venir me soutenir en ces instants si particuliers que nous avons vécus lors de ma soutenance de thèse.

Introduction générale

Ce manuscrit présente deux travaux distincts. Le premier a constitué mon travail de thèse, préparée sous la direction de Mireille Lavagna et en collaboration avec Andrés Jerez de l'Institut Laue Langevin [1]. Il a été mené sur deux périodes : de septembre 1999 à septembre 2001, puis de septembre 2003 à octobre 2004. Il s'agit d'une étude des points fixes associés à un modèle Kondo généralisé, qui a été motivée par le comportement non liquide de Fermi observé dans les composés de fermions lourds. Ce travail constitue les deux premières parties du manuscrit. La troisième partie présente une étude effectuée entre octobre 2001 et août 2003, indépendamment de la précédente. Elle concerne la supraconductivité à haute température critique, phénomène observé dans les composés nommés cuprates et qui reste à ce jour inexpliqué. Ce travail a été exécuté dans le cadre de mes obligations militaires, remplies en tant que coopérant au Département de Physique Appliquée de l'Université de Tokyo (Japon), dans le laboratoire du Professeur Naoto Nagaosa.

Dans cette introduction générale, nous rappelons les faits marquants, expérimentaux et théoriques, concernant tout d'abord la physique de l'effet Kondo, puis celle de la supraconductivité à haute température critique. Nous donnerons ensuite le plan du manuscrit.

Physique de l'effet Kondo

Les électrons de conduction dans un métal normal se comportent comme des *quasiparticules* faiblement couplées entre elles. Ils sont bien décrits par la *théorie des liquides de Fermi*, formulée par Lev D. Landau au cours des années 50 [2, 3]. L'idée principale de cette théorie est le principe de continuation adiabatique. Partant du gaz d'électrons libres, nous imaginons que la répulsion coulombienne entre électrons de conduction est activée adiabatiquement, autrement dit infiniment lentement. En supposant qu'aucune singularité n'est rencontrée, le système évolue continûment. Finalement, le système atteint un état de basses énergies en correspondance biunivoque avec l'état du système libre. Ce système dans lequel les interactions coulombiennes sont incluses est donc décrit par une physique très similaire à celle du gaz d'électrons libres, la seule différence résidant dans la renormalisation des paramètres notamment la masse des quasiparticules : on parle alors de masse *effective*. Le comportement d'un liquide de Fermi à basses températures est le suivant :

- augmentation quadratique de la résistivité électrique avec la température,
- $$\rho(T) = \rho_{T=0} + AT^2,$$
- chaleur spécifique linéaire en température, $C = \gamma T$,
 - susceptibilité magnétique (de Pauli) χ constante en température.

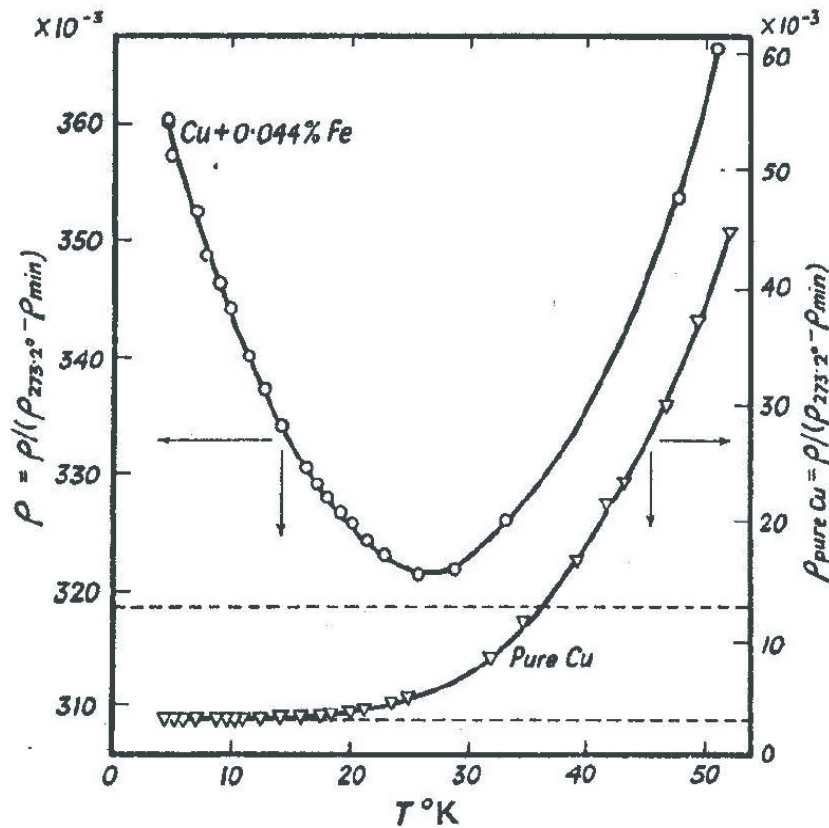


FIG. 1 – Variation de la résistivité électrique ρ en fonction de la température, pour le cuivre (triangles) et un alliage dilué de fer dans du cuivre (cercles), d'après la référence [5].

Pour un métal conventionnel comme le Paladium, nous avons typiquement :

$$A = 10^{-5} \mu\Omega \cdot \text{cm}/\text{K}^2, \quad \gamma = 9.4 \text{ mJ}/(\text{mol} \cdot \text{K}^2), \quad \chi = 0.8 \text{ memu/mol.}$$

Si le métal contient des impuretés non magnétiques, la résistivité décroît quand la température est abaissée, jusqu'à atteindre une valeur constante. En effet dans la plupart des métaux, la principale contribution à la résistivité est apportée par la diffusion des phonons, qui est de plus en plus faible quand la température diminue. Lorsque le métal contient des moments magnétiques localisés, les propriétés du système relatives aux phénomènes de transport sont très différentes. Dès le début des années 30, de Haas *et al.* [4] ont observé l'existence d'un minimum de la résistivité en fonction de la température, lors de mesures sur des alliages dilués comme CuFe, CuMn ou AuFe, contenant des impuretés magnétiques sous la forme d'ions de métaux de transition présentant une bande 3d (voir Figure 1).

Ce minimum de résistivité signale l'existence de processus de dispersion à basses températures. Dans le cas d'une impureté ne possédant pas de degré de liberté interne, la diffusion des électrons par l'impureté peut être traitée comme un problème à un électron, du fait que chaque électron voit toujours le même potentiel localisé. Cependant lorsque l'impureté possède des degrés de liberté internes, comme c'est le cas pour un moment magnétique lo-

calisé, le problème est beaucoup plus complexe. En effet, l'état de l'impureté peut changer à chaque collision avec un électron de conduction. Par conséquent, le potentiel vu par un électron donné dépend directement des effets produits sur l'impureté par les autres électrons. Il s'agit typiquement d'un effet à N corps, introduisant de fortes corrélations électroniques.

Ce problème induit par la présence d'impuretés magnétiques dans un métal a requis beaucoup de temps et d'efforts tant expérimentaux que théoriques avant d'être compris. Dans les années 50, Jacques Friedel a émis l'hypothèse de l'existence d'un état lié virtuel [6, 7], caractérisé par un effet de résonance tendant à localiser l'impureté lors de la diffusion des électrons de conduction. Ce concept d'état lié virtuel a été reformulé en 1961 par Philip Warren Anderson, dans le cadre d'un modèle décrivant une impureté constituée d'électrons localisés (de type f par exemple) dont la charge peut fluctuer, hybridée à des électrons de conduction. Ce modèle est connu depuis lors sous le nom de modèle d'Anderson [8].

En 1964, Jun Kondo a montré pour la première fois que le minimum de résistivité résulte de processus d'échange de spin entre l'impureté magnétique et les électrons de conduction [9]. Kondo a considéré le modèle $s-d$ introduit par Zener [10], Kasuya [11] et Yosida [12], qui décrit un spin d'impureté magnétique $1/2$ en interaction avec le spin des électrons de conduction sur le même site via une constante de couplage J . Schrieffer et Wolff ont montré que le modèle $s-d$ peut être déduit du modèle d'Anderson dans un régime où les fluctuations de charge de l'impureté sont bloquées, et où seules sont présentes les fluctuations de spin [13]. Un calcul de perturbation au troisième ordre en J fait apparaître une diffusion anormale des électrons de conduction situés au voisinage de la surface de Fermi. Il en résulte une contribution logarithmique dans la dépendance thermique de la résistivité. Dans le cas d'un couplage J antiferromagnétique, ce terme en $\ln T$ augmente quand la température décroît, et décrit très bien la remontée de résistivité observée à basses températures (cf. Figure 2). Un point crucial permettant de valider l'interprétation du minimum de résistivité comme une conséquence de la présence d'impuretés magnétiques est la dépendance de ce minimum avec la concentration d'impuretés. Outre la compréhension de l'origine du minimum de résistivité, Kondo a également montré que la section efficace de diffusion électronique, évaluée par un calcul en perturbation, diverge à la température T_K (appelée depuis température Kondo) pour laquelle la résistivité atteint son minimum. L'ensemble des phénomènes physiques associés est connu sous le nom d'effet Kondo, et on regroupe les modèles théoriques utilisés pour étudier ces phénomènes sous le terme de modèles Kondo. La littérature sur l'effet Kondo est aujourd'hui considérable. Une présentation très complète se trouve dans le livre d'Alex Hewson [14].

Le modèle $s-d$ étudié initialement par Kondo considère une impureté de spin $1/2$. Il décrit correctement les propriétés observées dans les systèmes pour lesquels les impuretés magnétiques sont des ions de métaux de transition, comme le Fer. Lorsque les impuretés sont des ions de terres rares, comme le Cérium, il est nécessaire de tenir compte non seulement du spin du moment local, mais également de ses degrés de liberté orbitaux. Ceci conduit à l'introduction de deux nouveaux modèles : le modèle de Coqblin-Schrieffer [15] et le modèle Kondo multicanal [16]. Le modèle de Coqblin-Schrieffer décrit une impureté caractérisée par un moment angulaire total, noté par j , couplée à des électrons de conduction. Il en résulte une généralisation du groupe de symétrie de rotation du spin, de $SU(2)$ à $SU(N)$ avec

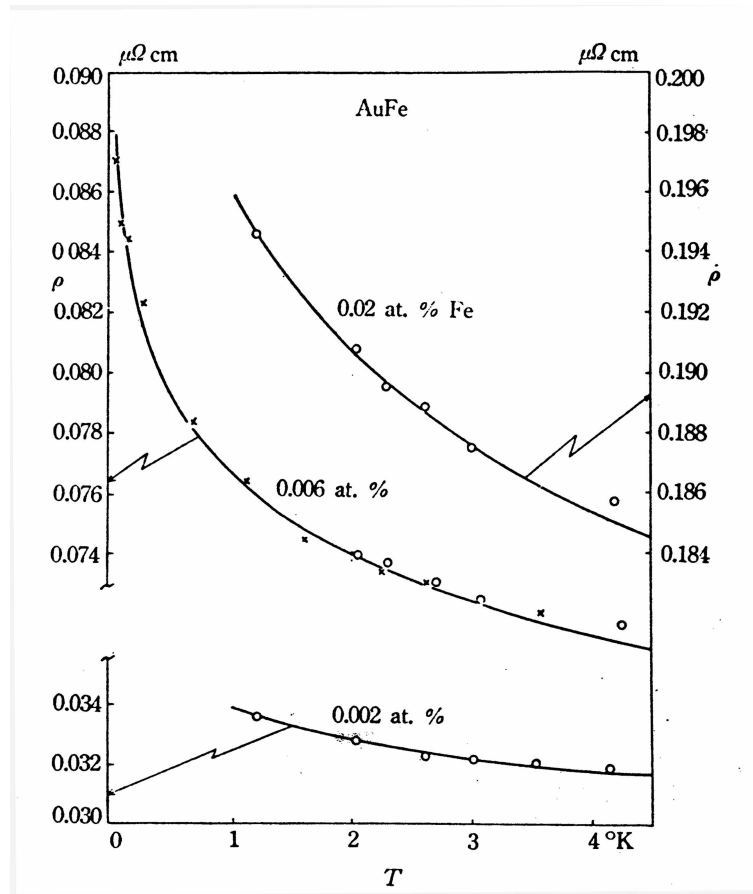


FIG. 2 – Comparaison pour la variation de la résistivité en fonction de la température entre données expérimentales (points) et résultats théoriques (lignes) donnés par le calcul perturbatif de Kondo, pour un alliage de fer dilué à plusieurs concentrations dans de l'or (d'après la référence [9]).

$N = 2j + 1$. Le modèle Kondo multicanal, défini par Philippe Nozières et André Blandin, considère séparément le spin et les degrés de liberté orbitaux. Seul le spin est sensible à l'interaction Kondo. L'effet de l'état orbital de l'impureté peut être incorporé dans le modèle sous la forme d'un degré de liberté supplémentaire des électrons de conduction, appelé indice de canal, à condition de faire deux hypothèses. La première est de supposer la présence d'un couplage spin-orbite fort, dont l'état résultant est un singulet orbital. La deuxième hypothèse est de considérer les effets du champ cristallin, qui permettent malgré la règle de Hund de considérer les indices de canaux comme des variables indépendantes du spin de l'impureté. Une présentation des différentes théories se rapportant à l'effet Kondo se trouve dans l'article de revue de P. Nozières, référence [17].

Ces différents modèles constituent un excellent point de départ pour l'étude théorique du comportement observé dans les systèmes d'impuretés magnétiques. Il manquait néanmoins une méthode de traitement de ces modèles. En effet, une approche perturbative décrit bien le système dans le régime $T \gg T_K$, mais la divergence du terme logarithmique à basses

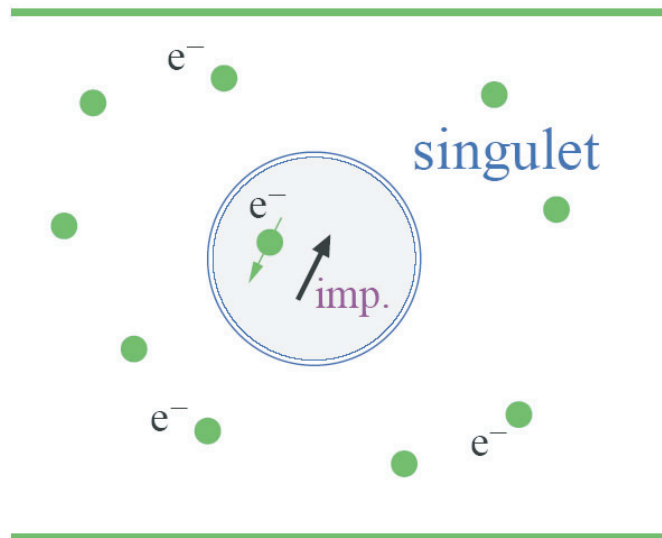


FIG. 3 – Formation d’un singulet local sur le site de l’impureté, dans le cadre du modèle $s-d$ décrivant l’interaction d’une impureté de spin $1/2$ avec un gaz d’électrons de conduction.

températures invalide les théories de perturbation dans le régime de basses énergies. Il était important alors de trouver une méthode, nécessairement non perturbative, capable de décrire la physique du système à température $T < T_K$, la température Kondo T_K étant la température à laquelle le développement perturbatif diverge. A la fin des années 60 Anderson a proposé une théorie d’échelle dans laquelle les excitations électroniques de plus hautes énergies sont éliminées perturbativement [18, 19]. Il en résulte une famille de modèles effectifs valides aux échelles de basses énergies, chacun de ces modèles étant caractérisés par une constante de couplage J renormalisée au fur et à mesure que la largeur de bande de conduction D est réduite, définissant ainsi le *flot de renormalisation*. Dans le cas du modèle Kondo pour lequel l’interaction de spin est antiferromagnétique, le résultat principal est que le couplage effectif local entre les spins de l’impureté et l’électron de conduction augmente au fur et à mesure que les états de hautes énergies sont éliminés. Cette approche perturbative n’est donc plus valable aux échelles de basses énergies déterminant le comportement du système dans le régime $T \ll T_K$, car la valeur du couplage effectif correspondant est très grande. Cependant Anderson a émis l’hypothèse que la renormalisation peut malgré tout être poursuivie dans le régime de basses énergies, et prédit que le couplage effectif continue à croître indéfiniment. Suivant ces hypothèses, la physique du système est décrite par un modèle effectif caractérisé par une interaction effective de spin infinie. Dans la terminologie du groupe de renormalisation à laquelle nous aurons souvent recours dans les deux premières parties de ce manuscrit, ce modèle effectif caractérisé par un couplage infini constitue le *point fixe de couplage fort* du système. Un point fixe correspond à un modèle effectif dont les paramètres (ici la constante de couplage Kondo) sont invariants par renormalisation. Une propriété essentielle de la théorie de la renormalisation est que la physique du système dans un régime d’énergie donné est toujours décrite par un point fixe. L’impureté est liée

à un électron de conduction dans un état singulet, et le système se comporte à basses températures comme une impureté non magnétique puisque le spin du moment localisé est compensé ou *écranté* par celui de l'électron (voir Figure 3) : le système se comporte alors comme un liquide de Fermi, dont les paramètres sont renormalisés suite aux excitations virtuelles vers l'état triplet.

Il ne s'agissait cependant que de conjectures. En particulier, même si la théorie de la renormalisation disposait dès le début des années 70 de bases mathématiques solides, la validité de l'hypothèse selon laquelle le point fixe de couplage fort décrit effectivement la physique de basses énergies de l'effet Kondo restait à démontrer. Une méthode permettant de mener rigoureusement les calculs jusqu'au régime de basses énergies, $T \ll T_K$, faisait toujours défaut. Kenneth G. Wilson a alors apporté une contribution décisive en 1973. Il a réussi à construire une théorie non perturbative, la méthode du groupe de renormalisation numérique, en s'inspirant à la fois des idées du groupe de renormalisation issues de la physique des particules (théorie des champs) [20, 21, 22] et des concepts d'invariance d'échelle (*scaling*) apparues en physique de la matière condensée au début des années 60 [23]. Cette méthode a permis de démontrer la validité des hypothèses d'Anderson [24, 25]. Wilson a ainsi obtenu dans le cadre du modèle $s-d$ pour un spin d'impureté $1/2$ la solution définitive du problème en ce qui concerne l'état fondamental et les excitations de basses énergies, après avoir surmonté plusieurs difficultés techniques. Par exemple cette méthode fait apparaître des termes non linéaires dans les interactions entre électrons à chaque étape du *scaling*, et nécessite de tirer profit des symétries du modèle afin de rendre les temps de calcul numérique raisonnables. L'un des résultats marquants obtenu par Wilson concerne la valeur du rapport χ/γ (χ est la susceptibilité magnétique et γ le coefficient linéaire de la dépendance thermique de la chaleur spécifique) appelé depuis rapport de Wilson. La valeur du rapport de Wilson est deux fois plus grande que pour un gaz d'électrons libres. La méthode du groupe de renormalisation numérique s'est avérée d'une très grande efficacité dans de nombreux autres domaines, notamment la théorie des phénomènes critiques [26, 27]. Wilson a reçu pour ses travaux le prix Nobel de physique en 1982.

Entre 1974 et 1975, les résultats obtenus par Wilson ont été réinterprétés par P. Nozières dans le cadre d'une théorie phénoménologique basée sur la formation d'un liquide de Fermi local à basses températures [28, 29]. En particulier cette théorie permet par un ajustement des paramètres de Landau une dérivation simple de la valeur du rapport de Wilson χ/γ , et un calcul du coefficient A apparaissant dans la dépendance thermique de la résistivité. Une dérivation microscopique de cette théorie du liquide de Fermi local a été obtenue par K. Yamada à partir du modèle d'Anderson [30].

Au début des années 80, Natan Andrei [31, 32] et Alexei M. Tsvelick [33, 34] ont obtenu la solution exacte du modèle $s-d$ pour un spin d'impureté $1/2$, en utilisant la méthode de l'ansatz de Bethe développée par Hans Bethe pour résoudre le modèle de Heisenberg à une dimension [35]. En supposant que seules les ondes électroniques de symétrie s sont diffusées par l'impureté Kondo, le principe est d'utiliser l'invariance par rotation afin de se ramener à un modèle unidimensionnel. L'ansatz de Bethe permet sous réserve que le modèle soit intégrable d'obtenir les états propres du système. Le modèle est intégrable si les équations de l'ansatz de Bethe associées vérifient les relations de Yang-Baxter [37], ce

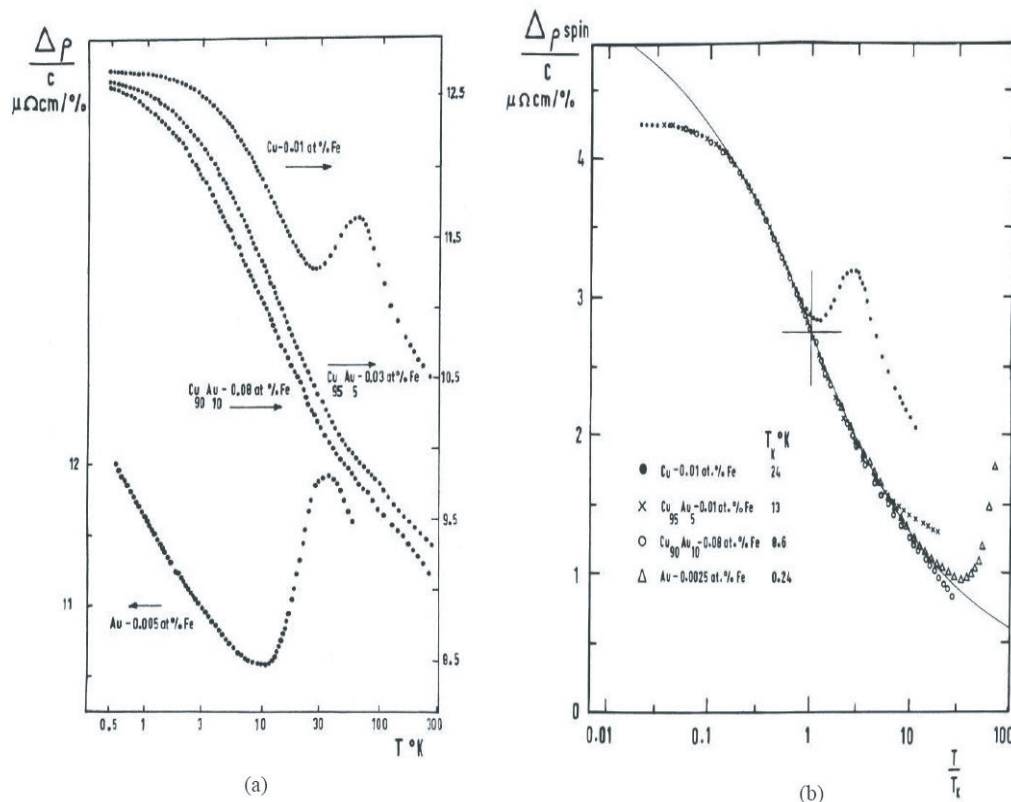


FIG. 4 – (a) Contribution de l'impureté à la résistivité dans différents types d'alliages dilués de fer dans de l'aluminium et du cuivre, d'après la référence [36]. (b) Identique à (a), avec l'échelle de température renormalisée par T_K . L'échelle de température est logarithmique dans les deux cas.

qui est le cas ici. Cette méthode donne des résultats analytiques (exacts) permettant de déterminer le comportement thermodynamique du système pour les régimes de basses et de hautes énergies, ainsi que dans le régime de cross-over les séparant. Ces résultats ont confirmé ceux de Wilson.

Nous rappelons maintenant les principaux résultats concernant le modèle $s-d$ pour un spin d'impureté $1/2$, obtenus à partir des solutions données par la méthode du groupe de renormalisation numérique et l'ansatz de Bethe. Les concepts qu'ils mettent en évidence restent pertinents pour d'autres modèles Kondo plus sophistiqués, tels que celui qui sera étudié dans les deux premières parties de ce manuscrit. La propriété majeure caractérisant l'effet Kondo est celle d'*universalité*. Il existe une échelle d'énergie unique dans le problème qui est la température Kondo T_K . Toutes les propriétés physiques présentent un comportement universel en fonction de la température en T/T_K , tant que la largeur D de la bande des électrons de conduction est plus grande que n'importe quelle autre échelle d'énergie du système. On parle de limite de scaling, dans le régime de basses énergies valide à basses températures. La propriété d'universalité implique que les résultats des mesures d'une même quantité physique effectuées dans des systèmes Kondo différents suivent exactement la même

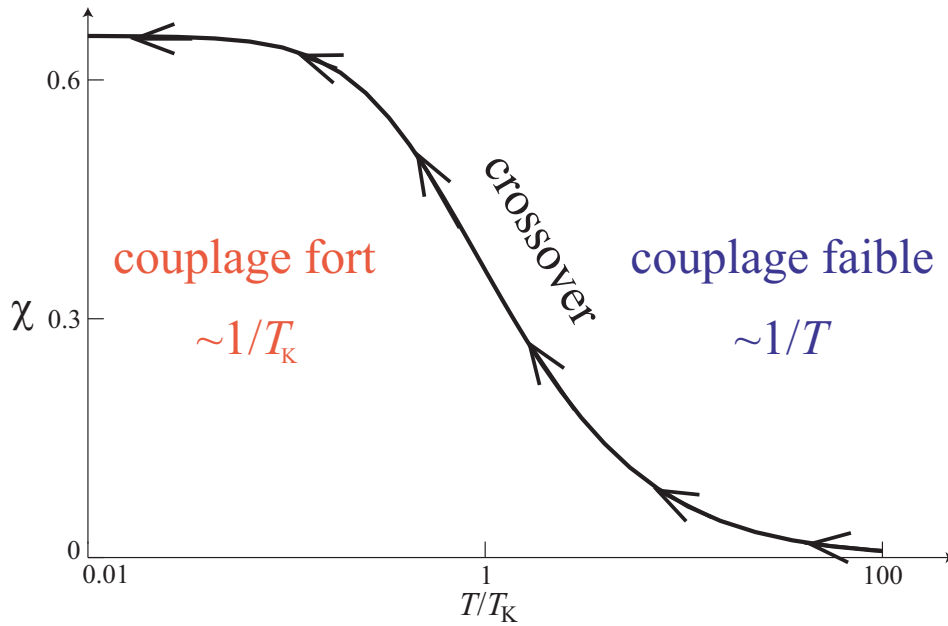


FIG. 5 – Variation de la susceptibilité magnétique en fonction de la température faisant apparaître les deux régimes physiques, de couplage faible et de couplage fort, séparés par la région de crossover ($T \sim T_K$). Les flèches indiquent la direction du flot de renormalisation.

loi en fonction de la température dès lors que les énergies sont renormalisées par le facteur T_K (voir Figure 4). La température Kondo est d'une importance essentielle dans la caractérisation de l'effet Kondo. Elle ne constitue pas une propriété du métal formant l'impureté magnétique ou de l'alliage dans lequel cette impureté est plongée, mais est générée dynamiquement par les interactions de l'impureté avec les électrons de conduction. Elle signale la gamme de température pour laquelle les corrélations électroniques deviennent trop importantes pour que la théorie de perturbation reste valable, et sépare donc le régime de couplage faible ($T \gg T_K$) du régime de basses énergies ($T \ll T_K$). Dans le régime intermédiaire ($T \sim T_K$), les propriétés du système changent continûment. Ce changement est appelé *crossover*, pour le distinguer d'une transition de phase. Ce cross-over ne peut pas être décrit par un modèle de point fixe. On peut le caractériser en étudiant le comportement de la susceptibilité magnétique en fonction de la température (cf. Figure 5). Dans le régime de spin libre ($T \gg T_K$), la susceptibilité magnétique suit une loi de Curie-Weiss, $\chi \sim 1/T$. À l'inverse dans le régime de basses énergies ($T \ll T_K$), elle est indépendante de la température, $\chi \sim 1/T_K$. Une autre propriété marquante du régime de basses énergies, que nous avons déjà mentionnée, est l'*écranage* complet de l'impureté (voir la Figure 3). Dans ce régime le concept d'impureté isolée n'a plus de sens. En effet tout se passe comme si on avait non pas un moment magnétique d'impureté mais un composite formé de l'impureté écranquée par un électron de conduction. Dans le cas présent, ce composite se trouve dans un état singulet de spin. Nous développerons cette notion d'impureté écranquée en interaction avec un gaz d'électrons dans la première partie.

Au début des années 90, Ian Affleck et Andreas W. W. Ludwig ont étudié l'effet Kondo

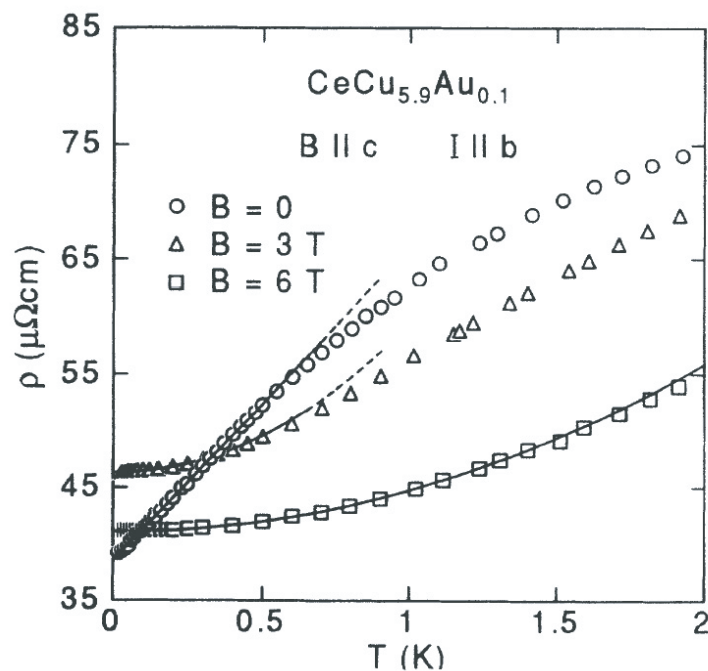


FIG. 6 – Résistivité électrique ρ en fonction de la température, mesurée sur le composé monocristallin de fermions lourds $\text{CeCu}_{5.9}\text{Au}_{0.1}$ en présence d'un champ magnétique B appliqué suivant la direction perpendiculaire au plan principal. Les lignes pleines indiquent une dépendance linéaire ($B = 0$) et quadratique ($B = 3$ et 6 T) en température (d'après la référence [46]).

au moyen des théories de l'invariance conforme à bords. Le point de départ est de considérer que l'interaction Kondo qui est renormalisée à basses énergies constitue une condition de bord invariante conforme, en supposant que tout point fixe du modèle peut être décrit par une théorie conforme à déterminer. La difficulté principale vient du fait que les théories conformes peuvent au mieux caractériser le voisinage d'un point fixe, mais ne peuvent pas suivre le flot de renormalisation d'un point fixe à l'autre. En s'appuyant sur les travaux antérieurs utilisant les méthodes du groupe de renormalisation et de l'ansatz de Bethe, qui ont permis d'identifier les différents points fixes, Affleck et Ludwig ont réussi à surmonter cette difficulté, et décrit la physique de basses énergies associée à plusieurs modèles Kondo, non seulement le modèle $s-d$ initial [38] mais également le modèle Kondo multicanal de symétrie de spin $\text{SU}(2)$ [39] et étendue au groupe $\text{SU}(N)$ [40]. Les résultats obtenus par le groupe de renormalisation numérique et l'ansatz de Bethe présentés précédemment ont été confirmés par la théorie de l'invariance conforme.

Sur le plan expérimental, les composés de *fermions lourds* ont suscité un regain d'intérêt pour les modèles d'impureté Kondo. En effet, de nombreux composés de fermions lourds soumis à un changement de composition chimique (dopage), une forte pression ou un champ magnétique présentent un comportement à basses températures qui diffère des prédictions de la théorie des liquides de Fermi. Un comportement de type non liquide de Fermi a également

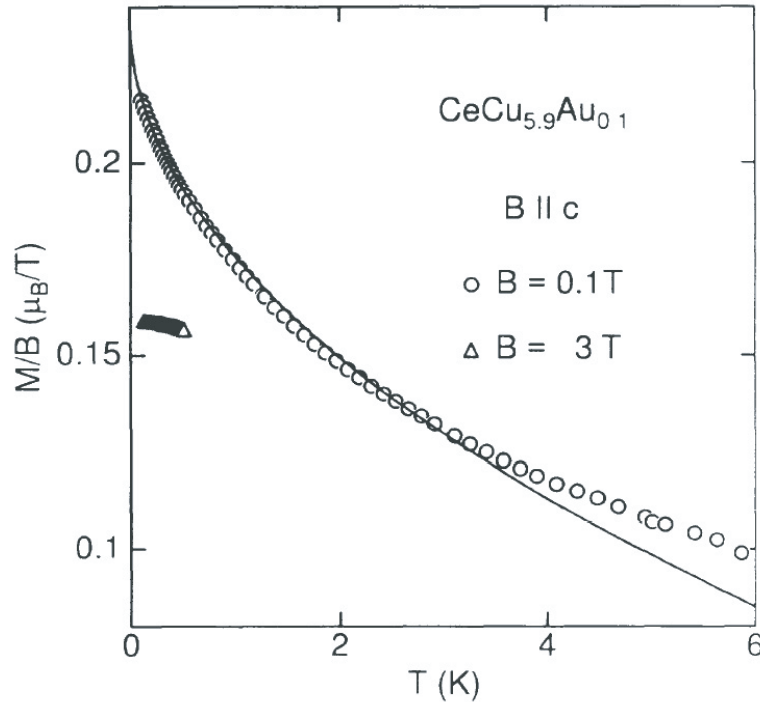


FIG. 7 – Susceptibilité magnétique $\chi = M/B$ (M est l'aimantation) en fonction de la température, mesurée sur le composé monocristallin $CeCu_{5.9}Au_{0.1}$ en présence d'un champ magnétique B appliqué perpendiculairement au plan principal. La ligne pleine indique un fit des données expérimentales par la fonction $\chi = \chi_0(1 - \alpha\sqrt{T})$ (d'après la référence [46]).

été observé dans la phase normale des oxydes supraconducteurs à haute température critique [41, 42].

Le premier composé dit de fermions lourds a été étudié en 1975 par K. Andres, J. E. Graebner, and H. R. Ott, il s'agit de $CeAl_3$ [43]. La famille de ces composés est constituée aujourd'hui de plusieurs dizaines de systèmes différents. Ces systèmes contiennent des impuretés magnétiques, sous la forme d'ions de terres rares comme le Cérium (Ce) et l'Ytterbium (Y) ou d'actinides comme l'Uranium (U). Ils sont caractérisés par la présence d'une orbitale f partiellement remplie. La dénomination de *fermions lourds* vient du fait que ces composés présentent une masse effective déterminée à partir des mesures de chaleur spécifique très élevée, plusieurs centaines voire milliers de fois supérieure à la masse de l'électron libre. Les composés de fermions lourds peuvent être classés suivant leurs propriétés de basses énergies [44]. Par exemple, $CeCu_6$ reste paramagnétique jusqu'à très basses températures, $CeAl_2$ présente un ordre magnétique et $CeCu_2Si_2$ un état supraconducteur. Lorsque ces composés sont portés à une température supérieure à la température de transition correspondante, ils présentent pour la plupart d'entre eux un comportement métallique conventionnel, d'autres en nombre très restreint étant des isolants. A hautes températures, typiquement à 100 °K et au-delà, la susceptibilité magnétique suit une loi de Curie-Weiss, indiquant un comportement de moments localisés libres.

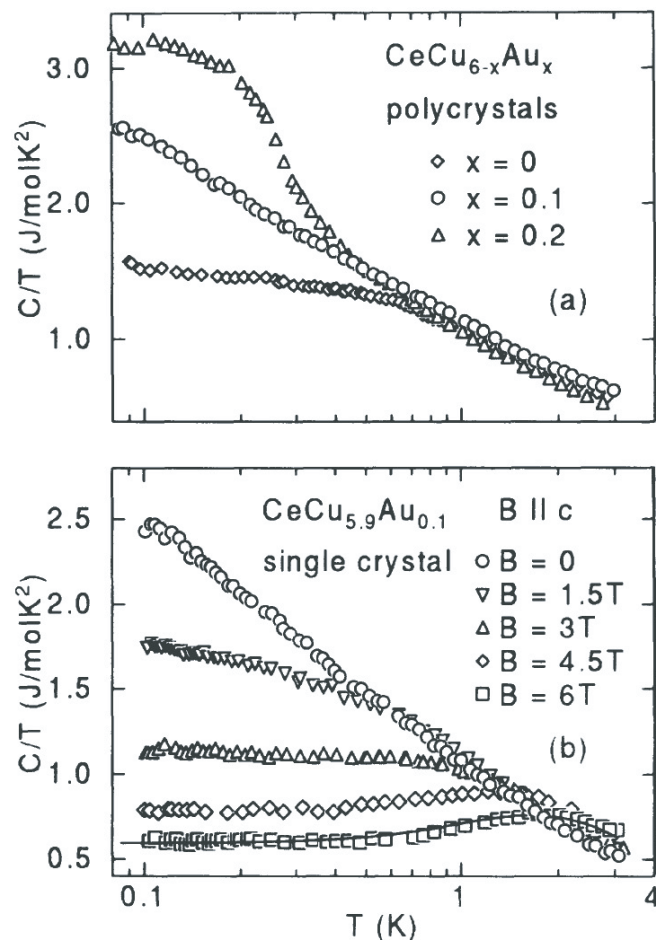


FIG. 8 – (a) Contribution linéaire C/T de la dépendance thermique de la chaleur spécifique C en fonction de la température, représentée en échelle semi-logarithmique. Les mesures ont été effectuées sur des polycristaux de $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$, à trois valeurs différentes du dopage x , à champ magnétique nul. (b) Idem à (a), pour un monocristal de $\text{CeCu}_{5.9}\text{Au}_{0.1}$, soumis à un champ magnétique B appliqué suivant la direction perpendiculaire au plan principal (d'après la référence [46]).

En 1991, Seaman *et al.* [45] ont obtenu des résultats sur le composé $\text{Y}_{1-x}\text{U}_x\text{Pd}_3$ (YPd_3 dopé à l'Uranium) en désaccord complet avec les prédictions de la théorie des liquides de Fermi. Ce comportement qualifié de *non liquide de Fermi* a depuis été observé dans de nombreux autres composés de fermions lourds lorsqu'ils sont dopés, soumis à une pression ou à un champ magnétique. Nous présentons sur les Figures 6 - 8 les résultats de mesures effectuées par le groupe d'Hilbert von Löhneysen sur $\text{CeCu}_{5.9}\text{Au}_{0.1}$ à basses températures [46]. A champ magnétique nul, la résistivité est caractérisée par une dépendance linéaire avec la température, $\rho = \rho_0 + A'T$, et la chaleur spécifique C suit une loi logarithmique en température, $C/T \sim -\ln(T/T_0)$. La susceptibilité magnétique χ obéit à une loi du type $\chi = \chi_0(1 - \alpha\sqrt{T})$.

La compréhension de l'origine de ce comportement non liquide de Fermi est un problème ouvert, qui suscite actuellement une intense activité scientifique. La recherche de modèles théoriques permettant de décrire le comportement non liquide de Fermi constitue aujourd'hui un enjeu important en physique de la matière condensée. Les modèles Kondo sont à nouveau extrêmement étudiés. En effet, dès 1980, Nozières et Blandin ont montré que la physique de l'effet Kondo multicanal [16], prenant en compte la structure orbitale des électrons situés sur le site de l'impureté, n'est plus décrite par un point fixe de couplage fort dès que le nombre de canaux de conduction est suffisant pour permettre un *sur-écranage* du spin de l'impureté par les spins des électrons de conduction. La physique sous-jacente est donc très différente de celle caractérisant le modèle $s - d$ décrit plus haut. Comme nous le verrons plus loin, le comportement du système correspondant à une impureté magnétique sur-écranée est décrit par un *point fixe de couplage intermédiaire*. Dans ce cas, le point fixe de couplage fort présente une *instabilité*. Un point fixe de couplage intermédiaire est en général associé à un spectre d'excitations de type non liquide de Fermi, ce qui fait des modèles d'impuretés Kondo de très bons candidats afin d'étudier les composés de fermions lourds. Le modèle habituellement considéré est le réseau Kondo [47], dans lequel des impuretés magnétiques situées aux nœuds d'un réseau sont en interaction non seulement avec les électrons de conduction, mais également entre elles via par exemple un couplage RKKY. Cependant, notamment dans le cas des alliages d'impuretés diluées à faible concentration, les modèles à une impureté permettent également de déduire de nombreuses informations concernant les propriétés du système.

Malgré son intérêt théorique certain, le modèle Kondo multicanal suppose des symétries qui jusqu'à présent n'ont jamais été mises en évidence dans les systèmes expérimentaux. Il est donc pertinent d'étudier des modèles Kondo de nature différente, afin de comprendre si la présence d'autres degrés de liberté à définir peut permettre l'existence d'un point fixe de couplage intermédiaire.

Récemment, le champ d'application des modèles Kondo a été étendu également à des systèmes mésoscopiques, constitués d'une boîte quantique située entre deux réservoirs métalliques [48, 49, 50]. Ce problème nouveau, en plein essor, ne sera pas abordé ici.

Physique de la supraconductivité à haute température critique

Le premier système supraconducteur à haute température critique a été synthétisé par Georg J. Bednorz et Alex K. Müller à la fin de l'année 1986 [51]. Il s'agissait du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, présentant une transition supraconductrice à $T_C \simeq 40$ °K. Cette découverte a fortement surpris la communauté scientifique. En effet, depuis la découverte de la supraconductivité conventionnelle [52] en 1911 dans le mercure ($T_C \simeq 4.2$ °K) jusqu'à la fin 1986, la plus haute température critique observée avait progressé de moins de 20 °K, malgré de nombreux efforts développés notamment dans le domaine de la chimie des matériaux. Cette situation expérimentale était en accord avec les prédictions théoriques. Entre 1956 et 1957, John Bardeen, Leon N. Cooper et John R. Schrieffer ont développé une théorie microscopique de couplage faible permettant d'expliquer la supraconductivité conventionnelle

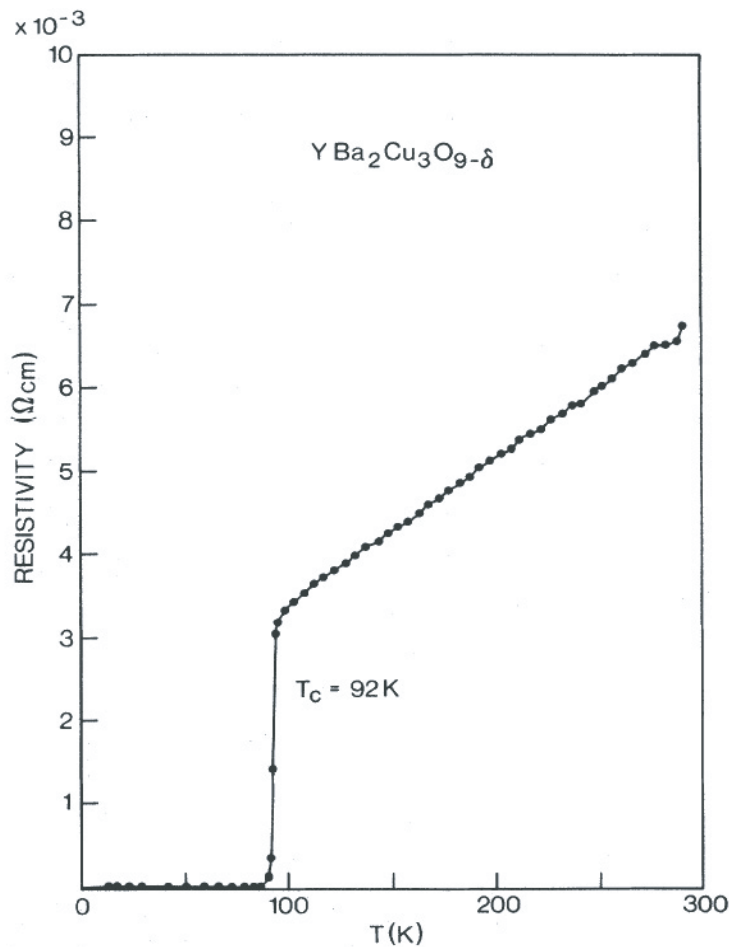


FIG. 9 – Résistivité en fonction de la température, mesurée dans le composé $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (d'après la référence [60]).

en terme d'un appariement des électrons de conduction situés au voisinage de la surface de Fermi [53, 54]. Cet appariement, médié par les vibrations du réseau cristallin autrement dit les phonons, provoque la formation d'états liés entre deux électrons, appelés *paires de Cooper*, qui déstabilisent la surface de Fermi. Cette théorie, dont les auteurs ont été récompensés par le prix Nobel de physique en 1972, est depuis lors connue sous le nom de *théorie BCS*. Mac Millan a ensuite réussi à établir l'expression de la température de transition supraconductrice en fonction des paramètres de la théorie, notamment le couplage électron-phonon [55]. Compte tenu des valeurs du couplage électron-phonon mesurées expérimentalement, ses résultats ne permettaient pas d'espérer l'obtention de températures critiques plus élevées. Le supraconducteur conventionnel Nb_3Ge présentant la plus haute température critique ($T_C \simeq 23.2 \text{ °K}$) a été découvert en 1973 [56], et dans ce contexte les activités liées à la recherche de systèmes présentant une transition supraconductrice à température plus élevée se sont considérablement ralenties.

Au milieu des années 80, des composés d'oxydes de métaux de transition de la famille

de La_2CuO_4 ont été synthétisés [57]. Ils sont caractérisés par un comportement métallique, qui est très inattendu car les composés de ce type sont habituellement des isolants de Mott, les électrons d de l'ion de transition (ici le cuivre) étant localisés par les corrélations électroniques. Il est possible que les propriétés conductrices observées dans ces systèmes soient provoquées par une hybridation importante de la bande d du cuivre avec la bande p de l'oxygène. Une phase supraconductrice a finalement été détectée dans un composé dopé au strontium de cette famille, à la fin de l'année 1986. La température critique mesurée de 40 K, environ deux fois plus élevée que la plus haute température critique observée auparavant, a suscité d'intenses recherches sur le plan international, afin de synthétiser d'autres composés du même type. Cette voie nouvelle s'est très vite avérée extrêmement fructueuse. En 1987, le composé $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ présentant une transition supraconductrice à $T_C \simeq 92$ K est découvert [58] (voir la Figure 9), suivi l'année suivante par $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ ($T_C \simeq 125$ K)[59]. Bednorz et Müller ont reçu pour leurs travaux le prix Nobel de Physique en 1987. Une présentation très détaillée de ces découvertes est donnée dans leur article de revue, référence [60], ainsi que dans le livre de Plakida [61].

Ces matériaux supraconducteurs, présentant une température critique bien plus élevée que ne le prévoit la théorie BCS de la supraconductivité conventionnelle, sont regroupés sous l'appellation de *cuprates*. Ils ont tous en commun une structure cristallographique de type pérovskite. Ils présentent un empilement bidimensionnel d'octaèdres formés d'atomes d'oxygène, au centre desquels se trouve un atome de cuivre. Chacun de ces octaèdres est relié par quatre de ses sommets aux octaèdres voisins, ce qui constitue les plans de cuivre-oxygène CuO_2 . Il est maintenant clair que ces plans de CuO_2 jouent un rôle très important, ce qui confère aux supraconducteurs à haute température critique un fort caractère quasi-bidimensionnel très nouveau. A titre d'illustration, nous reportons sur la Figure 10 la structure du composé La_2CuO_4 . Dans ce système, les plans de CuO_2 sont séparés par deux couches de LaO . Ces plans de LaO constituent des réservoirs de charges pour les plans de CuO_2 .

Les propriétés de transport de ces systèmes sont considérablement modifiées lorsqu'on joue sur le nombre d'électrons par dopage. On peut ajouter ou bien enlever des électrons, ce qui définit deux familles, les cuprates dopés en électrons (de type n) et ceux dopés en trous (de type p). Une transition supraconductrice à haute température critique est observée dans les deux cas. Néanmoins nous n'avons étudié que le cas des composés dopés en trous. Nous nous restreindrons donc à ce cas dans la suite. Une question primordiale a été d'établir le diagramme de phase des cuprates, en fonction de la composition chimique et de la température. A dopage nul, ces systèmes présentent un fort caractère isolant typique des isolants de Mott : il existe un gap de charge sur les atomes du cuivre de l'ordre de 1.5 – 2 eV, résultant des fortes corrélations électroniques. Les atomes de cuivre des plans de CuO_2 sont dans un état d'oxydation Cu^{2+} de spin 1/2. Ces spins sont ordonnés suivant une structure antiferromagnétique stable en-dessous d'une température de Néel T_N , avec $T_N \simeq 250$ K pour La_2CuO_4 . Lorsque le composé est dopé avec une concentration x en trous, une phase supraconductrice apparaît lorsque $x \simeq 0.05$, juste après la disparition de l'état antiferromagnétique. La température critique est maximale pour $x \simeq 0.15$. Lorsque le dopage est accru, T_C décroît jusqu'à s'annuler, à $x \simeq 0.40$ dans $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Quand

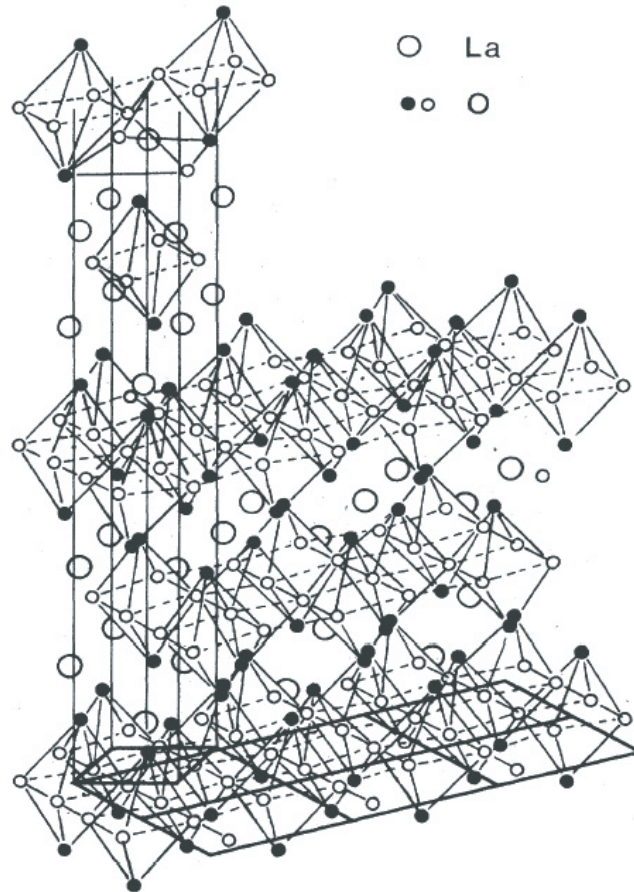


FIG. 10 – *Structure orthorhombique du composé La_2CuO_4 . Les grands cercles vides représentent les atomes de lanthane, tandis que les petits cercles, vides et pleins, indiquent les atomes d'oxygène. Un atome de cuivre, non représenté, se trouve au centre de chacun des octaèdres d'atomes d'oxygène (d'après la référence [60]).*

le dopage est encore plus élevé ($x > 0.7 - 0.9$), on entre dans le régime dit surdopé, pour lequel un comportement métallique de type liquide de Fermi est progressivement rétabli à basses températures. Un diagramme de phase caractéristique des cuprates dopés en trous est représenté sur la Figure 11.

La compréhension de l'origine physique de la supraconductivité à haute température critique est encore un problème ouvert, qui constitue actuellement un des grands enjeux de la physique de la matière condensée. Il est maintenant établi que la formation de paires de Cooper s'opère dans les cuprates. Une question d'importance est de déterminer si le mécanisme gouvernant ce phénomène est de type conventionnel, comme un couplage électron-phonon exceptionnellement fort, ou bien s'il s'agit d'un mécanisme entièrement nouveau, provoqué par exemple par les interactions magnétiques. Certaines théories considèrent que le modèle BCS constitue un point de départ pertinent afin d'étudier la phase supraconductrice des cu-

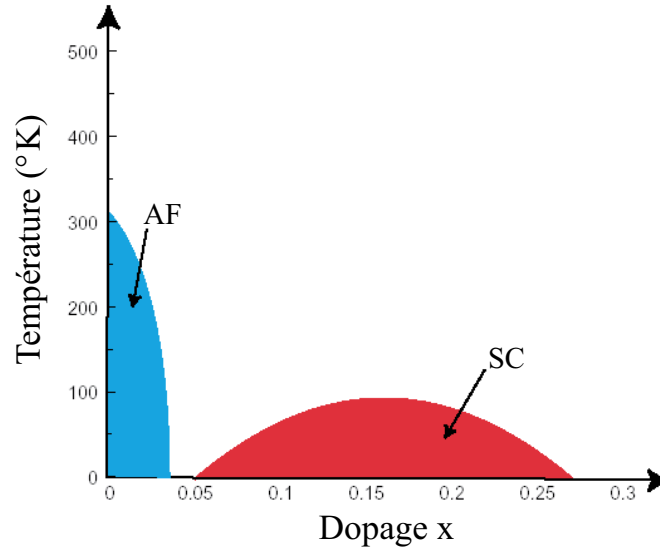


FIG. 11 – Diagramme de phase des cuprates dopés positivement, en fonction de la température et du dopage chimique en trous x .

prates [62, 63, 64]. La phase normale est décrite par un liquide de Fermi bidimensionnel, et l'instabilité supraconductrice provoquée par un couplage électron-phonon. L'existence d'une singularité de Van Hove dans la densité d'états, résultant du caractère quasi-bidimensionnel de ces matériaux, modifie l'expression de la température critique obtenue par Mac Millan et permet de prédire des valeurs plus élevées. Un calcul microscopique utilisant les paramètres de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ permet d'obtenir $T_C \simeq 30 - 40$ K. Cependant il semble difficile dans ces théories d'expliquer l'existence de températures critiques supérieures à 100 K, comme cela a été mesuré expérimentalement dans plusieurs composés.

Une toute autre approche théorique consiste à supposer que la formation des paires de Cooper résulte d'interactions de nature magnétique. Nous nous sommes placés dans ce cadre, comme on le verra dans la troisième partie. Cette idée semble pertinente, dans la mesure où le diagramme de phase (voir Figure 11) fait apparaître une proximité des phases antiferromagnétique et supraconductrice à basses températures. La question de savoir si elles coexistent ou non n'est d'ailleurs toujours pas résolue, en tout cas pour certains cuprates. Les phénomènes magnétiques doivent être abordés en tenant compte de la très forte répulsion coulombienne entre les électrons existant dans ces systèmes. En effet dans les composés purs comme La_2CuO_4 , la bande formée par les orbitales $3d_{x^2-y^2}$ des atomes de cuivre est à demi-remplie. Le système devrait donc d'après la théorie des bandes se comporter comme un bon métal. Or ces composés sont des isolants antiferromagnétiques. Ce phénomène s'explique par la localisation des électrons provoquée par la répulsion coulombienne qui est trop forte pour permettre une description de ces systèmes par la théorie des bandes. Il est connu sous le nom de localisation de Mott.

L'état normal des cuprates, observé lorsque $T > T_C$, suscite également de nombreuses

interrogations car il ne peut pas être décrit dans le cadre de la théorie des liquides de Fermi [41, 42]. Ce problème, lui aussi porteur d'une physique très riche, ne sera pas abordé ici.

Plan

La première partie est consacrée à l'étude d'un modèle Kondo à un canal d'électrons de conduction et une impureté dont le spin est caractérisé par une représentation mixte du groupe $SU(N)$, combinant des degrés de liberté bosoniques et fermioniques. Nous discutons le comportement du système, suivant la nature du point fixe de couplage fort du modèle considéré. Nous développons une théorie de perturbation au second ordre en t (où t est l'intégrale de recouvrement des électrons de conduction entre deux sites voisins) au voisinage du point fixe de couplage fort, suivant la méthode établie par Nozières et Blandin [16]. Nous montrons que le point fixe de couplage fort peut être stable ou instable, suivant le régime considéré de représentations mixtes du spin de l'impureté. Contrairement aux modèles Kondo étudiés précédemment, l'instabilité du point fixe de couplage fort ne résulte pas de l'introduction de degrés de liberté supplémentaires, comme la prise en compte d'une multiplicité de canaux de conduction électroniques ou d'un couplage anisotrope, mais est due au contraire aux propriétés intrinsèques de symétrie du spin de l'impureté. Nous montrons également que l'apparition de cette instabilité est reliée au changement de caractère, de répulsif à attractif, de l'interaction effective de charge entre le moment localisé écranté par les électrons de conduction dans la limite de couplage fort et les électrons de conduction situés sur les sites voisins. Dans le régime où le système est décrit par un point fixe de couplage fort, l'interaction effective de charge est répulsive, ce qui signifie que l'impureté écrantée a tendance à repousser les électrons de conduction situés sur son site voisin. A l'inverse lorsque le point fixe de couplage fort est instable, l'interaction devient attractive et l'impureté écrantée a tendance à accumuler les électrons de conduction sur son site voisin.

Dans la deuxième partie, nous poursuivons l'étude du modèle Kondo précédent, en le généralisant au cas multicanal. Nous analysons le point fixe de couplage intermédiaire, décrivant la physique du système dans le cas où le point fixe de couplage fort présente une instabilité. Nous supposons que ce point fixe de couplage intermédiaire se situe, au moins pour certaines classes de représentations du spin de l'impureté, au voisinage du point fixe associé au système libre caractérisé par un couplage Kondo nul. Nous développons alors une méthode basée sur le groupe de renormalisation formulé suivant une approche perturbative, afin de déterminer la fonction d'échelle β caractérisant le flot de renormalisation et permettant d'identifier le point fixe de couplage intermédiaire. Nous utilisons pour cela un formalisme d'intégration fonctionnelle, permettant de dériver la fonction de partition dans un calcul de perturbations aux premiers ordres du couplage Kondo. Les propriétés de basses énergies caractérisant le système sont également établies. Nous présentons les résultats du calcul de l'exposant critique universel, déterminant le comportement à basses températures des différentes quantités physiques, pour plusieurs types de représentations du spin de l'impureté.

La troisième partie, indépendante des deux précédentes, présente une approche de la su-

praconductivité à haute température critique des cuprates dopés en trous, mettant en œuvre des phénomènes magnétiques. Nous étudions l'instabilité supraconductrice pouvant résulter de la coexistence de deux mécanismes. Le premier est associé à la formation d'une onde de densité de spin, résultant de l'échange de fluctuations de spin dans un état presque antiferromagnétique. Il a été introduit par John R. Schrieffer, Xiao-Gang Wen et Shoucheng Zhang dans le cadre de la théorie de «spin-bag» [65]. Le second repose sur un mécanisme de résonance de liaison de valence (RVB), supposant la formation d'un singulet de spin dans les plans de CuO_2 via un terme d'interaction d'échange de Heisenberg. Il a été proposé par Philip Warren Anderson [66]. Ces deux approches, proposées juste après la découverte des composés supraconducteurs à haute température critique et qualitativement très différentes, ont été considérablement étudiées de façon indépendante. Toutes les deux prédisent l'apparition d'une phase supraconductrice en dehors du demi-remplissage. Cependant la relation entre les deux approches constitue un problème ouvert, qui est resté pendant plusieurs années purement académique. Cette question est cependant réapparue récemment, des études numériques suggérant fortement que les deux mécanismes, d'onde de densité de spin antiferromagnétique et de résonance de liaison de valence, coexistent non seulement dans un isolant de Mott mais également dans un système caractérisé par un dopage faible. Une question importante est de déterminer lesquelles des fluctuations antiferromagnétiques ou des corrélations RVB prédominent. Une autre question est de savoir si la coexistence des deux mécanismes provoque ou non l'apparition d'une phase supraconductrice. Nous avons développé une théorie de champ moyen, permettant de prendre en compte la coexistence entre les deux phénomènes. Grâce à un formalisme d'intégration fonctionnelle, nous dérivons le potentiel effectif de type BCS responsable de l'appariement entre quasiparticules dans un traitement au niveau RPA («random phase approximation») des fluctuations des différents champs, suivant l'approche proposée dans la théorie de spin-bag. Nous discutons également la symétrie du gap supraconducteur.

Partie I

Instabilité du point fixe de couplage fort d'un modèle Kondo généralisé

A. Jerez, M. Lavagna, and D. Bensimon,
"Strong-coupling fixed point instability in a single-channel $SU(N)$ Kondo model",
Physical Review B, Vol. **68**, no. 9, pp. 094410-1 - 094410-24, September 2003.

M. Lavagna, A. Jerez, and D. Bensimon,
"Instability of the Fermi liquid fixed point in an extended Kondo model",
in *Concepts in Electron Correlation, Proceedings of the ARW NATO Workshop Hvar, Croatia, October 2002*, edited by A. C. Hewson and V. Zlatić,
NATO SCIENCE SERIES: II, Vol. **110**, pp. 219 - 227,
Kluwer Academic Publishers, May 2003.

Chapitre 1

Introduction

Des expériences récentes effectuées sur les composés de fermions lourds ont mis en évidence l'existence d'une transition de phase quantique [67] entre un état magnétiquement désordonné et un état présentant un ordre magnétique à longue distance. Cette transition de phase quantique est induite par un changement de composition chimique, l'application d'une pression ou d'un champ magnétique. Une revue exhaustive de la situation expérimentale concernant les composés de fermions lourds se trouve dans l'article de Stewart [44]. De façon très inhabituelle, le comportement du système dans la phase désordonnée près du point critique quantique (QCP) diffère radicalement de celui prédit par la théorie des liquides de Fermi [2, 3], qui décrit très bien les propriétés des métaux conventionnels. Un tel comportement est qualifié de non-liquide de Fermi (NFL).

Par exemple, les composés $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ [46, 68] et $(\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x)\text{Ru}_2\text{Si}_2$ [69] présentent une transition antiferromagnétique, à $x_c = 0.1$ et $x_c = 0.08$ respectivement. Loin du QCP, la phase magnétiquement désordonnée suit un comportement de type liquide de Fermi caractérisé par une masse effective élevée des électrons. Cependant près de la transition (toujours dans la phase désordonnée) les quantités physiques présentent une dépendance en température de type NFL. Ainsi dans le composé $\text{CeCu}_{5.9}\text{Au}_{0.1}$ [68] (cf. Figures 6 - 8 de l'introduction générale), la chaleur spécifique C suit une loi du type $C/T \sim -\ln(T/T_0)$, la susceptibilité magnétique χ se comporte comme $\chi \sim 1 - \alpha\sqrt{T}$, et la résistivité varie linéairement avec la température $\Delta\rho \sim T$. Les lois prédites par la théorie des liquides de Fermi sont très différentes. Nous les rappelons ici : $C/T \sim \chi \sim \text{Const.}$, $\Delta\rho \sim T^2$. Dès lors que l'ordre magnétique est instauré, l'effet de la pression ou du champ magnétique appliqué est de ramener le système dans une phase magnétique désordonnée, dont le comportement est celui d'un liquide de Fermi. Des résultats similaires ont été observés dans de nombreux autres composés. On peut citer YbRh_2Si_2 [70], CeNi_2Ge_2 [71], $\text{CeCu}_2(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_2$ [72], CeIn_3 , CePd_2Si_2 [73], et $\text{U}_{1-x}\text{Y}_x\text{Pd}_3$ [45]. La brisure de la théorie des liquides de Fermi observée dans ces composés pose des questions fondamentales, avec l'existence éventuelle de nouveaux états de la matière condensée, caractérisés par des excitations élémentaires d'un nouveau type résultant de la présence de fortes corrélations électroniques.

Du point de vue théorique deux scénarios sont actuellement en compétition pour décrire les transitions de phase quantiques. Le premier est le scénario de type magnétisme itinérant, le second proposé plus récemment repose sur une description localement critique.

Dans le cas du magnétisme itinérant, les quasiparticules constituant le liquide de Fermi sont encore présentes au voisinage du QCP. La théorie se concentre alors sur l'étude près de la transition des fluctuations du paramètre d'ordre à faible fréquence et grande longueur d'onde (ω et \mathbf{q} faibles). Elle a été développée en utilisant les techniques du groupe de renormalisation [74, 75, 76] ou la théorie auto-cohérente des fluctuations de spin [77]. Plus récemment ces approches ont été étendues à l'étude du réseau Kondo [78], qui est considéré comme le modèle microscopique le plus pertinent [47] pour décrire les composés de fermions lourds. Dans tous les cas, on se ramène à une théorie des champs en Φ^4 [79, 80] dont la dimension effective est $d_{eff} = d + z$, où d est la dimension spatiale et z l'exposant dynamique. Expérimentalement, d_{eff} est au-dessus de sa valeur critique supérieure égale à 4, puisque d vaut 2 ou 3, tandis que z varie entre 2 et 3 suivant que les fluctuations de spin sont alternées ou uniformes. Par conséquent le système est décrit par un point fixe gaussien [81], caractérisé par une dépendance en température anormale de C/T et de $a = \Delta\rho/T$ (a constante). Cependant les prédictions découlant de cette approche ne permettent pas d'expliquer le comportement NFL observé expérimentalement.

Le second scénario dit des modes critiques locaux a été motivé par des résultats récents obtenus par des expériences de diffusion inélastique de neutrons réalisées sur le composé $\text{CeCu}_{5.9}\text{Au}_{0.1}$. La partie imaginaire de la susceptibilité dynamique de spin $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ près du vecteur d'instabilité magnétique \mathbf{Q} suit une loi d'échelle anormale en ω/T en fonction de la température [82, 83]: $\chi''(\mathbf{Q}, \omega) \sim T^{-\alpha}g(\omega/T)$, avec un exposant α de l'ordre de 0.75. De plus, cette dépendance en ω et T persiste sur l'ensemble de la zone de Brillouin. Cette observation suggère fortement que la dynamique de spin n'est pas critique seulement aux grandes longueurs d'onde mais aussi aux échelles de longueur atomiques [84, 85], contrairement à ce qui se produit dans le schéma précédent du magnétisme itinérant. A partir de ces résultats, on peut déduire que les modes critiques locaux coexistent avec les fluctuations du paramètre d'ordre de grande longueur d'onde, impliquant l'existence d'un point fixe non gaussien au-delà de la théorie en Φ^4 .

Des théories alternatives aux approches de fluctuations de spin sont nécessaires pour décrire le caractère local du QCP, caractérisé par la disparition des quasiparticules et la formation simultanée de moments localisés. Ce sujet a suscité un grand intérêt ces dernières années, avec notamment la considération de modèles Kondo à une impureté couplée soit à un bain fermionique de gap mou, soit à un ensemble de deux bains fermioniques et bosoniques. Le premier modèle appelé «soft gap model» correspond à un bain fermionique dont la densité d'états s'annule au niveau de Fermi suivant une loi de puissance, $\rho(\epsilon) \sim |\epsilon|^r$, $r > 0$. Les fluctuations des moments localisés conduisent alors à un QCP entre une phase de couplage fort marquée par un écrantage Kondo complet, et une phase de moments localisés. Le QCP est caractérisé par un comportement non trivial du système, comme par exemple une loi d'échelle de la susceptibilité dynamique de spin $\chi''(\omega) \sim g(\omega/T)$ [88]. Le second type de modèle correspond à une impureté couplée à des bains bosoniques et fermioniques, où les bosons représentent les excitations collectives de spin [85]. Les excitations bosoniques sont sans gap au voisinage du QCP, et la densité spectrale suit une loi de puissance en ω . Ce modèle conduit à une suppression de l'effet Kondo due aux fluctuations critiques de moments locaux avec la formation d'une phase de moments localisés. Des calculs récents

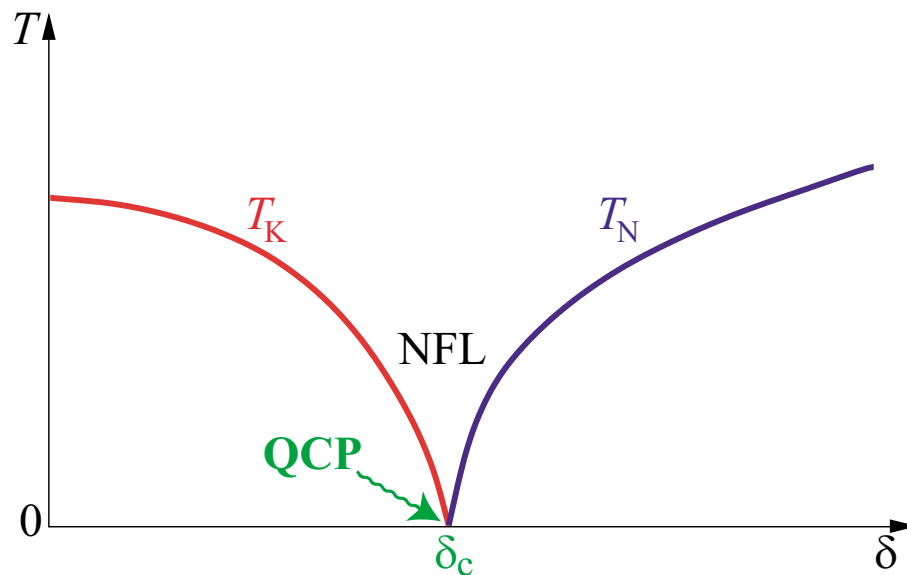


FIG. 1.1 – *Diagramme de phase du réseau Kondo, prédit par le scénario d'un point critique quantique (QCP) présentant des modes critiques locaux, en fonction de la température T et du paramètre δ correspondant au rapport de l'interaction de couplage RKKY entre impuretés Kondo à l'échelle d'énergie Kondo T_K . Les degrés de liberté locaux et étendus dans l'espace coexistent dans le régime du QCP. La caractéristique essentielle de cette approche est que T_K et la température de Néel T_N s'annulent au point critique quantique δ_c (d'après la référence [85]).*

utilisant le groupe de renormalisation numérique ou l'approche de champ moyen dynamique [85] indiquent l'existence de loi d'échelle en ω/T pour la dépendance thermique de la susceptibilité de spin au voisinage du QCP. Une mise au point sur ces sujets est faite dans l'article de revue de Bulla et Vojta [86].

D'autres théories sont apparues pour décrire la formation des modes critiques locaux. Elles reposent notamment sur des concepts de supersymétrie [90, 91, 92, 93]. Dans le cadre de ces théories, le spin est décrit par une représentation mixte en termes de bosons et de fermions. L'intérêt de la représentation mixte est de permettre la description simultanée des quasiparticules et des moments locaux, à l'aide de variables fermioniques et bosoniques de spin, respectivement. Cette approche apparaît particulièrement pertinente dans le cas du scénario de criticalité locale, pour lequel l'échelle d'énergie magnétique T_N (température de Néel) et l'échelle d'énergie de Fermi T_K (température Kondo), en-dessous de laquelle les quasiparticules disparaissent, s'annulent au point critique quantique δ_c (voir la Figure 1.1).

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction générale, un aspect important dans la discussion relative à la brisure de la théorie des liquides de Fermi est relié à la question de la stabilité du *point fixe de couplage fort* (SC, ou «strong coupling» d'après la terminologie anglaise). Alors que les approches mentionnées plus haut concernent le réseau, l'instabilité du point fixe SC peut être étudiée en considérant le modèle Kondo à une impureté. La

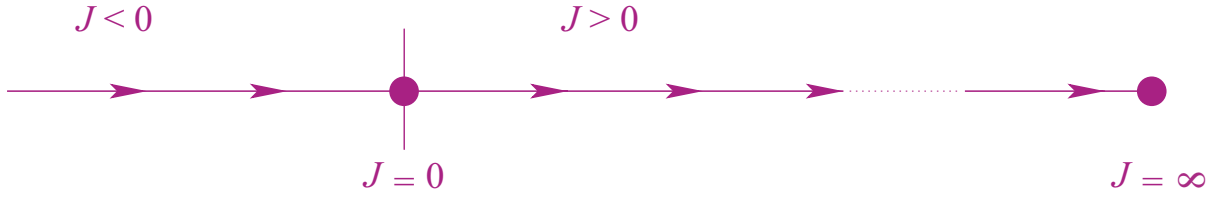


FIG. 1.2 – *Flot de renormalisation associé au modèles Kondo à un canal. Les flèches indiquent la direction du flot. Le point fixe du système d'électrons libres ($J = 0$) est stable par rapport à une interaction de spin ferromagnétique. Dans le cas du modèle Kondo antiferromagnétique, le flot de renormalisation atteint le point fixe de couplage fort ($J = \infty$) et le système suit un comportement de type liquide de Fermi.*

source d'instabilité traditionnelle du point fixe SC associé au modèle Kondo à une impureté est la présence de plusieurs canaux d'électrons de conduction, définissant le modèle Kondo multicanal [16]. Ce modèle donne lieu à l'existence de deux régimes, sous-écranté et sur-écranté, marqué par un comportement très différent du système du système dans chacun des cas. Cependant des travaux récents [92, 93] ont montré que le modèle Kondo à une impureté peut également conduire à une instabilité du point fixe de couplage fort même dans le cas à un seul canal d'électrons de conduction dès lors qu'on considère l'impureté avec un spin généralisé dans le groupe de symétrie $SU(N)$.

Afin de fixer les idées, nous commençons par rappeler quelques résultats concernant le modèle Kondo antiferromagnétique à un spin d'impureté de symétrie $SU(2)$ et un canal d'électrons de conduction. Par une analyse basée sur les méthodes du groupe de renormalisation [14, 24, 25, 94] on peut montrer que le couplage Kondo J suit un *flot de renormalisation* jusqu'au point de couplage fort, caractérisé par une interaction Kondo infinie (cf. Figure 1.2). Ces concepts issus de la théorie de la renormalisation, que nous avons déjà évoqués dans l'introduction générale, seront développés plus en détail au cours du chapitre 6 constituant l'introduction à la deuxième partie. La *fonction d'échelle* β gouvernant le flot de renormalisation est donnée par l'équation suivante.

$$\beta(J\rho) = \frac{d(J\rho)}{d(\ln D)} = -(J\rho)^2 \quad (1.1)$$

où ρ est la densité d'états des électrons de conduction. Le système suit le flot de renormalisation jusqu'à atteindre le point fixe de couplage fort ($J = \infty$), qui est stable. Ce point fixe est associé à un comportement de type liquide de Fermi local [28, 29].

La situation est très différente lorsqu'on considère un modèle comportant plusieurs canaux électroniques. Dans le cas d'un spin S_{imp} d'impureté couplé par une interaction Kondo aux électrons de conduction répartis dans K canaux, Nozières et Blandin [16] ont montré que le modèle Kondo multicanal conduit à deux régimes très différents, suivant les valeurs de K et de $2S_{imp}$ (voir la Figure 1.3). Leur calcul est basé sur une théorie de perturbation autour du point fixe SC, au deuxième ordre en l'amplitude de saut t des électrons de conduction entre deux sites voisins. Ils en déduisent un couplage Kondo effectif J_{eff} entre le spin du

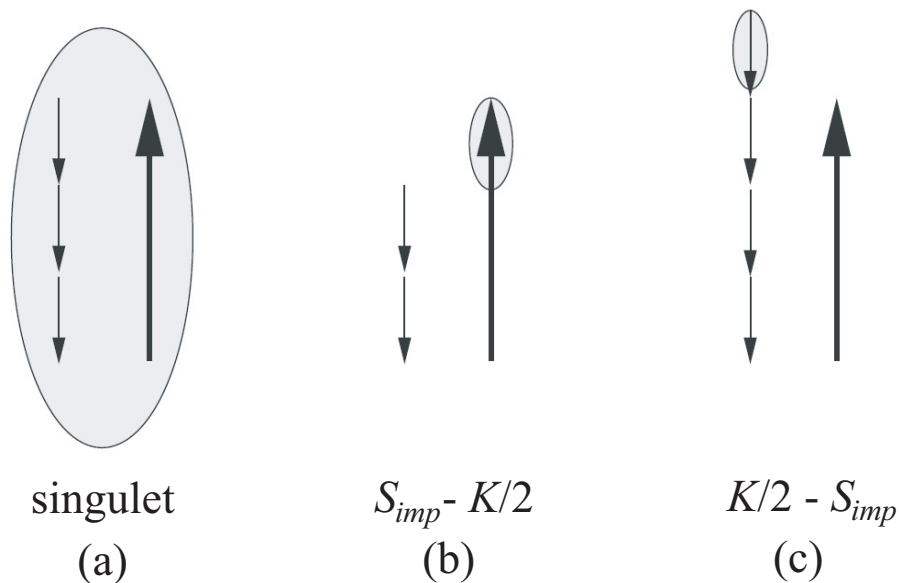


FIG. 1.3 – Les points fixes de couplage fort du modèle Kondo multicanal (a) écranté, (b) sous-écranté, (c) sur-écranté.

composite formé par l'impureté écrantée par les électrons de conduction dans la limite de couplage fort, et le spin des électrons de conduction sur le site voisin. Ils peuvent alors effectuer le même d'analyse du groupe de renormalisation, comme indiqué par l'équation (1.1). Dans le régime sous-écranté ($K < 2S_{imp}$), le couplage effectif dérivé est ferromagnétique et le point fixe SC est par conséquent stable. Il correspond à la formation d'un spin effectif ($S_{imp} - 1/2$) résultant de l'écrantage du spin de l'impureté par les électrons de conduction situés sur le même site. Le système est décrit par le point fixe SC, et présente un comportement du type liquide de Fermi local. Au contraire dans le régime sur-écranté ($K > 2S_{imp}$), le couplage effectif est antiferromagnétique et le point fixe SC est par conséquent instable (cf. Figure 1.4). L'instabilité du point fixe SC indique l'existence d'un *point fixe de couplage intermédiaire*. Par la suite, ce point fixe de couplage intermédiaire a du être étudié en recourant à d'autres méthodes [95, 96, 97]. Il est maintenant clairement établi que l'instabilité du point fixe SC implique un spectre d'excitations NFL, caractérisé par une entropie résiduelle anormale à température nulle.

Il a été récemment proposé que d'autres sources d'instabilité du point fixe SC pouvaient exister, en dehors de la multiplicité du nombre de canaux de conduction. Des travaux [92, 93] ont montré que la présence d'un spin d'impureté Kondo de symétrie généralisée à $SU(N)$ et associé à une représentation décrite par un tableau de Young «en L» pouvait donner lieu à une instabilité du point fixe SC, déjà dans le cas d'un seul canal de conduction. La considération d'un spin représenté par un tableau de Young «en L» correspond très précisément à l'approche supersymétrique mentionnée plus haut, dans la mesure où les états et opérateurs de spin peuvent être exprimés en termes de bosons et fermions. On parle alors de représentation mixte du spin de l'impureté.

La représentation mixte offre un cadre cohérent pour étudier les deux problèmes soulevés par la brisure de la théorie des liquides de Fermi que nous avons mentionnés plus haut, à savoir l'existence de modes localement critiques et la question de l'instabilité du point fixe SC. De la même manière que les approches basées sur un développement à grand N peuvent donner un bon aperçu des systèmes réels même dans le cas d'une dégénérescence de spin finie, l'étude d'impureté de spin généralisé devrait contribuer à la compréhension de situations expérimentales plus complexes, où la coexistence entre quasiparticules et moments localisés pourrait mener à une transition de phase dès lors que l'on introduit un couplage avec d'autres impuretés (cas du réseau Kondo).

Dans cette première partie, nous étudions un modèle Kondo à un canal d'électrons de conduction et une impureté dont le spin est caractérisé par une représentation mixte «en L» du groupe $SU(N)$. Nous discutons le comportement du système, non seulement en fonction des paramètres $(2S, q)$ définissant l'impureté (voir la Figure 2.1 du chapitre suivant), mais aussi en fonction du nombre n_d d'électrons disponibles sur les sites voisins autrement dit du remplissage. Dans la limite de N grand et où la composante bosonique du spin de l'impureté est de l'ordre de N , il existe une transition autour du point $q = N/2$. En ce point, le décalage en énergie à l'ordre le plus bas en théorie de perturbation en t autour du point fixe SC est égal à $(-2t^2/J)$, indépendamment des paramètres de l'impureté q , $2S$ et N . Notre étude révèle que le diagramme de phase du système n'est pas accidentel. Il résulte d'une interaction effective de charge entre l'impureté effective écrantée dans la limite SC et les électrons de conduction situés sur les sites voisins. Lorsque $q < N/2$, cette interaction de charge est répulsive, et devient attractive dès que $q > N/2$. Le changement de comportement s'opère au point $q = N/2$, exactement où l'instabilité du point fixe SC apparaît. Autrement dit, le point fixe SC est stable dans le régime répulsif du potentiel de charge, mais devient instable quand le potentiel de charge est attractif.

Cette première partie est organisée de la façon suivante. Le chapitre 2 présente le modèle et ses principales propriétés dans la limite de couplage fort, lorsque le terme cinétique des électrons de conduction est négligé. Dans cette limite, le modèle se réduit à un problème à un site, dans lequel l'impureté est couplée à n_c électrons de conduction. Nous identifions l'état fondamental, les premiers états excités et leurs énergies respectives qui joueront un

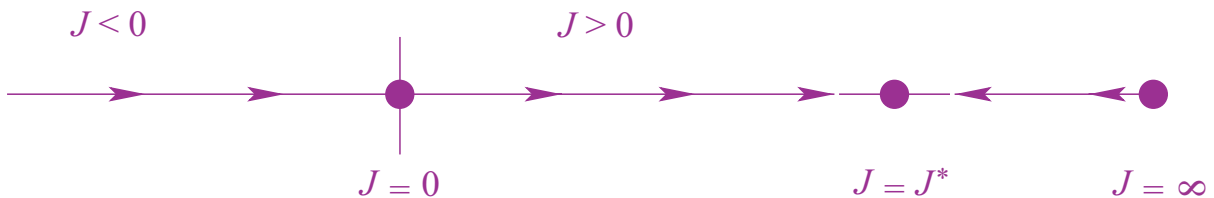


FIG. 1.4 – Flots de renormalisation associés au modèles Kondo multicanal sur-écranté. Le point fixe du système d'électrons libres ($J = 0$) est stable par rapport à une interaction de spin ferromagnétique. Dans le cas d'un couplage antiferromagnétique, le point fixe de couplage fort présente une instabilité : le système est décrit par un point fixe de couplage intermédiaire, caractéristique d'un comportement de type non-liquide de Fermi.

rôle pour dériver l'ordre le plus bas en théorie de perturbation. Nous donnons les expressions complètes de l'état fondamental et des premiers états excités, obtenus en ajoutant ou en enlevant un électron de conduction sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental. Dans le chapitre 3, nous présentons la méthode utilisée afin de discuter le caractère stable ou instable du point fixe SC. Un terme de saut t des électrons de conduction entre sites est ajouté comme une perturbation faible au couplage Kondo. Nous effectuons une analyse au second ordre en théorie de perturbation en t autour du point fixe SC, et obtenons les éléments de matrice associés en nous appuyant sur les techniques de calcul des coefficients de Clebsch-Gordan. Ces résultats nous permettent dans le chapitre 4 de calculer les décalages en énergie dus au terme de saut, puis de dériver l'hamiltonien effectif modélisant les interactions entre l'impureté écrantée située à l'origine et les électrons de conduction situés sur le site adjacent. Cet hamiltonien contient un terme de couplage effectif de spin, et une interaction effective de charge. Le signe du couplage effectif de spin J_{eff} contrôle directement la stabilité du point fixe SC. En effet, J_{eff} peut être incorporé dans les équations du groupe de renormalisation gouvernant le flot de renormalisation du système. Lorsque J_{eff} est ferromagnétique, le flot conduit le système vers le point de couplage effectif nul, $J_{eff} = 0$ et le point fixe SC s'avère stable. Cependant quand J_{eff} est antiferromagnétique, le flot éloigne le système du point fixe SC jusqu'à un point fixe de couplage intermédiaire. Le signe de l'interaction effective de charge U_{eff} nous informe sur l'effet attractif ou répulsif de l'impureté écrantée sur le site voisin. Quand le comportement du système est gouverné par le point fixe SC, i.e. $q < N/2$, l'impureté dans l'état fondamental a tendance à repousser les électrons de conduction hors de son site voisin. A l'inverse lorsque $q > N/2$, l'interaction devient attractive. Nous montrons ainsi comment le caractère de U_{eff} est relié au remplissage n_d du site voisin de l'impureté. Nous montrons également comment ce comportement est déjà présent dans le cas d'une représentation totalement antisymétrique du spin de l'impureté, et est alors une conséquence de la symétrie particule-trou $q \rightarrow N - q$. Le fait d'introduire une contribution bosonique additionnelle pour constituer l'impureté dans une représentation mixte introduit une dégénérescence supplémentaire de l'état fondamental qui conduit à une instabilité du point fixe SC dès que $q > N/2$. Nous terminons ce chapitre 4 par une discussion sur le comportement des quantités physiques dans les différents régimes. Le chapitre 5 récapitule les principaux résultats obtenus dans cette première partie, et propose des développements possibles à ce travail.

L'appendice A indique comment construire les états à deux et trois particules dans le groupe $SU(3)$. Il constitue une introduction au formalisme de la théorie des groupes utilisé, en présentant notamment les règles de composition des représentations et la méthode de calcul des coefficients de Clebsch-Gordan auxquelles nous avons largement recours dans cette première partie. L'appendice B présente les différentes représentations de spin que nous rencontrons au cours de cette étude, à savoir bosonique, fermionique et de symétrie mixte («en L»). Nous donnons en particulier les expressions complètes des états de spin de l'impureté correspondant à la représentation mixte, en montrant comment les opérateurs de spin et les états d'impureté peuvent être exprimés en terme d'opérateurs de création et d'annihilation de fermions et de bosons, soumis à deux contraintes que nous explicitons.

Chapitre 2

Définition du modèle Kondo généralisé et limite de couplage fort

Dans ce chapitre nous présentons d'abord le modèle que nous étudions. Nous décrivons ensuite son état fondamental et les excitations élémentaires qui lui sont associées dans la limite de couplage fort ($J = \infty$). En particulier nous donnons les expressions complètes des états propres.

Il nous faut en premier lieu définir les états de spin de l'impureté. Cette partie est traitée dans l'appendice B. Pour ce faire nous utilisons intensivement les règles de composition des représentations du groupe $SU(N)$. Afin de se familiariser avec ces techniques, il est recommandé de consulter préalablement l'appendice A, qui présente le formalisme nécessaire dans le cadre du groupe $SU(3)$.

2.1 Modèle Kondo $SU(N)$ à une impureté et un canal de conduction

Nous considérons un modèle Kondo généralisé à une impureté et à un canal pour les électrons de conduction. La symétrie de spin est généralisée de $SU(2)$ à $SU(N)$, à la fois pour l'impureté et les électrons de conduction. L'impureté est située à l'origine (site 0).

2.1.1 Représentation du spin de l'impureté

Le spin de l'impureté est réalisé par une combinaison de degrés de liberté fermioniques et bosoniques [92, 93]. Contrairement aux approches habituelles, ce spin est donc caractérisé par une symétrie mixte. En terme de tableau de Young [100, 101, 102, 103], il est décrit par une représentation «en L» comme illustré sur la Figure 2.1. En notant $2S$ et q le nombre de boîtes sur la première ligne et la première colonne du tableau, respectivement, la représentation associée au spin de l'impureté est notée $[2S, 1^{q-1}]$.

Les états de spin de l'impureté associés à la représentation «en L» peuvent s'écrire en utilisant une combinaison de bosons de Schwinger b [104, 105] et de pseudofermions

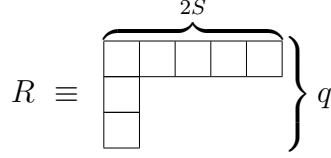


FIG. 2.1 – Description en terme de tableau de Young du spin de l'impureté, caractérisé par une symétrie mixte. Ce spin est réalisé par une combinaison de degrés de liberté fermioniques et bosoniques. La représentation indiquée ci-dessus est notée $[2S, 1^{q-1}]$.

d'Abrikosov f [106], compte tenu de la symétrie mixte. Leur construction est présentée dans l'appendice B.

2.1.2 Représentation du spin des électrons de conduction

Chacun des électrons de conduction est associé à la représentation fondamentale du groupe $SU(N)$. On décrit donc en terme de tableau de Young le spin des électrons placés à l'origine par une combinaison de boîtes simples, comme montré sur la figure 2.2. La dimension de la représentation fondamentale est N , ce qui signifie que chaque électron occupe un parmi N états de spin.

Les électrons de conduction du site 0, en interaction Kondo avec le spin de l'impureté, composent un spin électronique associé à une représentation totalement antisymétrique en raison du principe de Pauli. Les états de spin électroniques sont donc plus facilement écrits en utilisant un formalisme de pseudofermions d'Abrikosov [106], par définition anticommuteurs, que nous nommerons c (à ne pas confondre avec les pseudofermions f décrits dans la précédente section 2.1.1, associés au spin de l'impureté).

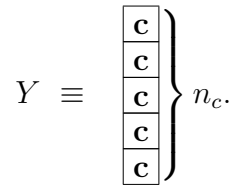


FIG. 2.2 – Description en tableau de Young du spin formé par les électrons de conduction situés sur le site de l'impureté.

2.1.3 Définition de l'hamiltonien Kondo $SU(N) \times SU(1)$

L'hamiltonien que nous étudions dans cette première partie est le suivant

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \alpha} + J \sum_{A=1}^{N^2-1} \mathbf{S}_i^A \cdot \left[\sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha}^{\dagger}(0) \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}^A c_{\beta}(0) \right], \quad (2.1)$$

où $c_\alpha^\dagger(0)$ est l'opérateur de création sur le site 0 d'un électron de conduction de moment \mathbf{k} et d'indice de spin α dans le groupe $SU(N)$ ($\alpha = a, b, \dots, r_N$), J le couplage Kondo antiferromagnétique ($J > 0$) entre les spins d'impureté et électroniques, \mathbf{S}^A les composantes du spin de l'impureté ($1 \leq A \leq N^2 - 1$), et $\tau_{\alpha\beta}^A$ les éléments de matrice des générateurs du groupe de Lie $SU(N)$ placés dans la représentation fondamentale, auxquels nous imposons la normalisation

$$Tr[\tilde{\tau}^A \tilde{\tau}^B] = \frac{\delta_{AB}}{2}. \quad (2.2)$$

Ainsi pour le groupe $SU(2)$, $\tilde{\tau}^A = \tilde{\pi}^A/2$, où $\{\tilde{\pi}^A\}$ sont les matrices de Pauli.

Par transformée de Fourier nous avons à l'origine

$$c_\alpha^\dagger(0) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_s}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger$$

où $c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger$ est l'opérateur de création d'un électron de conduction de moment \mathbf{k} et d'indice de spin α , et \mathcal{N}_s le nombre de sites du réseau.

Lorsque le spin de l'impureté est supposé dans la représentation fondamentale (i.e. $2S = q = 1$), on remarque que l'hamiltonien (2.1) se ramène à l'hamiltonien du modèle de Coqblin-Schrieffer [14, 15]. Ce modèle décrit un système d'électrons de conduction en interaction avec un spin d'impureté caractérisé par un moment angulaire j , ($N = 2j + 1$), résultant d'une combinaison entre spin et degrés de liberté orbitaux. Suivant notre notation, nous avons la correspondance $a = j$, $b = j - 1, \dots$, $r_N = -j$.

2.2 Point fixe de couplage fort

Dans la limite de couplage fort ($J = \infty$), le terme cinétique représentant les électrons de conduction peut être négligé et l'hamiltonien (2.1) se réduit au terme d'interaction Kondo

$$H = J \sum_{A=1}^{N^2-1} \mathbf{S}_i^A \cdot \left[\sum_{\alpha,\beta} c_\alpha^\dagger(0) \tau_{\alpha\beta}^A c_\beta(0) \right]. \quad (2.3)$$

2.2.1 Etat fondamental de couplage fort

Nous allons d'abord caractériser l'état fondamental $|GS\rangle$ associé à l'hamiltonien de couplage fort (2.3). L'état fondamental $|GS\rangle$ est obtenu en liant un nombre donné noté n_c d'électrons de conduction au spin de l'impureté, de façon à minimiser l'énergie Kondo.

Nous avons reporté sur la Figure 2.1 la représentation R associée au spin de l'impureté isolée, tandis que la représentation Y associée aux n_c électrons de conduction situés à l'origine est indiquée sur la Figure 2.2. Nous appelons R_{SC} la représentation caractérisant l'état fondamental dans la limite de couplage fort, R_{SC} est alors l'une des représentations résultant du produit direct $R \otimes Y$.

TAB. 2.1 – Dimension d , et valeur propre \mathcal{C}_2 de l'opérateur quadratique de Casimir, pour les représentations «en L», fondamentale, symétrique et antisymétrique. Pour la représentation «en L», $Q = (2S + q - 1)$ est le nombre total de boîtes du tableau de Young, et $Y' = (q - 2S)$ mesure l'asymétrie ligne-colonne.

	L généralisé [2S, 1 ^{q-1}]	Fondamentale [1]
d	$\left(\frac{2S}{2S+q-1}\right) C_{N+2S-1}^{2S} C_{N-1}^{q-1}$	N
\mathcal{C}_2	$\frac{Q}{2} \left(N - Y' - \frac{Q}{N}\right)$	$\frac{1}{2N}(N^2 - 1)$
	Symétrique [2S]	Antisymétrique [1 ^q]
d	C_{N+2S-1}^{2S}	C_N^q
\mathcal{C}_2	$\frac{1}{2N} [2S(2S + N)(N - 1)]$	$\frac{1}{2N} [q(N - q)(N + 1)]$

2.2.1.a Énergie de l'état fondamental

Afin de déterminer la forme du tableau de Young associé à R_{SC} , nous exprimons l'énergie Kondo en terme d'opérateurs quadratiques de Casimir du groupe $SU(N)$ [107]

$$\begin{aligned}
& J \sum_{A=1}^{N^2-1} \mathbf{S}_i^A \cdot \left[\sum_{\alpha,\beta} c_\alpha^\dagger(0) \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}^A c_\beta(0) \right] |GS\rangle \\
&= \frac{J}{2} \left[\hat{\mathcal{C}}_2(R_{SC}) - \hat{\mathcal{C}}_2(R) - \hat{\mathcal{C}}_2(Y) \right] |GS\rangle, \tag{2.4}
\end{aligned}$$

où $\hat{\mathcal{C}}_2(R)$, $\hat{\mathcal{C}}_2(Y)$ et $\hat{\mathcal{C}}_2(R_{SC})$ sont les opérateurs quadratiques de Casimir des représentations R , Y et R_{SC} . Quand $N=2$, on retrouve l'expression suivante bien connue

$$\begin{aligned}
& J \vec{\mathbf{S}}_i \cdot \left[\sum_{\alpha,\beta} c_\alpha^\dagger(0) \vec{\boldsymbol{\tau}}_{\alpha\beta} c_\beta(0) \right] |GS\rangle \\
&= \frac{J}{2} [S^{SC}(S^{SC} + 1) - S^R(S^R + 1) - S^Y(S^Y + 1)] |GS\rangle,
\end{aligned}$$

où $S(S + 1)$ est la valeur propre de l'opérateur quadratique de Casimir \hat{S}^2 , pour $N = 2$.

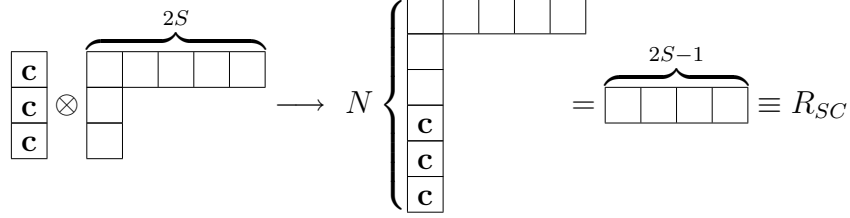


FIG. 2.3 – Description en tableau de Young de l'état fondamental de couplage fort. Chacun des électrons de conduction placés sur le site 0 est noté \mathbf{c} . On notera que la première colonne, formant un singulet, peut être supprimée.

Pour une représentation décrite par un tableau de Young paramétré par les nombres entiers $\{g_j\}$ ($1 \leq j \leq N$), où g_j est le nombre de boîtes dans la $j^{\text{ème}}$ rangée horizontale en comptant à partir du haut, la valeur propre $\mathcal{C}_2(\{g_j\})$ de l'opérateur quadratique de Casimir associé est donnée par [108]

$$\mathcal{C}_2(\{g_j\}) = \frac{1}{2} \left[\frac{Q(N^2 - Q)}{N} + \sum_{j=1}^h g_j(g_j + 1 - 2j) \right]$$

avec $Q = \sum_{j=1}^N g_j$ le nombre total de boîtes du tableau de Young. Le Tableau 2.1 reporte les expressions prises par la valeur propre de l'opérateur quadratique de Casimir, ainsi que la dimension, pour les différentes représentations associées au spin de l'impureté et des électrons de conduction étudiées au cours de cette partie.

L'énergie Kondo (2.4) est minimisée par rapport au nombre d'électrons de conduction situés sur le site de l'impureté. La minimisation définissant l'état fondamental au point de couplage fort conduit à un nombre d'électrons de conduction couplés au spin de l'impureté Kondo égal à $n_c = (N - q)$. Ceci correspond à un écrantage partiel du spin de l'impureté. Le composite qui en résulte sur le site 0, d'énergie E_0 , est constitué par l'impureté «habillée» par les électrons de conduction, de manière à former un singulet le long de la première colonne, comme indiqué sur la Figure 2.3. Notons que la première colonne, comprenant N boîtes disposées de façon antisymétrique, peut être supprimée sans modifier la représentation du fait que c'est un singulet.

Dans le groupe $SU(2)$, le point fixe de couplage fort stable correspond à un effet Kondo où le spin d'impureté est écranté partiellement, de façon à former une impureté bosonique de spin $(S - 1/2)$.

2.2.1.b Description de l'état fondamental au point fixe de couplage fort

Nous établissons ici l'expression de l'état fondamental au point fixe de couplage fort. Cet état fondamental est dégénéré. Les états du multiplet formant l'état fondamental se transforment dans une représentation complètement symétrique de $SU(N)$. Cette représentation est décrite par un tableau de Young formé de $(2S-1)$ boîtes sur la première ligne, nous la notons $[2S - 1]$ (voir la Figure 2.3).

Pour simplifier les calculs, nous choisissons de décrire le spin de l'impureté en termes de $2S$ opérateurs bosoniques et $(q - 1)$ opérateurs fermioniques. Nous aurions pu également choisir d'utiliser une base d'états décrits en terme d'une combinaison de $(2S - 1)$ bosons et q fermions, comme nous le montrons dans l'appendice B. Les résultats auraient été équivalents.

L'état de plus haut poids du multiplet de couplage fort s'écrit

$$|GS\rangle_{\{a\}aa}^{[2S-1]} = \frac{1}{\sqrt{(2S-1)!}} (b_a^\dagger)^{2S-1} |\Delta\rangle, \quad (2.5)$$

avec

$$|\Delta\rangle \equiv \frac{1}{\gamma} \mathcal{A}(b_{i_1}^\dagger (\prod_{\alpha=i_2}^{i_q} f_\alpha^\dagger) (\prod_{\beta=i_{q+1}}^{i_N} c_\beta^\dagger)) |0\rangle, \quad (2.6)$$

$$\gamma \equiv \sqrt{(2S + N - 1) C_{N-1}^{q-1}}.$$

On remarque la présence d'un terme supplémentaire C_{N-1}^{q-1} dans le facteur de normalisation γ , comparé à l'expression (B.10) décrivant l'état de spin ψ_b . Cette différence est due à la présence d'un deuxième type de fermions à l'origine, correspondant aux électrons de conduction venant écranter le spin de l'impureté à la limite de couplage fort. $|\Delta\rangle$ se transforme comme un singulet de $SU(N)$, et est annihilé par n'importe quel opérateur ascendant ou descendant, ainsi

$$T^\pm |\Delta\rangle = U^\pm |\Delta\rangle = \dots = 0.$$

Dans le cas d'un spin d'impureté totalement antisymétrique, $|\Delta\rangle$ décrit l'état fondamental de couplage fort. Cette configuration sera examinée plus loin, dans la section 4.2.2.

Les autres états du multiplet décrivant l'état fondamental de couplage fort $[2S - 1]$ sont obtenus en faisant agir les opérateurs descendants T^- et U^- sur l'état de plus haut poids (2.5), comme nous l'avons vu dans l'appendice A pour le groupe $SU(3)$. Par exemple

$$\begin{aligned} T^- |GS\rangle_{\{a\}aa} &= \sqrt{2S-1} |GS\rangle_{\{a\}ab} \\ &= (2S-1) \frac{1}{\sqrt{(2S-1)!}} b_b^\dagger (b_a^\dagger)^{2S-2} |\Delta\rangle, \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} U^- |GS\rangle_{\{a\}ab} &= |GS\rangle_{\{a\}ac} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2S-2)!}} b_c^\dagger (b_a^\dagger)^{2S-2} |\Delta\rangle, \end{aligned} \quad (2.8)$$

d'où nous identifions

$$\begin{aligned} |GS\rangle_{\{a\}ab} &= \frac{1}{\sqrt{(2S-2)!}} b_b^\dagger (b_a^\dagger)^{2S-2} |\Delta\rangle, \\ |GS\rangle_{\{a\}bb} &= \frac{1}{\sqrt{2(2S-3)!}} (b_b^\dagger)^2 (b_a^\dagger)^{2S-3} |\Delta\rangle, \\ |GS\rangle_{\{a\}ac} &= \frac{1}{\sqrt{(2S-2)!}} b_c^\dagger (b_a^\dagger)^{2S-2} |\Delta\rangle, \\ |GS\rangle_{\{a\}bc} &= \frac{1}{\sqrt{(2S-3)!}} b_b^\dagger b_c^\dagger (b_a^\dagger)^{2S-3} |\Delta\rangle. \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned}
|GS + 1\rangle^S &\equiv \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & & & & \mathbf{c} \\ \hline & & & & & \\ \hline & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & \mathbf{c} \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline \end{array} \\
|GS + 1\rangle^A &\equiv \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & & & & \\ \hline & & & & & \\ \hline & & \mathbf{c} & & & \\ \hline & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline \end{array}
\end{aligned}$$

FIG. 2.4 – Etats excités $|GS + 1\rangle^S$ et $|GS + 1\rangle^A$ comportant un électron de conduction supplémentaire sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental, $n_c = (N - q + 1)$, dans les configurations symétrique et antisymétrique, respectivement.

2.2.2 Description des états excités de couplage fort

Il existe deux types d'états excités dans le régime de couplage fort, suivant que l'état fondamental dégénéré gagne ou perd un électron de conduction sur le site de l'impureté. Notons $|GS + 1\rangle$ et $|GS - 1\rangle$ les deux types d'états excités correspondants.

Dans le premier cas de $|GS + 1\rangle$, le spin de l'électron supplémentaire peut se retrouver dans une configuration symétrique ou antisymétrique par rapport au spin de l'impureté, comme schématisé sur la Figure 2.4. Cette terminologie différenciant les deux configurations est empruntée au cas du groupe $SU(2)$, pour laquelle le spin de l'électron supplémentaire est soit parallèle, soit antiparallèle au spin de l'impureté. Nous la conservons dans le cas du groupe $SU(N)$ en parlant de configurations symétrique et antisymétrique.

Les états excités caractérisés par un électron de conduction en moins sur le site de l'impureté, notés $|GS - 1\rangle$, sont représentés sur la Figure 2.5. Il n'y a dans ce cas qu'une seule configuration (représentation) possible.

Nous allons maintenant formuler explicitement ces états excités de couplage fort.

$$|GS - 1\rangle \equiv (N - 1) \left\{ \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & & & & \\ \hline & & & & & \\ \hline & & & & & \\ \hline & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \mathbf{c} & & & & & \\ \hline \end{array} \right.$$

FIG. 2.5 – Etat excité $|GS - 1\rangle$, comportant un électron de conduction en moins sur le site 0 par rapport à l'état fondamental, $n_c = (N - q - 1)$.

2.2.2.a Formulation des états excités

Les états $|GS+1\rangle^S$ de la configuration symétrique se transforment comme une représentation complètement symétrique $[2S]$. L'état de plus haut poids est obtenu en faisant agir l'opérateur de création c_a^\dagger sur l'état fondamental (2.5)

$$|GS+1\rangle_{\{a\}aaa}^S = \frac{1}{\Omega} c_a^\dagger |GS\rangle_{\{a\}aa} .$$

Le facteur de normalisation Ω

$$\Omega = \sqrt{\frac{2S+q-1}{2S+N-1}}$$

apparaît [93] du fait que l'électron supplémentaire \mathbf{c} doit être antisymétrisé avec les $(N-q)$ électrons de conduction déjà présents sur le site 0. Les autres états du multiplet sont obtenus par actions répétées des opérateurs descendants, comme pour les équations (2.9). Par exemple

$$|GS+1\rangle_{\{a\}aab}^S = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{\sqrt{2S}} \left[\sqrt{2S-1} c_a^\dagger |GS\rangle_{\{a\}ab} + c_b^\dagger |GS\rangle_{\{a\}aa} \right] , \quad (2.10)$$

$$|GS+1\rangle_{\{a\}abc}^S = \frac{1}{\Omega} \frac{1}{\sqrt{2S}} \left[\sqrt{2S-2} c_a^\dagger |GS\rangle_{\{a\}bc} + c_b^\dagger |GS\rangle_{\{a\}ac} + c_c^\dagger |GS\rangle_{\{a\}ab} \right] .$$

Considérons maintenant la configuration antisymétrique. Les états $|GS+1\rangle^A$ se transforment comme la représentation $[2S-1, 1]$. L'état de plus haut poids est $|GS+1\rangle_{\{a\}aab}^A$. Il est orthogonal à l'état défini en (2.10). Nous avons

$$|GS+1\rangle_{\{a\}aab}^A = \frac{1}{\Lambda} \frac{1}{\sqrt{2S}} \left[c_a^\dagger |GS\rangle_{\{a\}ab} - \sqrt{2S-1} c_b^\dagger |GS\rangle_{\{a\}aa} \right] ,$$

où Λ est le facteur de normalisation

$$\Lambda = \sqrt{\frac{q-1}{N-1}} .$$

Remarquons que Λ ne dépend pas de $2S$, contrairement à Ω . Les autres états du multiplet décrivant l'état excité $|GS+1\rangle^A$ se déduisent de manière analogue à la méthode utilisée pour la construction des octets $\mathbf{8}^1$ et $\mathbf{8}^2$ dans $SU(3)$ (cf. appendice A). Par exemple

$$|GS+1\rangle_{\{a\}abc}^A = \frac{1}{\Lambda} \frac{1}{\sqrt{2S(2S-1)}} \left[\sqrt{2S-2} c_a^\dagger |GS\rangle_{bc} + c_b^\dagger |GS\rangle_{ac} (2S-1) c_c^\dagger |GS\rangle_{ab} \right] ,$$

$$|GS+1\rangle_{\{a\}acb}^A = \frac{1}{\Lambda} \frac{1}{\sqrt{2S-1}} \left[c_a^\dagger |GS\rangle_{bc} - \sqrt{2S-2} c_b^\dagger |GS\rangle_{ac} \right] .$$

Nous récapitulons dans la Tableau 2.2 les coefficients relatifs aux états $|GS+1\rangle$, notés $\{\{a\}abc\}$ suivant la valeur des nombres quantiques impliqués. Ils correspondent aux coefficients de Clebsch-Gordan intervenant dans le produit direct $[1] \otimes [2S-1]$ dans le groupe $SU(N)$. Nous adoptons les notations introduites dans la référence [110].

TAB. 2.2 – Coefficients de Clebsch-Gordan pour les états excités $|GS + 1\rangle$, comportant un électron de conduction supplémentaire sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental, résultant du produit direct $[1] \otimes [2S - 1]$, et correspondant aux états de nombres quantiques $\{\{a\}abc\}$. Les coefficients doivent être multipliés par le facteur de normalisation $1/\sqrt{N}$, et une racine carrée $\sqrt{}$ est sous-entendue devant chacun des coefficients, suivant les conventions utilisées dans la référence [110]. Un signe $-$ indique un signe négatif devant la racine carrée, $-\sqrt{}$.

	N	$c_a^\dagger GS\rangle_{\{a\}bc}$	$c_b^\dagger GS\rangle_{\{a\}ac}$	$c_c^\dagger GS\rangle_{\{a\}ab}$
$\Omega GS + 1\rangle_{\{a\}abc}^S$	$2S$	$2S - 2$	1	1
$\Lambda GS + 1\rangle_{\{a\}abc}^A$	$2S(2S - 1)$	$2S - 2$	1	$-(2S - 1)^2$
$\Lambda GS + 1\rangle_{\{a\}acb}^A$	$2S - 1$	1	$-(2S - 2)$	0

Nous terminons cette section par la description des états excités correspondant au multiplet $|GS - 1\rangle$, caractérisé par un électron de conduction en moins sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental. Ces états se transforment comme $[2S - 1, 1^{N-1}]$, et l'état de plus haut poids est

$$|GS - 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2S-1)!}} (b_a^\dagger)^{2S-1} |\Delta'\rangle,$$

avec

$$|\Delta'\rangle \equiv \frac{1}{\gamma'} \mathcal{A}(b_{i_1}^\dagger (\prod_{\alpha=i_2}^{i_q} f_\alpha^\dagger) (\prod_{\beta=i_{q+1}}^{i_{N-1}} c_\beta^\dagger)) |0\rangle,$$

$$\gamma' \equiv \sqrt{(2S + N - 2) C_{N-1}^{q-1}}.$$

$|\Delta'\rangle$ se transforme comme la représentation $[1^{N-1}]$, de dimension N dans le groupe $SU(N)$.

2.2.2.b Energie des états excités

L'énergie de l'état fondamentale E_0 a été obtenue dans la section 2.2.1.a. Notons E_1^S , E_1^A et E_2 les énergies des états excités $|GS + 1\rangle^S$, $|GS + 1\rangle^A$ et $|GS - 1\rangle$, respectivement. Dans le chapitre 3 suivant, nous aurons à considérer leurs différences par rapport à l'énergie de l'état fondamental, autrement dit les énergies d'excitation

$$\begin{aligned} \Delta E_1^S &= E_1^S - E_0, \\ \Delta E_1^A &= E_1^A - E_0, \\ \Delta E_2 &= E_2 - E_0. \end{aligned} \tag{2.11}$$

TAB. 2.3 – Energies d’excitation de couplage fort ΔE_1^S , ΔE_1^A , et ΔE_2 pour un spin d’impureté représenté par un tableau de Young «en L», mesurées par rapport à l’énergie de l’état fondamental. Ces énergies correspondent aux états excités comportant respectivement un électron supplémentaire (indice 1) sur le site 0 couplé symétriquement (exposant S) et antisymétriquement (exposant A) au spin de l’impureté écrantée à l’origine, et un électron en moins (indice 2).

	ΔE_1^S	ΔE_1^A	ΔE_2
N arbitraire	$\frac{J}{2} \left(2S + N - q - \frac{Q}{N} \right)$	$\frac{J}{2} \left(N - q - \frac{Q}{N} \right)$	$\frac{J}{2} \left(q + \frac{Q}{N} \right)$
Limite de N grand (Q/N fini)	$\frac{J}{2}(N - q + 2S)$	$\frac{J}{2}(N - q)$	$\frac{J}{2} \cdot q$

Ces énergies d’excitation ont été calculées en utilisant la même méthode à partir des opérateurs de Casimir (casimirologie) que celle utilisée dans le calcul de l’énergie de l’état fondamental. Nous présentons les résultats concernant les énergies d’excitation dans le Tableau 2.3, dans leur forme exacte pour N arbitraire puis dans la limite de grand N avec le rapport $(2S + q - 1)/N$ fini.

Notons dans le Tableau 2.3 que les énergies d’excitation ΔE_1^A et ΔE_2 dans la limite de grand N ne dépendent pas de $2S$ et sont reliées par la transformation $q \rightarrow N - q$, caractéristique de la symétrie particule-trou présente dans le modèle Kondo à une impureté dans la représentation $[1^q]$, purement antisymétrique [109].

Chapitre 3

Stabilité du point fixe de couplage fort

Nous avons identifié dans le chapitre 2 précédent le point fixe de couplage fort. Pour $J \rightarrow \infty$, l'état de plus basse énergie correspond à une configuration où $n_c = (N - q)$ électrons de conduction écrantent partiellement le spin de l'impureté située à l'origine, et isolés du reste du système que l'on peut par commodité décrire comme une chaîne d'électrons [32].

3.1 Principe de la méthode

Afin de mieux comprendre la physique de basses énergies du système, nous effectuons une analyse de fort couplage. Le principe est de considérer un couplage Kondo fini (contrairement au chapitre précédent), en autorisant des sauts virtuels d'électrons de conduction entre l'origine (site de l'impureté) et l'un des sites voisins. Ces processus de saut génèrent des interactions entre le composite, formé par l'impureté et les électrons de conduction sur le site 0, et les électrons situés sur les sites voisins. Ces interactions peuvent ensuite être traitées comme des perturbations au point fixe de couplage fort. En effectuant une analyse similaire à celle développée par Nozières et Blandin [16] pour identifier la nature des excitations, nous pourrions déterminer si le point fixe de couplage fort reste stable ou non une fois que le processus de saut virtuel a été autorisé.

3.1.1 Etat fondamental de couplage fort en présence d'un électron de conduction sur le site voisin

Nous considérons un système avec un site additionnel, noté site 1, voisin du site de l'impureté écrantée. Ce site est occupé par un nombre n_d d'électrons de conduction. L'état fondamental correspondant est donné par

$$|GS, n_d\rangle = \sum |GS\rangle_0 |n_d\rangle_1$$

Cet état fondamental est composé de deux multiplets, possédant chacun des propriétés de symétrie différentes suivant que les n_d électrons de conduction du site 1 sont couplés

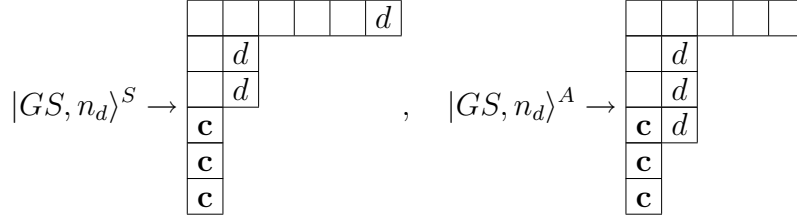


FIG. 3.1 – *Etat fondamental de couplage fort en présence de n_d électrons de conduction sur le site 1, couplés de façon symétrique et antisymétrique avec l'impureté écrantée située à l'origine.*

symétriquement ou antisymétriquement au composite situé sur le site 0. Ces deux multiplets, notés $|GS, n_d\rangle^S$ et $|GS, n_d\rangle^A$, sont représentés sur la Figure 3.1. Ils correspondent aux deux états formés dans le produit direct

$$[2S - 1] \otimes [n_d] \rightarrow [2S, 1^{n_d-1}] \oplus [2S - 1, 1^{n_d}]$$

3.1.2 Critère de stabilité du point fixe de couplage fort

Une fois que le terme de saut est activé, la dégénérescence entre ces deux multiplets est levée, et chacun de ces multiplets acquiert un décalage («shift») en énergie différent que nous notons ΔE^S et ΔE^A , respectivement (voir la Figure 3.2). Nous pouvons reproduire ce spectre d'énergie en considérant un couplage effectif entre le spin du composite à l'origine, et le spin des n_d électrons situés sur le site voisin 1. Lorsque E_0^S est supérieure (inférieure) à E_0^A , le couplage effectif de spin est antiferromagnétique (ferromagnétique).

Ainsi, si le couplage entre le spin effectif sur le site de l'impureté et le spin des électrons de conduction sur le site 1 est ferromagnétique, nous savons, en nous reposant sur des arguments mis en avant par la théorie d'invariance d'échelle («scaling») développée dans la limite de couplage faible [19, 114, 115], que la perturbation de saut est non pertinente. La physique de basses énergies du modèle est bien décrite par le point fixe de couplage fort. Cette physique est celle d'une impureté effective sous-écrantée, associée à une représentation totalement symétrique, faiblement couplée à un gaz d'électrons libres. Le déphasage qui s'ensuit indique que le spin de l'impureté est déjà écranté par $(N - q)$ électrons de conduction. Dans le cas d'un spin d'impureté complètement antisymétrique ($2S = 1$) [109], le déphasage correspond à la limite unitaire, $\delta = \pi/2$ pour SU(2). Il est fonction de q/N pour SU(N), atteignant la limite unitaire pour $q = N/2$.

Si au contraire le couplage effectif entre le spin du composite du site 0 et le spin des électrons de conduction du site 1 est antiferromagnétique, la perturbation apportée par le terme de saut est pertinente, le point fixe de couplage fort est instable. Il ne décrit plus la physique de basses énergies du modèle. On s'attend à ce que le système soit décrit par un point fixe de couplage intermédiaire à déterminer.

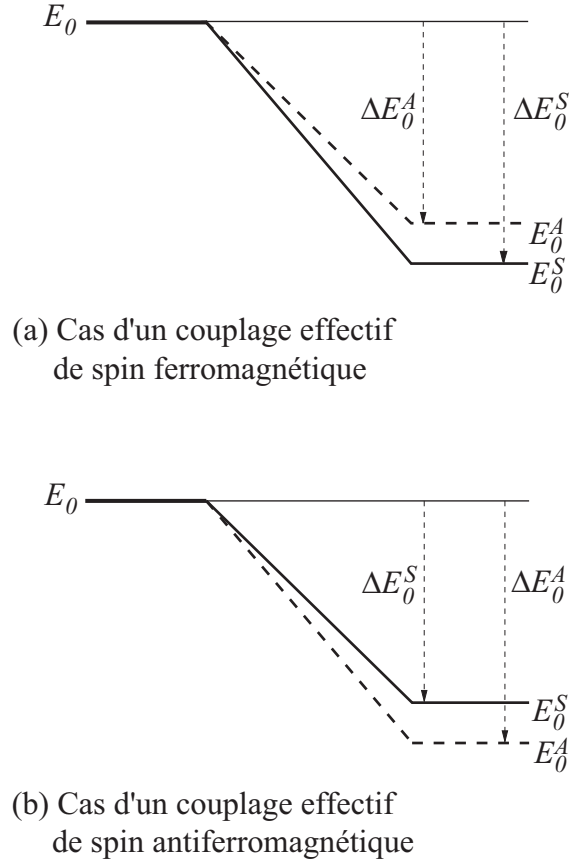


FIG. 3.2 – Décalage en énergie de l'état fondamental de couplage fort dans une théorie de perturbation au second ordre en t pour le cas d'un couplage effectif (a) ferromagnétique et (b) antiferromagnétique.

3.2 Calcul perturbatif des effets du terme de saut

Dans cette section, nous calculons explicitement les effets d'un terme de saut t sur le point fixe de couplage fort à l'ordre le plus bas en théorie de perturbation, c'est-à-dire au second ordre. Considérons le cas d'une impureté décrite par un tableau de Young «en L» en présence de n_d électrons de conduction situés sur le site voisin. Notre approche généralise donc le cas $n_d = 1$ étudié précédemment [93]. Nous pourrions ainsi comprendre l'origine de l'instabilité du point fixe de couplage fort.

L'analyse de la stabilité du point fixe de couplage fort peut être conduite en ajoutant un terme de saut au couplage Kondo

$$H_h = H_1 + H_2 = t \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha} + t \sum_{\alpha} d_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}, \quad (H_1)^{\dagger} = H_2, \quad (3.1)$$

où d_{α}^{\dagger} est l'opérateur de création d'un électron de spin α sur le site 1. La symétrie $SU(N)$ est préservée par ce terme de saut. Cela signifie que la perturbation décale les énergies

de $|GS, n_d\rangle^S$ et $|GS, n_d\rangle^A$ séparément, sans que les états de ces deux multiplets ne soient mélangés. Nous notons les décalages en énergie associés par ΔE_0^S and ΔE_0^A , respectivement.

Nous pouvons distinguer deux types de processus, correspondant aux différents états intermédiaires. Le premier, que nous appelons processus 1, correspond au saut d'un électron de conduction d'abord du site 1 au site 0, explorant les états excités $|GS+1\rangle^{S,A}$ (voir Figures 3.3 et 3.4), suivi du saut de l'électron du site 0 au site 1. Les indices S et A correspondent aux deux configurations possibles suivant que l'électron de conduction sautant sur le site 0 est symétriquement ou antisymétriquement couplé au spin de l'impureté écrantée. Ces deux états possibles sont présentés en détail plus loin. La contribution du processus 1 au décalage en énergie est donnée par

$$t^2 \sum_{\alpha, \beta} \sum_i \frac{\langle GS, n_d | d_{\beta}^{\dagger} c_{\beta} | GS + 1, n_d - 1 \rangle^i \langle GS + 1, n_d - 1 | c_{\alpha}^{\dagger} d_{\alpha} | GS, n_d \rangle}{(E_0 - E_1^i)},$$

avec $i = S, A$. Dans le second processus, l'électron saute d'abord du site 0 au site 1, explorant ainsi les états excités $|GS - 1\rangle^{S,A}$ (cf Figure 3.5) puis revient à l'origine. Il en résulte la contribution suivante au décalage de l'énergie

$$t^2 \sum_{\alpha, \beta} \frac{\langle GS, n_d | c_{\beta}^{\dagger} d_{\beta} | GS - 1, n_d + 1 \rangle \langle GS - 1, n_d + 1 | d_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} | GS, n_d \rangle}{(E_0 - E_2)}.$$

Ainsi, les décalages en énergie correspondant aux configurations symétrique et antisymétrique sont donnés respectivement par

$$\Delta E_0^S = \frac{M_1^S}{E_0 - E_1^S} + \frac{\overline{M_1^S}}{E_0 - E_1^A} + \frac{M_2^S}{E_0 - E_2}, \quad (3.2)$$

$$\Delta E_0^A = \frac{M_1^A}{E_0 - E_1^A} + \frac{M_2^A}{E_0 - E_2}, \quad (3.3)$$

où les expressions apparaissant aux dénominateurs $(E_0 - E_1^S) = -\Delta E_1^S$, $(E_0 - E_1^A) = -\Delta E_1^A$, et $(E_0 - E_2) = -\Delta E_2$ mesurent les différences d'énergie entre l'état fondamental et les états excités (voir le Tableau 2.3 du chapitre précédent). Les éléments de matrice M seront donnés plus loin, lorsque nous étudierons chacun des processus. La différence d'énergie entre les deux états

$$\Delta E_0^S - \Delta E_0^A = \frac{M_1^S}{E_0 - E_1^S} + \frac{\overline{M_1^S} - M_1^A}{E_0 - E_1^A} + \frac{M_2^S - M_2^A}{E_0 - E_2},$$

schématisée sur la Figure 3.2 détermine le signe de l'interaction effective de spin et donc la stabilité du point fixe de couplage fort.

TAB. 3.1 – Coefficients de Clebsch-Gordan intervenant dans le produit direct $[1] \otimes [2S-1] \rightarrow [2S] \oplus [2S-1, 1]$. La notation $|\{a\}aab\rangle$ indique un état de la représentation $[2S]$, tandis que $|\{a\}aa, b\rangle$ représente l'état de plus haut poids de $[2S-1, 1]$.

aab	N	$ a\rangle \{a\}ab\rangle$	$ b\rangle \{a\}aa\rangle$
$ \{a\}aab\rangle$	$2S$	$2S-1$	1
$ \{a\}aa, b\rangle$	$2S$	1	$-(2S-1)$

3.2.1 Processus 1: configuration symétrique

Nous considérons tout d'abord le cas où les n_d électrons sur le site 1 sont couplés symétriquement au spin du composite situé à l'origine. En notation de tableau de Young, cela correspond à l'état formé dans le produit direct : $[2S-1] \otimes [1^{n_d}] \rightarrow [2S, 1^{n_d-1}]$. L'état fondamental

$$|GS, n_d\rangle^S = (d_a^\dagger d_b^\dagger \cdots d_u^\dagger) |GS\rangle, \quad (3.4)$$

se transforme sous l'action du terme de saut en une combinaison linéaire de deux états excités, $|GS+1, n_d-1\rangle^S$, d'énergie E_S , et $|\overline{GS+1, n_d-1}\rangle^S$ d'énergie E_A , suivant que l'électron de conduction supplémentaire sur le site 0 est couplé symétriquement ou antisymétriquement au spin de l'impureté écrantée. Les états obtenus par l'action de $c_\sigma^\dagger d_\sigma$ sur l'état fondamental défini par l'Equation (3.4), sont calculés explicitement et mis sous la forme d'une combinaison linéaire des états excités (cf. Figure 3.3).

Nous allons maintenant écrire explicitement ces états excités. Pour cela nous ajoutons un électron \mathbf{c} à l'état fondamental et combinons ensuite l'état obtenu avec (n_d-1) électrons situés sur le site 1. L'état excité $|GS+1\rangle^S$ de couplage fort est l'état de plus haut poids formé dans le produit direct

$$[2S-1] \otimes [1] \rightarrow [2S] \oplus [2S-1, 1].$$

Nous avons

$$|GS+1\rangle_{aaa}^S = \frac{1}{\Omega} c_a^\dagger |GS\rangle_{aa}, \quad (3.5)$$

avec le facteur de normalisation

$$\Omega = \sqrt{\frac{2S+q-1}{2S+N-1}}.$$

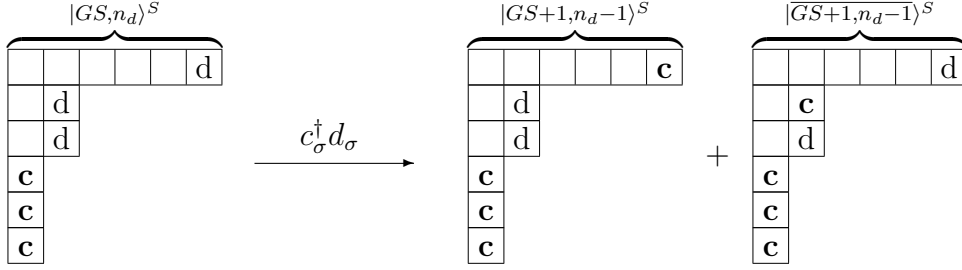


FIG. 3.3 – Lorsque n_d électrons de conduction sont couplés symétriquement à l'impureté écrantée située à l'origine, l'opérateur de saut $c_d^\dagger d_\sigma$ agissant sur l'état fondamental génère une combinaison linéaire de deux états excités caractérisés par un électron de conduction supplémentaire sur le site 0.

Les autres états du multiplet qui se transforment comme la représentation $[2S]$, s'obtiennent en faisant agir les opérateurs descendants appropriés. Par exemple

$$|GS+1\rangle_{aab}^S = \frac{1}{\Omega\sqrt{2S}} \left(\sqrt{2S-1} c^\dagger |GS\rangle_{ab} + c_b^\dagger |GS\rangle_{aa} \right). \quad (3.6)$$

L'état de plus haut poids du multiplet antisymétrique $|GS+1\rangle^A$ se transformant comme $[2S-1, 1]$ est un état orthogonal à $|GS+1\rangle_{aab}^S$, c'est-à-dire

$$|GS+1\rangle_{aab}^A = \frac{1}{\Lambda\sqrt{2S}} \left(c_a^\dagger |GS\rangle_{ab} - \sqrt{2S-1} c_b^\dagger |GS\rangle_{aa} \right), \quad (3.7)$$

faisant apparaître un autre facteur de normalisation

$$\Lambda = \sqrt{\frac{q-1}{N-1}}.$$

Les autres états s'obtiennent à partir des trois précédents (3.5), (3.6) et (3.7). Nous récapitulons les résultats obtenus dans les Tableaux 3.1-3.3 sous la forme de coefficients de Clebsch-Gordan.

Nous devons ensuite ajouter (n_d-1) électrons sur le site 1. Les résultats des calculs sont récapitulés dans le Tableau 3.4.

TAB. 3.2 – *Similaire au Tableau 3.1, mais pour les états de nombres quantiques $(a)^{2S-2}bb$.*

abb	N	$ a\rangle \{a\}bb\rangle$	$ b\rangle \{a\}ab\rangle$
$ \{a\}abb\rangle$	$2S$	$2S - 2$	2
$ \{a\}ab, b\rangle$	$2S$	2	$-(2S - 2)$

Les Tableaux 3.1-3.4 donnent les résultats obtenus pour les coefficients de Clebsch-Gordan nécessaires au calcul des états excités. Les Tableaux 3.1, 3.2, 3.3 correspondent au cas où un seul électron de conduction est ajouté à l'impureté écrantée, tandis que le Tableau 3.4 contient les coefficients intervenant lorsque n_d électrons sont ajoutés. Les valeurs présentées de ces coefficients sont valables pour $2S$, n_d et N arbitraires. Ces tableaux doivent être lus suivant les conventions de la référence [110], déjà rencontrées dans le Tableau 2.2 du chapitre précédent et que nous rappelons ici : tous les coefficients sont affectés d'une racine carrée, et doivent être multipliés par le facteur de normalisation $1/\sqrt{N}$; de plus un signe $-$ indique un signe négatif devant la racine carrée. Par exemple la valeur $-(2S - 1)$ ci-dessus signifie $-\sqrt{2S - 1}$.

TAB. 3.3 – *Similaire au Tableau 3.1, mais pour les états de nombres quantiques $(a)^{2S-2}bc$. On remarquera la dégénérescence des états $[2S - 1, 1]$. Nous notons $|\{a\}ab, c\rangle$, et $|\{a\}ac, b\rangle$ les états orthogonaux correspondants .*

abc	N	$ a\rangle \{a\}bc\rangle$	$ b\rangle \{a\}ac\rangle$	$ c\rangle \{a\}ab\rangle$
$ \{a\}abc\rangle$	$2S$	$2S - 2$	1	1
$ \{a\}ab, c\rangle$	$2S(2S - 1)$	$2S - 2$	1	$-(2S - 1)^2$
$ \{a\}ac, b\rangle$	$2S - 1$	1	$-(2S - 2)$	0

TAB. 3.4 – Coefficients de Clebsch-Gordan intervenant dans le produit direct des représentations de $k = n_d$ électrons de conduction situés sur le site 1, et du spin de l'impureté écrantée à l'origine, $[2S - 1], [1^k] \otimes [2S - 1] \rightarrow [2S, 1^{k-1}] \oplus [2S - 1, 1^k] \oplus \dots$. Nous n'avons retenu que les coefficients pour les représentations $[2S, 1^{k-1}]$ et $[2S - 1, 1^k]$ (dernière ligne). Les états associés à la représentation $[1^k]$ sont notés par une colonne d'indices $|\cdot\rangle$, ceux associés à $[2S - 1]$ sont notés $|\alpha\rangle$, et ceux proches de l'état de plus haut poids sont notés $|a\rangle$. Les états de $[2S, 1^{k-1}]$ et de $[2S - 1, 1^k]$ sont notés $|ab, c, d, \dots\rangle$ et $|a, b, c, \dots\rangle$, respectivement.

$[1^k] \otimes [2S - 1]$	N	$[1^k] \{ \cdot\rangle \overbrace{ \alpha\rangle}^{[2S-1]}\}$	$ \cdot\rangle b\rangle$	$ \cdot\rangle c\rangle$	\dots
$\{a\}abc\dots uv$					
$ ab, c, \dots, u, v\rangle$	$2S(2S - 1)$	$2S - 1$	$(2S - 1)^2$	0	\dots
$ ac, b, \dots, u, v\rangle$	$2S(2S + 1)$	$-(2S - 1)$	1	$(2S)^2$	\dots
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
$ au, b, \dots, t, v\rangle$	$(2S + k - 2)(2S + k - 3)$	$(-1)^k(2S - 1)$	$-(-1)^k$	$(-1)^k$	\dots
$ av, b, \dots, t, u\rangle$	$(2S + k - 1)(2S + k - 2)$	$(-1)^{k+1}(2S - 1)$	$-(-1)^{k+1}$	$(-1)^{k+1}$	\dots
$ a, b, \dots, u, v\rangle$	$(2S + k - 1)$	$(2S - 1)$	-1	1	\dots
$[1^k] \otimes [2S - 1]$	$ \cdot\rangle u\rangle$	$ \cdot\rangle v\rangle$			
$\{a\}abc\dots uv$					
$ ab, c, \dots, u, v\rangle$	0	0			
$ ac, b, \dots, u, v\rangle$	0	0			
\dots	\dots	\dots			
$ au, b, \dots, t, v\rangle$	$(2S + k - 3)^2$	0			
$ av, b, \dots, t, u\rangle$	1	$(2S + k - 2)^2$			
$ a, b, \dots, u, v\rangle$	$(-1)^{k-1}$	$(-1)^k$			

Nous avons

$$\begin{aligned}
& |GS + 1, n_d - 1\rangle_{aab\dots u}^S \tag{3.8} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2S + n_d - 1}} \left[\sqrt{2S} \left(\prod_{i=2}^{n_d} d_{x_i}^\dagger \right) |GS + 1\rangle_{aaa}^S \right. \\
&\quad \left. + \sum_{j=2}^{n_d} (-1)^{j-1} \left(\prod_{i=1, i \neq j}^{n_d} d_{x_i}^\dagger \right) |GS + 1\rangle_{aaax_j}^S \right] \\
&= \frac{1}{\Omega \sqrt{2S(2S + n_d - 1)}} \\
&\quad \times \left[2S \left(\prod_{i=2}^{n_d} d_{x_i}^\dagger \right) c_a^\dagger |GS\rangle_{aa} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{j=2}^{n_d} (-1)^{j-1} \left(\prod_{i=1, i \neq j}^{n_d} d_{x_i}^\dagger \right) \left(\sqrt{2S - 1} c_a^\dagger |GS\rangle_{ax_j} + c_{x_j}^\dagger |GS\rangle_{aa} \right) \right],
\end{aligned}$$

pour l'état excité symétrique dans la configuration symétrique, et

$$\begin{aligned}
& |\overline{GS + 1}, n_d - 1\rangle_{aab\dots u}^S \tag{3.9} \\
&= \frac{1}{\sqrt{n_d - 1}} \left[\sum_{j=2}^{n_d} (-1)^j \left(\prod_{i=1, i \neq j}^{n_d} d_{x_i}^\dagger \right) |GS + 1\rangle_{aaax_j}^A \right] \\
&= \frac{1}{\Lambda \sqrt{2S(n_d - 1)}} \left[\sum_{j=2}^{n_d} (-1)^j \left(\prod_{i=1, i \neq j}^{n_d} d_{x_i}^\dagger \right) \left(c_a^\dagger |GS\rangle_{ax_j} - \sqrt{2S - 1} c_{x_j}^\dagger |GS\rangle_{aa} \right) \right],
\end{aligned}$$

pour l'état excité antisymétrique dans la configuration symétrique ($x_1 = a$). Ces deux états excités sont représentés sur la Figure 3.3.

Nous déduisons des expressions (3.9) et (3.10) précédentes l'effet du terme de saut ($c_\sigma^\dagger d_\sigma$) sur l'état fondamental (3.4)

$$\begin{aligned}
\left(\sum_\sigma c_\sigma^\dagger d_\sigma \right) |GS, n_d\rangle^S &= \Omega \sqrt{\frac{2S + n_d - 1}{2S}} |GS + 1, n_d - 1\rangle^S \\
&\quad + \Lambda \sqrt{n_d - 1} \sqrt{\frac{2S - 1}{2S}} |\overline{GS + 1}, n_d - 1\rangle^S. \tag{3.10}
\end{aligned}$$

où les coefficients de normalisation sont

$$\Omega = \sqrt{\frac{2S + q - 1}{2S + N - 1}}, \quad \Lambda = \sqrt{\frac{q - 1}{N - 1}}$$

indépendants de n_d , puisque nous considérons le saut d'un seul électron.

Nous obtenons finalement les éléments de matrice suivants

$$\begin{aligned}
M_1^S &= |{}^S \langle GS + 1, n_d - 1 | H_1 | GS, n_d \rangle^S|^2 \\
&= t^2 \left(\frac{2S + n_d - 1}{2S} \right) \left(\frac{2S + q - 1}{2S + N - 1} \right), \tag{3.11}
\end{aligned}$$

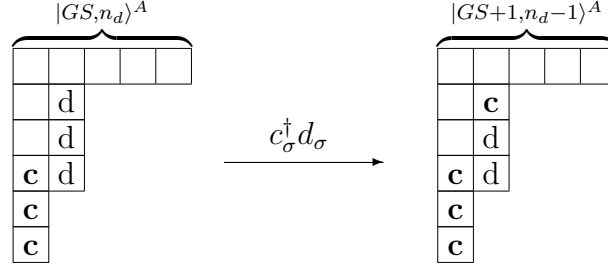


FIG. 3.4 – Lorsque n_d électrons sont couplés antisymétriquement à l'impureté écrantée située à l'origine, l'opérateur de saut $c_\sigma^\dagger d_\sigma$ agissant sur l'état fondamental génère des états proportionnels à un état excité donné, comportant un électron de conduction supplémentaire à l'origine.

$$\begin{aligned} \overline{M_1^S} &= |{}^S\langle \overline{GS+1}, n_d-1 | H_1 | GS, n_d \rangle^S|^2 \\ &= t^2 (n_d - 1) \left(\frac{2S-1}{2S} \right) \left(\frac{q-1}{N-1} \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Nous voyons immédiatement que $\overline{M_1^S}$ est proportionnel à $(n_d - 1)$, et s'annule pour $n_d = 1$, tandis que M_1^S ne dépend de n_d de façon significative que dans le cas où $2S \ll n_d < N$.

3.2.2 Processus 1 : configuration antisymétrique

Nous considérons maintenant le cas où les électrons sur site 1 sont couplés au spin du composite situé à l'origine suivant le produit direct

$$[2S-1] \otimes [1^{n_d}] \rightarrow [2S-1, 1^{n_d}].$$

Dans la section précédente 3.2.1 il s'est avéré relativement facile d'écrire l'état fondamental de couplage fort en juxtaposant dans l'état de plus haut poids possible le spin effectif de l'impureté écrantée et les n_d électrons du site 1. Nous avons ainsi obtenu l'équation (3.4).

Ici la détermination des coefficients de Clebsch-Gordan dans le groupe $SU(N)$ est un peu plus difficile. Nous présentons ces coefficients dans le Tableau 3.4. L'état fondamental s'écrit

$$\begin{aligned} |GS, n_d\rangle_{abc\dots v}^A &= \frac{1}{\sqrt{2S+n_d-1}} \left[\sqrt{2S-1} \left(\prod_{i=2}^{n_d+1} d_{y_i}^\dagger \right) |GS\rangle_{aa} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=2}^{n_d+1} (-1)^{j-1} \left(\prod_{i=1, i \neq j}^{n_d+1} d_{y_i}^\dagger \right) |GS\rangle_{ay_j} \right], \end{aligned} \quad (3.13)$$

avec $y_1 = a$. Le terme de saut transforme l'état fondamental précédent en un état proportionnel à un état excité de couplage fort donné (cf. Figure 3.4).

Afin de déterminer l'élément de matrice correspondant, nous avons calculé explicitement

$$\left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle^A \propto |GS+1, n_d-1\rangle^A,$$

puis normalisé l'état résultant. L'action de $(c_\sigma^\dagger d_\sigma)$ sur l'état fondamental $|GS, n_d\rangle^A$, caractérisé par n_d électrons couplés antisymétriquement au composite situé à l'origine, produit

$$\begin{aligned}
& \left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle_{ab\dots v}^A \\
&= \frac{(-1)^{n_d-1}}{\sqrt{2S+n_d-1}} \left[\sqrt{2S-1} \sum_{l=2}^{n_d+1} (-1)^l \left(\prod_{i=2, i \neq l}^{n_d+1} d_i^{\dagger} \right) c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{aa} \right. \\
&\quad + \sum_{j=2}^{n_d+1} (-1)^{j-1} \left\{ \sum_{l=1}^{j-1} (-1)^{l-1} \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_i^{\dagger} \right) \right. \\
&\quad \left. \left. + \sum_{l=j+1}^{n_d+1} (-1)^l \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_i^{\dagger} \right) \right\} c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{ax_j} \right], \tag{3.14}
\end{aligned}$$

qui est proportionnel à l'expression d'un état excité de couplage fort donné. Compte tenu du fait que nous pouvons mettre l'équation précédente sous la forme

$$\begin{aligned}
& \left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle_{ab\dots v}^A \\
&= \frac{(-1)^{n_d-1}}{\sqrt{2S+n_d-1}} \left[\sum_{l=2}^{n_d+1} (-1)^l \left(\prod_{i=2, i \neq l}^{n_d+1} d_{x_i}^{\dagger} \right) \left(\sqrt{2S-1} c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{aa} - c_a^{\dagger} |GS\rangle_{ax_l} \right) \right. \\
&\quad + \sum_{j=2}^{n_d+1} (-1)^{j-1} \left\{ \sum_{l=2}^{j-1} (-1)^{l-1} \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_{x_i}^{\dagger} \right) \right. \\
&\quad \left. \left. - \sum_{l=j+1}^{n_d+1} (-1)^{l-1} \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_{x_i}^{\dagger} \right) \right\} c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{ax_j} \right],
\end{aligned}$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}
& \left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle_{ab\dots v}^A \\
&= \frac{(-1)^{n_d-1}}{\sqrt{2S+n_d-1}} \sum_{l=2}^{n_d+1} (-1)^l \left[\left(\prod_{i=2, i \neq l}^{n_d+1} d_{x_i}^{\dagger} \right) \left(\sqrt{2S-1} c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{aa} - c_a^{\dagger} |GS\rangle_{ax_l} \right) \right. \\
&\quad \left. - \sum_{j=2}^{l-1} (-1)^j \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_{x_i}^{\dagger} \right) \left(c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{ax_j} - c_{x_j}^{\dagger} |GS\rangle_{ax_l} \right) \right].
\end{aligned}$$

Cette expression peut être écrite en utilisant la forme des états antisymétriques $|GS+1\rangle^A$, à l'aide des relations suivantes

$$\Lambda(\sqrt{2S} |GS+1\rangle_{ax_l x_j}^A - \sqrt{2S-2} |GS+1\rangle_{ax_j x_l}^A) = \sqrt{2S-1} (c_{x_l}^{\dagger} |GS\rangle_{ax_j} - c_{x_j}^{\dagger} |GS\rangle_{ax_l}),$$

$$\Lambda\sqrt{2S} |GS + 1\rangle_{aa x_l}^A = c_a^\dagger |GS\rangle_{ax_l} - \sqrt{2S-1} c_{x_l}^\dagger |GS\rangle_{aa} ,$$

pour obtenir

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle_{ab\dots v}^A \\ &= \frac{(-1)^{n_d-1} \Lambda}{\sqrt{(2S+n_d-1)(2S-1)}} \sum_{l=1}^{n_d+1} (-1)^{l+1} \\ & \times \left[\left(\prod_{i=2, i \neq l}^{n_d+1} d_{x_i}^\dagger \right) \sqrt{2S(2S-1)} |GS + 1\rangle_{aa x_l}^A \right. \\ & \left. - \sum_{j=2}^{l-1} (-1)^j \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_{x_i}^\dagger \right) \left(\sqrt{2S} |GS + 1\rangle_{ax_j x_l}^A - \sqrt{2S-2} |GS + 1\rangle_{ax_l x_j}^A \right) \right] . \end{aligned}$$

Comme

$$\left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle_{ab\dots v}^A \propto |GS + 1, n_d - 1\rangle_{ab\dots v}^A \quad (3.15)$$

nous avons simplement à normaliser l'état précédent pour obtenir l'état excité $|GS + 1, n_d - 1\rangle_{ab\dots v}^A$. A un signe près, nous trouvons

$$\begin{aligned} & |GS + 1, n_d - 1\rangle_{ab\dots v}^A \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_d(2S+n_d-1)(2S-1)}} \sum_{l=1}^{n_d+1} (-1)^{l+1} \\ & \times \left[\left(\prod_{i=2, i \neq l}^{n_d+1} d_{x_i}^\dagger \right) \sqrt{2S(2S-1)} |GS + 1\rangle_{aa x_l}^A \right. \\ & \left. - \sum_{j=2}^{l-1} (-1)^j \left(\prod_{i=1, i \neq j, l}^{n_d+1} d_{x_i}^\dagger \right) \left(\sqrt{2S} |GS + 1\rangle_{ax_j x_l}^A - \sqrt{2S-2} |GS + 1\rangle_{ax_l x_j}^A \right) \right] . \end{aligned}$$

et

$$\left(\sum_{\sigma} c_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} \right) |GS, n_d\rangle_{ab\dots v}^A = (\Lambda\sqrt{n_d}) |GS + 1, n_d - 1\rangle_{ab\dots v}^A .$$

Nous obtenons finalement l'élément de matrice suivant

$$\begin{aligned} M_1^A &= |^A \langle GS + 1, n_d - 1 | H_1 | GS, n_d \rangle^A|^2 \\ &= t^2 n_d \left(\frac{q-1}{N-1} \right) . \end{aligned} \quad (3.16)$$

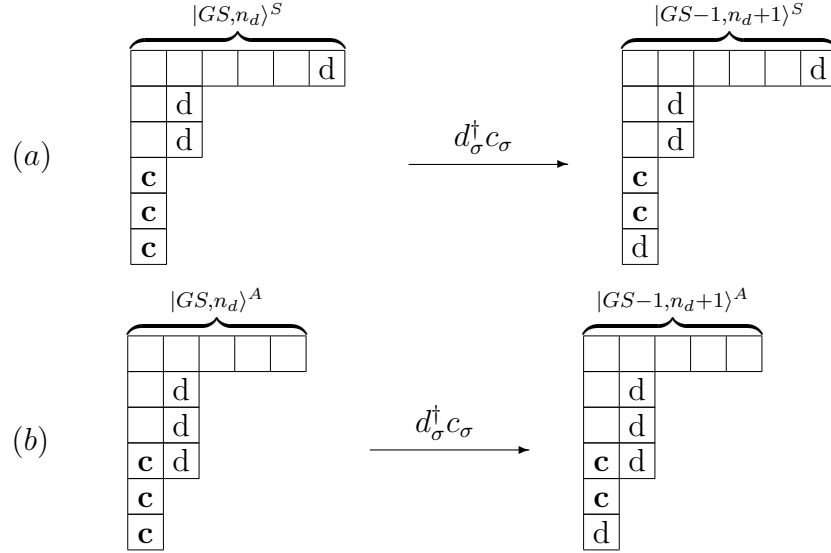


FIG. 3.5 – L'opérateur $d_\sigma^\dagger c_\sigma$, agissant sur l'état fondamental comportant n_d électrons sur le site 1, couplés (a) symétriquement ou (b) antisymétriquement au spin de l'impureté écrantée située à l'origine. Il en résulte un état proportionnel à un état excité avec un électron en moins sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental, couplé (a) symétriquement ou (b) antisymétriquement aux $(n_d + 1)$ électrons de conduction.

Notons dans l'équation précédente que l'élément de matrice M_1^A obtenu dépend de n_d mais est indépendant de $2S$. En combinant ce résultat avec l'expression obtenue pour \overline{M}_1^S (3.12), nous dérivons

$$\overline{M}_1^S - M_1^A = -t^2 \left(\frac{2S + n_d - 1}{2S} \right) \left(\frac{q - 1}{N - 1} \right). \quad (3.17)$$

Le terme de droite de l'équation précédente fait apparaître la même dépendance en n_d que M_1^S (3.11), mais avec un signe opposé.

3.2.3 Processus 2

Pour les deux configurations symétrique et antisymétrique du processus 2, il existe une transformation biunivoque [93] entre l'état obtenu par l'action de H_2 (3.1) sur l'état fondamental, et l'état excité de même symétrie (cf. Figure 3.5). L'évaluation des éléments de matrice M_2^S et M_2^A associés au processus 2 est donc considérablement simplifiée en utilisant cette propriété permettant de relier les éléments de matrice des processus 1 et 2, respectivement.

D'une part nous avons dans le processus 1

$$\begin{aligned}
M_1^S + \overline{M_1^S} &= t^2 \sum_{\sigma\sigma'} {}^S \langle GS, n_d | d_{\sigma'}^\dagger c_{\sigma'} c_\sigma^\dagger d_\sigma | GS, n_d \rangle^S \\
&= t^2 \sum_{\sigma\sigma'} {}^S \langle d_{\sigma'}^\dagger (\delta_{\sigma\sigma'} - c_\sigma^\dagger c_{\sigma'}) d_\sigma \rangle^S \\
&= t^2 \sum_{\sigma} {}^S \langle d_\sigma^\dagger d_\sigma \rangle^S - \delta M^S,
\end{aligned}$$

avec

$$\delta M^S = t^2 \sum_{\sigma\sigma'} {}^S \langle c_\sigma^\dagger d_{\sigma'}^\dagger d_\sigma c_{\sigma'} \rangle^S,$$

où la valeur moyenne ${}^S \langle \rangle^S$ est prise sur l'état fondamental $|GS, n_d\rangle^S$.

D'autre part pour le processus 2, les éléments de matrice relatifs à la configuration symétrique obéissent à

$$\begin{aligned}
M_2^S &= t^2 \sum_{\sigma\sigma'} {}^S \langle GS, n_d | c_{\sigma'}^\dagger d_{\sigma'} d_\sigma^\dagger c_\sigma | GS, n_d \rangle^S \\
&= t^2 \sum_{\sigma\sigma'} {}^S \langle c_{\sigma'}^\dagger (\delta_{\sigma\sigma'} - d_\sigma^\dagger d_{\sigma'}) c_\sigma \rangle^S \\
&= t^2 \sum_{\sigma} {}^S \langle c_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle^S - \delta M^S,
\end{aligned}$$

où les variables muettes σ et σ' ont été échangées dans la dernière ligne. La même relation existe pour la configuration antisymétrique (avec les valeurs moyennes prises sur l'état fondamental $|GS, n_d\rangle^A$)

$$\begin{aligned}
M_1^A &= t^2 \sum_{\sigma} {}^A \langle d_\sigma^\dagger d_\sigma \rangle^A - \delta M^A, \\
M_2^A &= t^2 \sum_{\sigma} {}^A \langle c_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle^A - \delta M^A.
\end{aligned}$$

Finalement, en utilisant cette simplification, nous trouvons

$$\begin{aligned}
M_2^S &= t^2(n_c - n_d) + (M_1^S + \overline{M_1^S}) \\
&= t^2(N - n_d) \left(\frac{N - q}{N - 1} \right) \left(\frac{2S + N - 2}{2S + N - 1} \right), \tag{3.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_2^A &= t^2(n_c - n_d) + M_1^A \\
&= t^2[N - (n_d + 1)] \left(\frac{N - q}{N - 1} \right), \tag{3.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M_2^S - M_2^A &= M_1^S + \overline{M_1^S} - M_1^A \\
&= t^2 \left(\frac{2S + n_d - 1}{2S + N - 1} \right) \left(\frac{N - q}{N - 1} \right). \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Chapitre 4

Résultats et discussion

Ayant calculé dans le chapitre précédent les différents éléments de matrice impliqués, nous sommes maintenant en mesure de dériver les expressions des décalages en énergie ΔE_0^S et ΔE_0^A de l'état fondamental de couplage fort dans les configurations symétrique et antisymétrique, respectivement. Nous utilisons pour cela une théorie de perturbation au deuxième ordre en fonction du terme t de saut des électrons de conduction.

Parallèlement, nous présentons les résultats sous la forme d'un hamiltonien effectif faisant apparaître les interactions de charge et de spin entre l'impureté écrantée située à l'origine et les n_d électrons de conduction du site voisin. Nous discutons ensuite les implications de cet hamiltonien effectif sur le comportement de basses énergies du système.

4.1 Hamiltonien effectif et interaction de spin

Dans cette section, nous allons tout d'abord définir l'hamiltonien effectif considéré. Cet hamiltonien effectif fait apparaître des interactions de charge et de spin entre le composite au site 0 et les électrons de conduction situés sur le site 1. Les valeurs prises par ces interactions effectives de charge et de spin sont obtenues en identifiant les décalages en énergie ΔE_0^S et ΔE_0^A induits par l'hamiltonien effectif aux décalages évalués grâce aux éléments de matrice, que nous avons calculés dans le chapitre précédent suivant une théorie de perturbation au deuxième ordre en t autour du point fixe de couplage fort. Nous discutons alors de le caractère stable ou instable du point fixe de couplage fort.

4.1.1 Description de l'hamiltonien effectif

L'hamiltonien effectif considéré est le suivant

$$H_{eff} = U_{eff} n_d + J_{eff} \mathbf{S}_0^{[2S-1]} \cdot \mathbf{S}_1^{[1^{n_d}]},$$

où U_{eff} et J_{eff} sont respectivement les interactions effectives de charge et de spin entre l'impureté écrantée par les électrons de conduction sur le site origine et les électrons de conduction situés sur le site adjacent. Dans les notations utilisées, $\mathbf{S}_0^{[2S-1]}$ et $\mathbf{S}_1^{[1^{n_d}]}$ sont les opérateurs de spin associés aux représentations $[2S-1]$ et $[1^{n_d}]$ décrivant l'impureté écrantée sur le site 0 et les n_d électrons sur le site 1, respectivement.

Le signe de l'interaction effective de spin contrôle la stabilité du point fixe de couplage fort. Lorsque le couplage effectif de spin est ferromagnétique, on peut montrer par des arguments issus du groupe de renormalisation (similaires à ceux que nous développerons dans la partie suivante) que la perturbation apportée par le terme de saut n'est pas pertinente; le point fixe de couplage fort est stable, et décrit la physique de basses énergies du système. Dans le cas contraire lorsque l'interaction effective de spin est antiferromagnétique, la perturbation est pertinente et le point fixe de couplage fort est instable. Le comportement de basses énergies du système est alors décrit par un point fixe de couplage intermédiaire, à déterminer.

On peut également dériver une interaction effective de charge, résultant du saut virtuel des électrons de conduction entre le site de l'impureté et l'un des sites voisins. Cette interaction de charge peut être attractive ou répulsive. Nous verrons par la suite que la nature de l'interaction de charge est parfaitement liée au caractère ferromagnétique ou antiferromagnétique de l'interaction effective de spin. Dans le cas d'une interaction effective de charge répulsive, l'impureté partiellement écrantée a tendance à repousser les électrons du site voisin. Au contraire pour une interaction effective de charge attractive, le composite de l'origine tend à accumuler un nombre maximal d'électrons de conduction sur le site 1. L'analyse de l'interaction effective de charge va nous permettre de mieux comprendre les propriétés physiques du modèle.

4.1.2 Décalages en énergie ΔE_0^S et ΔE_0^A

Nous évaluons maintenant les décalages en énergie en utilisant les résultats concernant les éléments de matrices obtenus dans le chapitre précédent. En incorporant les expressions des éléments de matrices (3.11), (3.17) et (3.20), ainsi que celles des énergies d'excitation (cf. Tableau 2.3) dans les équations (3.3) et (3.4), nous trouvons

$$\Delta E_0^A = - \left(\frac{2t^2}{J} \right) \left[\left(\frac{n_d}{N-1} \right) \left(\frac{q-1}{N-q-Q/N} \right) + \left(1 - \frac{n_d}{N-1} \right) \left(\frac{N-q}{q+Q/N} \right) \right], \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_0^S - \Delta E_0^A &= -(2S + n_d - 1) \left(\frac{2t^2}{J} \right) \\ &\times \left\{ - \frac{q-1}{2S(N-1)(N-q-(2S+q-1)/N)} \right. \\ &\quad + \frac{N-q}{(N-1)(2S+N-1)(q+(2S+q-1)/N)} \\ &\quad \left. + \frac{2S+q-1}{2S(2S+N-1)(2S+N-q-(2S+q-1)/N)} \right\}. \quad (4.2) \end{aligned}$$

On remarque la dépendance linéaire de $(\Delta E_0^S - \Delta E_0^A)$ en fonction de $(2S + n_d - 1)$ qui peut être factorisée. Lorsque $2S$ augmente, la différence en énergie $(\Delta E_0^S - \Delta E_0^A)$ diminue. De plus, l'effet de n_d sur $(\Delta E_0^S - \Delta E_0^A)$ reste faible tant que $n_d \ll 2S$.

Jusqu'à présent nous avons surtout présenté les résultats pour N arbitraire. Dans ce qui suivra, nous considérerons le plus souvent la limite de N grand, caractérisée par $2S/N$ et q/N finis. A l'ordre le plus bas en $1/N$ nous obtenons

$$\Delta E_0^A = -\frac{2t^2}{J} \left[\left(\frac{N-q}{q} \right) - \left(\frac{n_d}{N} \right) \left(\frac{N(N-2q)}{q(N-q)} \right) \right] \quad (4.3)$$

$$\Delta E_0^S - \Delta E_0^A = -\frac{2t^2}{JN} \left(\frac{2S+n_d-1}{2S+N-q} \right) \left(\frac{N(N-2q)}{q(N-q)} \right). \quad (4.4)$$

La différence en énergie ($\Delta E_0^S - \Delta E_0^A$) dans la limite de grand N est en $\mathcal{O}(1/N)$. Les deux niveaux d'énergie ΔE_0^S et ΔE_0^A ont le mêmes terme dominant en $\mathcal{O}(1)$, qui ne dépend presque pas de $2S$. La seule dépendance en $2S$ apparaît dans la différence ($\Delta E_0^S - \Delta E_0^A$).

4.1.3 Dérivation de l'hamiltonien effectif

Les décalages en énergie dérivés dans la section 4.1.2 peuvent être reproduits à partir de l'hamiltonien effectif défini, à une constante additive près déterminée plus loin, par

$$H_{eff} = U_{eff} n_d + J_{eff} \mathbf{S}_0^{[2S-1]} \cdot \mathbf{S}_1^{[1^{n_d}]}, \quad (4.5)$$

où U_{eff} et J_{eff} sont les interactions effectives de charge et de spin, respectivement, entre l'impureté écrantée par les électrons de conduction sur le site 0 dans la limite de couplage fort, et les n_d électrons de conduction situés sur le site 1. Dans les notations utilisées, $\mathbf{S}_0^{[2S-1]}$ et $\mathbf{S}_1^{[1^{n_d}]}$ sont les opérateurs de spin associés aux représentations $[2S-1]$ et $[1^{n_d}]$, respectivement. Le spectre est constitué de deux multiplets, résultant du produit direct

$$[2S-1] \otimes [1^{n_d}] \rightarrow [2S, 1^{n_d-1}]^S \oplus [2S-1, 1^{n_d}]^A,$$

où les indices S and A indiquent les états de configurations symétrique et antisymétrique, respectivement. Les décalages en énergie induits par H_{eff} peuvent être calculés comme précédemment à l'aide des opérateurs quadratiques de Casimir (2.4). Nous trouvons

$$\begin{aligned} \Delta E_{[2S, 1^{n_d-1}]}^S - \Delta E_{[2S-1, 1^{n_d}]}^A &= \frac{J_{eff}}{2} [\mathcal{C}_2([2S, 1^{n_d-1}]) - \mathcal{C}_2([2S-1, 1^{n_d}])] \\ &= -\frac{J_{eff}}{4} (2S+n_d-1) [Y'_{[2S, 1^{n_d-1}]} - Y'_{[2S-1, 1^{n_d}]}] \\ &= \frac{J_{eff}}{2} (2S+n_d-1), \end{aligned}$$

où nous avons utilisé les résultats du Tableau 2.1. Comme les tableaux de Young associés aux deux états (symétrique et antisymétrique) possèdent un nombre total de boîtes identique

$$Q_{eff} = 2S + n_d - 1,$$

la différence en énergie ne dépend que de la seconde contrainte (B.16) caractérisant la représentation

$$\hat{Y}_{eff} = Q_{eff} Y',$$

avec Y' décrivant l'asymétrie ligne-colonne, $Y' = q - 2S$. Par conséquent, la dépendance en fonction de $(2S + n_d - 1)$ se factorise exactement comme pour l'expression (4.2) et nous obtenons par identification pour N arbitraire

$$J_{eff} = - \left(\frac{4t^2}{J} \right) \left\{ \frac{2S + q - 1}{2S(2S + N - 1)(2S + N - q - (2S + q - 1)/N)} + \frac{N - q}{(N - 1)(2S + N - 1)(q + (2S + q - 1)/N)} - \frac{q - 1}{2S(N - 1)(N - q - (2S + q - 1)/N)} \right\}, \quad (4.6)$$

$$U_{eff} = \frac{2t^2}{J} \frac{1}{N - 1} \left(\frac{N - q}{q + Q/N} - \frac{q - 1}{N - q - Q/N} \right), \quad (4.7)$$

à la constante additive suivante

$$C = \frac{-2t^2}{J} \cdot \frac{N - q}{q + Q/N}.$$

Dans la limite de grand N avec $2S/N$ et q/N maintenus finis, nous avons

$$J_{eff} = - \frac{4t^2}{J} \cdot \frac{(N - 2q)}{q(N - q)} \cdot \frac{1}{(2S + N - q)}, \quad (4.8)$$

$$U_{eff} = \frac{2t^2}{J} \cdot \frac{(N - 2q)}{q(N - q)} \quad (4.9)$$

à la constante additive suivante

$$C = - \frac{2t^2}{J} \cdot \frac{N - q}{q}.$$

On notera que J_{eff} est en $\mathcal{O}(1/N^2)$ et dépend de $2S$, tandis que U_{eff} est en $\mathcal{O}(1/N)$ et est indépendant de $2S$. Par ailleurs, U_{eff} est répulsive lorsque J_{eff} est ferromagnétique, et attractive lorsque J_{eff} devient antiferromagnétique.

4.1.4 Interaction effective de spin et stabilité du point fixe de couplage fort

La stabilité du point fixe de couplage fort est déterminée par le signe de l'interaction effective de spin. Une interaction J_{eff} négative correspond à un couplage ferromagnétique, tandis qu'un signe positif est associé à une interaction antiferromagnétique.

Nous reportons sur la Figure 4.1 la dépendance de J_{eff} en fonction de q/N dans la limite de N grand, à différentes valeurs de $2S$. L'interaction effective de spin change de signe, et donc de nature, à $q = N/2$, comme on peut le voir en examinant le numérateur du membre

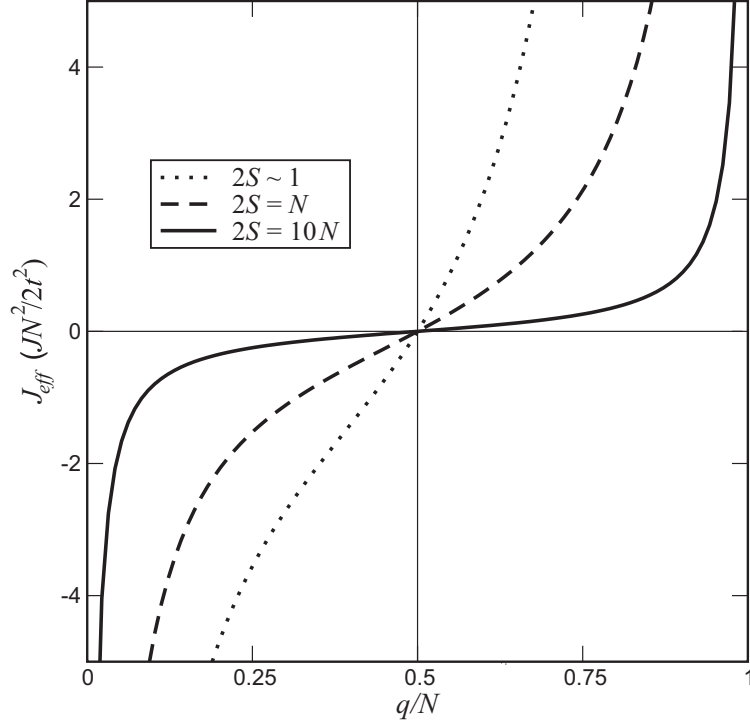


FIG. 4.1 – Interaction effective de spin J_{eff} dans la limite de N grand, en fonction de q/N , à différentes valeurs de $2S$.

de droite de l'équation (4.8). Notons que la valeur de J_{eff} est indépendante du nombre n_d d'électrons de conduction sur le site 1. Les résultats obtenus corroborent ceux dérivés dans la référence [93] pour le cas particulier $n_d = 1$. Cette propriété vient de la disparition du facteur $(2S + n_d - 1)$ dans la différence d'énergies $(\Delta E_0^S - \Delta E_0^A)$ calculée en (4.4).

L'interaction effective de spin demeure ferromagnétique tant que le nombre de boîtes q dans la première colonne du tableau de Young «en L» est inférieur à $N/2$, ce qui correspond à la situation $E_0^S < E_0^A$. Nous pouvons alors utiliser pour J_{eff} les mêmes arguments issus de la théorie du groupe de renormalisation dans la limite de couplage fort que ceux utilisés pour J dans la limite de couplage faible. En incorporant la valeur du couplage effectif de spin dans les équations du groupe de renormalisation, on peut montrer que la perturbation apportée par J_{eff} n'est pas pertinente, et donc que le point fixe de couplage fort est stable. La physique de basses énergies associée au modèle est celle d'un système d'électrons libres faiblement couplé à un spin effectif d'impureté. Elle est caractérisée par un comportement de type liquide de Fermi local [28, 29].

Au contraire lorsque $q > N/2$, les relations entre énergies s'inversent ($E_0^A < E_0^S$), et l'interaction effective de spin est antiferromagnétique. Lors du processus de renormalisation, J_{eff} croît et le point fixe de couplage fort ($J = \infty$) est instable.

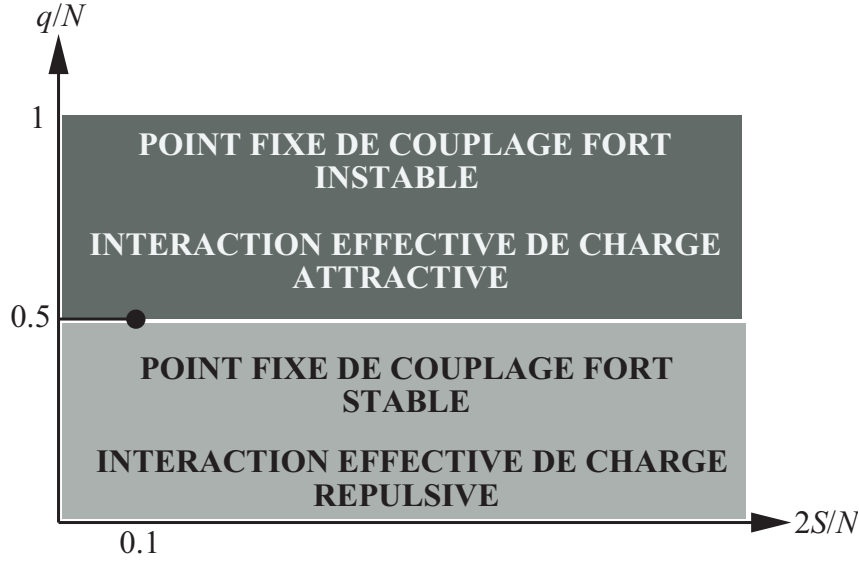


FIG. 4.2 – Diagramme de phase du modèle Kondo généralisé à un canal de conduction dans la limite de N grand (avec $2S/N$ fini), en fonction des paramètres $2S/N$ et q/N de la représentation du spin de l'impureté. Dès que $q > N/2$, le point fixe de couplage fort devient instable quelle que soit la valeur de $2S$. Pour $q = N/2$, le point fixe de couplage fort reste stable jusqu'à des valeurs de $2S/N$ modérément grandes (voir ci-dessus le segment de droite situé en $q/N = 0.5$ se terminant par un point).

La limite $q = N/2$ à laquelle le système change de régime requiert une attention particulière, dans la mesure où le terme dominant dans l'expression de J_{eff} s'annule. En prenant en compte l'expression complète du couplage effectif (4.6), nous trouvons que le point fixe de couplage fort pour un spin d'impureté caractérisé par une représentation «en L» de paramètre $q = N/2$ est stable tant que la composante bosonique $2S$ est inférieure à la valeur critique

$$2S^* = \frac{1}{2} \left(N \sqrt{\frac{2N}{N-1}} - (N-2) \right) .$$

Dans la limite de N grand nous trouvons

$$2S^* = \left(\frac{\sqrt{2}-1}{2} \right) N + \frac{4+\sqrt{2}}{4} + O(1/N) \sim \frac{N}{5} . \quad (4.10)$$

Le point fixe de couplage fort pour $q = N/2$ devient instable à des valeurs modérément grandes de $2S$.

Le diagramme de phase correspondant au modèle dans la limite de N grand est schématisé sur la Figure 4.2 en fonction des paramètres $2S/N$ et q/N , avec $2S/N$ fini.

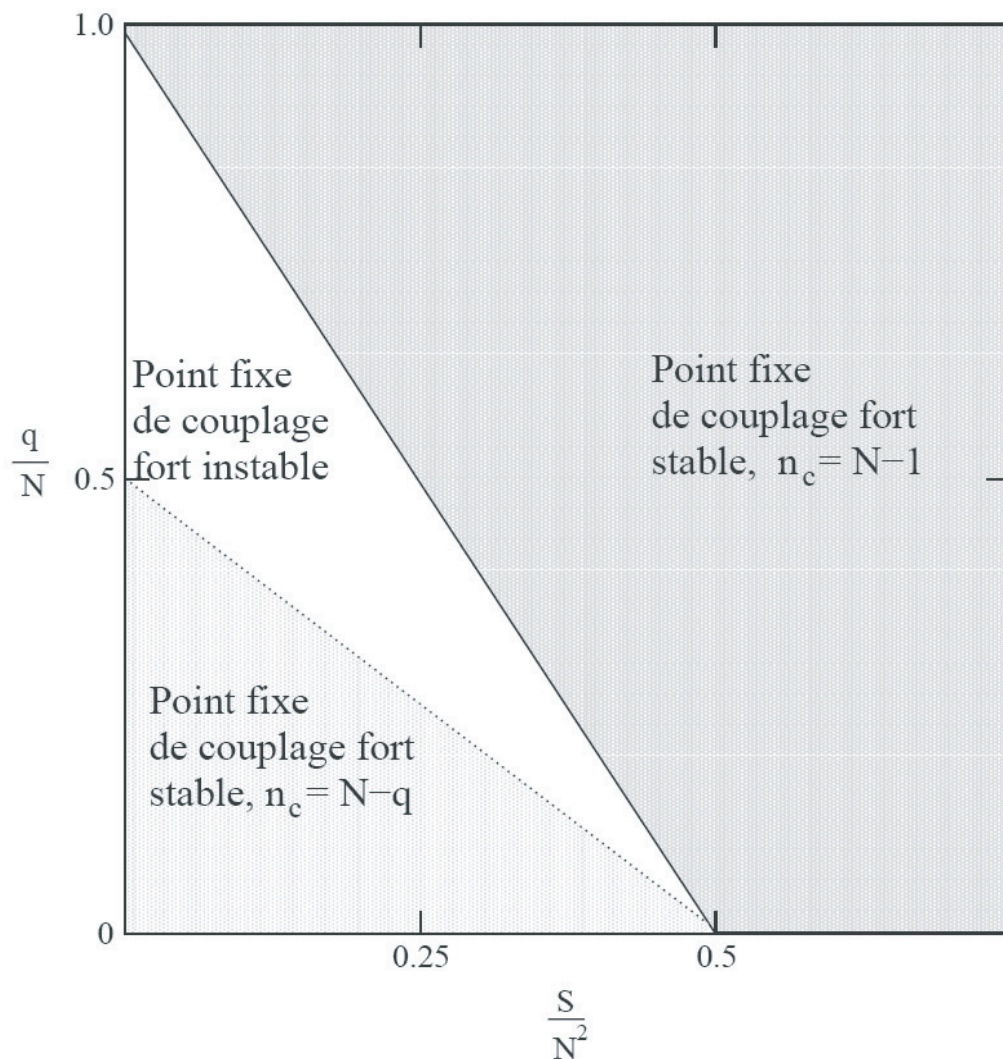


FIG. 4.3 – Diagramme de phase du modèle dans la limite de N grand en fonction des paramètres de l'impureté $2S$ et q , pour $2S$ arbitraire.

Nous avons également établi le diagramme de phase du modèle dans la limite de N grand, dans le cas d'une impureté généralisée «en L» caractérisée par un nombre de degrés de liberté bosoniques $2S$ arbitraire i.e. le rapport $2S/N$ n'est plus nécessairement de valeur finie. Le diagramme de phase obtenu est très riche (voir Figure 4.3). Il présente une région d'instabilité du point fixe de couplage fort, bordée par deux régions pour lesquels les points fixes de couplage fort associés sont stables. Contrairement à la limite de N grand étudiée précédemment (cf. Figure 4.2), la valeur critique de q où le changement de régime, de stable à instable, s'opère n'est plus $N/2$ mais dépend de $2S$.

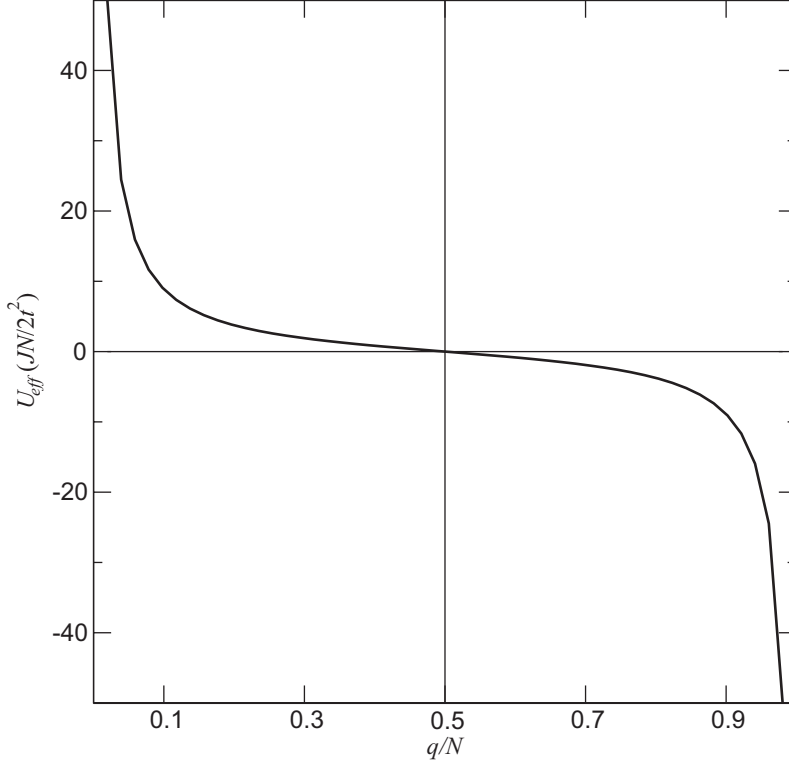


FIG. 4.4 – Interaction effective de charge U_{eff} en fonction de q/N , dans la limite de N grand.

4.2 Interaction effective de charge

Dans cette section nous examinons plus en détail le comportement de l'interaction effective de charge U_{eff} . Cela va nous permettre de mieux comprendre le comportement du système, en particulier au point de changement de régime $q = N/2$ auquel le point fixe de couplage fort devient instable.

4.2.1 Résultats

Nous reportons sur la Figure 4.4 les résultats obtenus pour le couplage effectif de charge U_{eff} en fonction de q/N dans la limite de N grand.

En comparant les équations (4.8) et (4.9), nous pouvons conclure que le changement de signe de U_{eff} est directement relié au changement de signe de l'interaction effective de spin J_{eff} (voir la Figure 4.1). Ce résultat a la conséquence physique suivante. Dans le régime $q < N/2$ pour lequel le point fixe de couplage fort est stable, l'interaction effective de charge

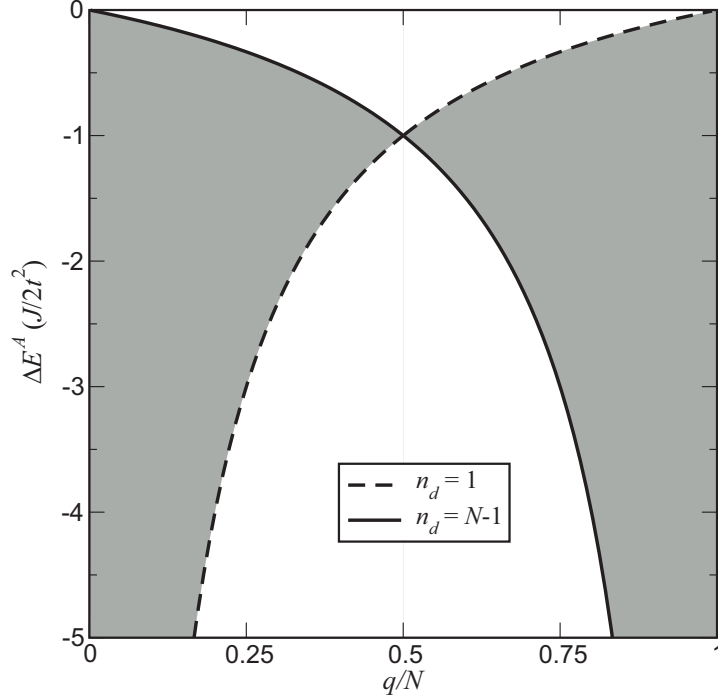


FIG. 4.5 – Terme dominant du décalage en énergie $\Delta E_0^A \sim \Delta E_0^S$, en fonction de q/N , pour $1 < n_d < (N - 1)$ (région grisée), et dans les cas limites $n_d = 1$ (trait pointillé) et $n_d = (N - 1)$ (trait plein). On notera que pour $q/N < 0.5$, l'énergie est minimale pour $n_d = 1$ alors que pour $q/N > 0.5$, le minimum correspond à $n_d = (N - 1)$. On remarquera aussi qu'au point de changement de régime $q/N = 1/2$, le décalage en énergie est égal à $(-2t^2/J)$ quel que soit n_d .

$U_{eff} > 0$ est répulsive, et l'énergie la plus basse découlant de l'équation (4.3) est obtenue pour $n_d = 1$ (nombre minimal d'électrons de conduction sur le site voisin de l'impureté). Par contre dans l'autre régime $q > N/2$ correspondant à un point fixe de couplage fort instable, l'interaction effective de charge $U_{eff} > 0$ est attractive, et le minimum d'énergie est atteint pour $n_d = (N - 1)$ (nombre maximal d'électrons sur le site 1).

Nous avons reporté le décalage en énergie ΔE_0^A (4.3) en fonction de q/N sur la Figure 4.5. La région grisée correspond aux valeurs prises par ΔE_0^A dans la gamme complète des valeurs possibles de n_d . Cette région est bordée par deux cas limites, $n_d = 1$ et $n_d = (N - 1)$. On remarquera qu'à $q = N/2$, nous avons

$$\Delta E_0^A(q = N/2) = -2t^2/J,$$

quelle que soit la valeur de n_d .

Le décalage en énergie ΔE_0^A présente des propriétés très caractéristiques, comme nous allons le voir en examinant le cas de la représentation purement fermionique.

4.2.2 Cas limite de la représentation complètement fermionique

Nous considérons maintenant un spin d'impureté dans le groupe $SU(N)$ associé à une représentation complètement antisymétrique, notée $[1^q]$. La représentation peut être décrite à l'aide de fermions, comme expliqué dans la section B.2.

L'état fondamental $|GS\rangle^{[1^N]}$ est un singulet résultant de l'écrantage de l'impureté par $(N-q)$ électrons de conduction situés sur le site 0. Il s'écrit comme une combinaison linéaire d'opérateurs fermioniques de façon similaire à $|\Delta\rangle$ donnée par l'équation (2.6), mais avec un facteur de normalisation différent. Nous avons

$$|GS\rangle^{[1^N]} \equiv \frac{1}{\sqrt{C_N^q}} \mathcal{A} \left(\left(\prod_{\alpha=i_1}^{i_q} f_{\alpha}^{\dagger} \right) \left(\prod_{\beta=i_{q+1}}^{i_N} c_{\beta}^{\dagger} \right) \right) |0\rangle . \quad (4.11)$$

Le terme de saut donne lieu à deux types de processus, comme décrit dans la section 3.2, dans lesquels les états intermédiaires ont un électron de conduction en plus ou en moins sur le site 0 comparé à l'état fondamental. En utilisant les résultats du Tableau 2.1, nous trouvons pour les énergies d'excitation

$$\Delta E_1 = \frac{J}{2} \left(\frac{N+1}{N} \right) (N-q) , \quad \Delta E_2 = \frac{J}{2} \left(\frac{N+1}{N} \right) q . \quad (4.12)$$

Il apparaît clairement que ΔE_1 et ΔE_2 sont reliées par la transformation $q \rightarrow (N-q)$, qui est exactement la transformation de symétrie *électron-trou*.

L'état fondamental en présence de n_d électrons sur le site 1 est

$$|GS, n_d\rangle = (d_a^{\dagger} d_b^{\dagger} \cdots d_u^{\dagger}) |GS\rangle .$$

Comme il n'y a qu'un seul état intermédiaire possible pour chacun des processus, nous pouvons à nouveau utiliser l'astuce présentée au cours de la section 3.2.3 et écrivons

$$M_1 = t^2 \left(n_d - \sum_{\sigma, \sigma'} \langle GS, n_d | c_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} c_{\sigma'} | GS, n_d \rangle \right) . \quad (4.13)$$

Tant que $n_d > 1$, le deuxième terme de l'équation précédente s'annule pour $\sigma \neq \sigma'$. L'opérateur d'annihilation c_{σ} agissant sur l'état $|GS, n_d\rangle$ ne fait que compter le nombre de termes où l'on trouve un facteur c_{σ}^{\dagger} . Il y en a précisément C_{N-1}^q . Nous en déduisons

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle GS, n_d | c_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} c_{\sigma'} | GS, n_d \rangle &= n_d \left(\frac{C_{N-1}^q}{C_N^q} \right) \\ &= n_d \left(\frac{N-q}{N} \right) , \end{aligned}$$

et

$$M_1 = t^2 n_d \frac{q}{N} .$$

Finalement, en utilisant l'équation (3.19), nous obtenons

$$M_2 = t^2(n_c - n_d) + M_1 = t^2(N - n_d) \left(\frac{N - q}{N} \right) .$$

Les éléments de matrice M_1 et M_2 sont reliés par les mêmes transformations ($q \rightarrow N - q$, $n_d \rightarrow N - n_d$) que les énergies d'excitation (4.12). Cela signifie que le décalage en énergie

$$\Delta E_f = - \left(\frac{2t^2}{J} \right) \left[\frac{n_d}{N + 1} \left(\frac{q}{N - q} \right) + \frac{N - n_d}{N + 1} \left(\frac{N - q}{q} \right) \right] . \quad (4.14)$$

est invariant dans ces transformations.

Dans la limite de grand N , cette expression de ΔE_f coïncide avec l'équation (4.3). Comme nous l'avons déjà remarqué, le décalage en énergie de l'état fondamental de couplage fort est complètement déterminé à l'ordre le plus bas en $(1/N)$ par la composante fermionique.

4.2.3 Rôle de la symétrie électron-trou

Dans le cas de la représentation purement fermionique examiné précédemment, l'état fondamental de couplage fort n'est pas dégénéré et le point fixe de couplage fort est stable. L'effet du terme de saut est simplement de décaler l'énergie de l'état fondamental sans levée de dégénérescence. On observe toutefois deux régimes correspondant à une interaction effective de charge répulsive et attractive, suivant la valeur de q . Ces deux régimes sont caractérisés par des valeurs différentes de n_d pour lesquelles l'énergie est minimisée. Ce comportement est une conséquence directe de la symétrie *électron-trou* dans le cas fermionique, donnée par les transformations

$$q \rightarrow (N - q) , \quad n_d \rightarrow (N - n_d) .$$

Le comportement auquel donne lieu une impureté purement fermionique associée à une représentation à q boîtes est le même que pour une représentation à $(N - q)$ boîtes, dès lors que l'on réinterprète les électrons et l'impureté en termes des trous. Ainsi si $n_d = 1$ (répulsion d'électrons) minimise l'énergie de l'état fondamental pour $q < N/2$, alors l'énergie pour une impureté faite de «trous» est minimisée pour $(N - n_d) = 1$, correspondant à un nombre maximal d'électrons $n_d = (N - 1)$, autrement dit à une attraction d'électrons. Ce comportement est schématisé sur la figure 4.6.

L'ajout d'une composante bosonique à la représentation du spin de l'impureté brise cette symétrie électron-trou. Tandis que les deux régimes décrits plus haut correspondant à une interaction effective de charge attractive ou répulsive sont dus à la composante fermionique, la dégénérescence des états apportée par la composante bosonique conduit à une instabilité du point fixe de couplage fort, exactement au point où l'impureté écrantée se met à attirer les électrons de conduction sur son site voisin.

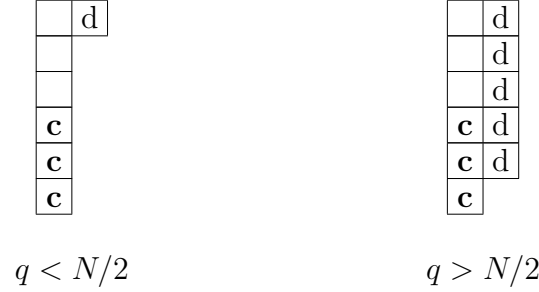


FIG. 4.6 – Les deux configurations pour l'état fondamental de couplage fort associé à un spin d'impureté purement fermionique, une fois le terme de saut au site plus proche voisin inclus. Lorsque $q > N/2$, l'impureté tend à y attirer le plus grand nombre d'électrons possible, $(N - 1)$.

4.3 Propriétés physiques du modèle

Nous terminons ce chapitre par quelques remarques concernant les propriétés physiques du modèle dans les différents régimes trouvés.

Comme dans tous les modèles Kondo impliquant un couplage antiferromagnétique, il existe un cross-over entre le régime de couplage faible situé au-dessus d'une température Kondo T_K , et le régime de basses énergies. Lorsque le point fixe de couplage fort est stable, on s'attend à ce que pour $T \ll T_K$ l'impureté effective (écranée) située à l'origine interagisse avec le reste des électrons via un couplage faible. Les propriétés physiques à basses températures sont contrôlées par la dégénérescence de l'impureté écranée

$$d([2S - 1]) = C_{N+2S-2}^{N-1}.$$

Ainsi, on s'attend à trouver une entropie résiduelle

$$\mathcal{S}^i \sim \ln C_{N+2S-2}^{N-1},$$

et une susceptibilité de Curie

$$\chi^i \sim C_{N+2S-2}^{N-1}/T,$$

des corrections logarithmiques près [109, 111]. Ce sont précisément les résultats auxquels on s'attend pour un spin d'impureté associé à une représentation purement symétrique. Il existe cependant une différence concernant le nombre d'électrons de conduction situés sur le site de l'impureté : il est de $(N - 1)$ pour une impureté bosonique, mais limité à $(N - q)$ dans le cas d'une impureté décrite par une représentation mixte. Compte tenu de cette différence nous pouvons donc nous attendre à ce que ces deux types de représentation conduisent à des résultats différents pour les quantités impliquant le déphasage de la fonction électronique après diffusion des électrons de conduction par l'impureté. Considérons par exemple le cas de la représentation fondamentale, $2S = 1$. Le déphasage δ définit la contribution de l'impureté à la résistivité ρ^i . A température et champs magnétique nuls, nous avons [14]

$$\rho^i \propto \sin^2 \delta. \quad (4.15)$$

Pour un spin d'impureté associé à une représentation antisymétrique dans le groupe $SU(N)$, le déphasage dans le cas complètement écranté est [109]

$$e^{2i\delta} = -e^{-i\pi(1-2\frac{q}{N})}. \quad (4.16)$$

Si nous choisissons le déphasage de façon à avoir $|\delta| < \pi/2$, nous trouvons

$$\delta = \begin{cases} \pi \left(\frac{q}{N} \right), & q < N/2 \\ -\pi \left(\frac{N-q}{N} \right), & q > N/2 \end{cases} \quad (4.17)$$

La limite unitaire $|\delta| = \pi/2$ est atteinte quand la symétrie électron-trou est respectée, à savoir pour $q = N/2$. Nous voyons que cela correspond à la valeur de q où ΔE_f (4.14) est indépendante de n_d , indiquant le changement de régime de l'interaction effective de charge, de répulsif à attractif.

Dans le régime $q > N/2$, il existe une contribution magnétique à l'entropie, et une contribution de type Curie à la susceptibilité, puisqu'en présence d'un seul canal de conduction électronique (seul cas que nous avons traité dans toute cette première partie), l'impureté reste toujours sous-écrantée. Ce comportement diffère de celui observé dans le cadre du modèle Kondo multicanal, qui est caractérisé par un point fixe de couplage intermédiaire où les degrés de liberté magnétiques de l'impureté sont complètement écrantés [112].

Chapitre 5

Conclusion

Au cours de cette première partie, nous avons étudié un modèle Kondo à un canal de conduction électronique et un spin d'impureté du groupe $SU(N)$ caractérisé par une représentation de symétrie mixte, impliquant des degrés de liberté bosoniques et fermioniques. Ces degrés de liberté correspondent respectivement aux lignes et colonnes d'un tableau de Young «en L», respectivement. Dans la limite de N grand, ce modèle Kondo conduit à un changement de régime lorsque le nombre q de degrés de liberté fermioniques composant la représentation devient plus grand que $N/2$, dans la limite de N grand. Le point fixe de couplage fort est stable pour $q < N/2$ et décrit alors la physique de basses énergies du système pour $q < N/2$, mais devient instable dès que $q > N/2$. Nous avons identifié l'origine de cette instabilité comme reliée au changement de caractère, de répulsif à attractif, de l'interaction effective de charge entre l'impureté écrantée située à l'origine et les électrons de conduction situés sur le site voisin. Ce changement de comportement est déjà présent dans le cas d'une représentation purement fermionique du spin de l'impureté, il intervient alors au point de symétrie électron-trou $q = N/2$. Le seul rôle des degrés de liberté bosoniques du spin de l'impureté apparaissant dans la représentation mixte est d'introduire une dégénérescence de l'état fondamental au point fixe de couplage fort, qui est ensuite levée par le terme de saut. Il en résulte un couplage effectif J_{eff} , dont les propriétés sont gouvernées par la composante fermionique du spin de l'impureté, tout comme celles de l'interaction effective de charge.

Nous avons suivi une approche systématique afin d'obtenir les expressions exactes des états impliqués dans les calculs. Ce travail pourrait servir de point de départ pour étudier des systèmes plus riches, tels que ceux considérés par le modèle Kondo multicanal.

Le problème est maintenant de déterminer précisément la physique du système dans le régime où le point fixe de couplage fort est instable. Ce problème est important dans la mesure où il pourrait ensuite être généralisé au cas du réseau Kondo et permettre à terme une meilleure compréhension du comportement non-liquide de Fermi observé dans les composés de fermions lourds. Dans ce but il serait souhaitable de poursuivre l'étude en ayant recours à des méthodes non perturbatives, comme le groupe de renormalisation numérique ou l'ansatz de Bethe, qui ont permis dans le passé des progrès importants dans la compréhension des modèles d'impuretés. Malheureusement ces deux approches semblent être très limitées dans le cadre du modèle que nous considérons. L'instabilité du point fixe

de couplage fort décrite précédemment apparaît pour $N \geq 5$. Pour $N = 5$, chacun des sites du réseau peut être occupé par au plus 5 électrons de conduction et l'impureté la plus simple associée à un point fixe de couplage intermédiaire correspond à un multiplet de 45 états. Un espace de Hilbert aussi grand limite les performances d'une approche basée sur le groupe de renormalisation numérique. Les limitations de l'ansatz de Bethe sont de nature plus fondamentale. En raison des propriétés du spin de l'impureté caractérisé par une représentation de symétrie mixte, le modèle n'est pas intégrable [98]. Dans les modèles Kondo étudiés auparavant, un électron de conduction ne peut se coupler à l'impureté que de deux façons différentes : symétriquement ou antisymétriquement. La matrice S qui en résulte est du même type que celle apparaissant dans les modèles d'impureté intégrables. La nouveauté introduite par l'impureté considérée ici est que l'électron de conduction peut être couplé à l'impureté de trois façons différentes. L'existence de cette troisième configuration, qui est à l'origine de l'instabilité du point fixe de couplage fort, brise les équations de Yang-Baxter associées au modèle. Il est tout de même possible de construire des modèles d'impureté intégrables, dont le spin est caractérisé par une représentation quelconque [99]. Cependant l'intégrabilité est obtenue au prix de l'ajout d'autres termes de couplage entre l'impureté et les électrons de conduction, ce qui modifie considérablement la physique du système.

Afin d'identifier et étudier le point fixe de couplage intermédiaire dans le cas où la physique du système n'est pas décrite par le point fixe de couplage fort, nous avons développé une méthode différente de celles mentionnées plus haut, basée sur le groupe de renormalisation perturbatif. Ce travail est présenté dans la deuxième partie.

Partie II

Analyse du point fixe de couplage intermédiaire d'un modèle Kondo généralisé multicanal

D. Bensimon, A. Jerez, and M. Lavagna,
"Intermediate coupling fixed point of a generalized $SU(N)$ single-impurity Kondo model:
a perturbative renormalization group study",
in preparation.

Chapitre 6

Introduction

Au cours de la première partie, nous avons montré que le modèle Kondo à un canal de conduction électronique dont le spin de l'impureté est associé à une représentation généralisée, «en L» en termes de tableaux de Young, du groupe $SU(N)$ présente une instabilité du point fixe de couplage fort. Ceci indique que la physique du système est décrite par un point fixe de couplage intermédiaire. L'hypothèse la plus simple est de considérer que ce point fixe, au moins pour certaines classes de représentations du spin de l'impureté, se situe au voisinage de celui décrivant le système d'électrons libres, correspondant à un couplage Kondo nul. L'approche du groupe de renormalisation perturbatif offre alors une méthode très efficace afin d'identifier puis caractériser le point fixe de couplage intermédiaire.

Dans ce chapitre nous donnons une brève introduction aux concepts à la base du groupe de renormalisation (RG). Les origines de la théorie de la renormalisation se trouvent dans le domaine de la physique des particules [20, 21, 22]. Cette formulation perturbative du RG est historiquement très importante. Elle a en effet démontré à la fin des années 60 la puissance de la théorie de la renormalisation pour étudier des problèmes de physique de la matière condensée, comme par exemple l'effet Kondo [19, 114, 115]. Une présentation très pédagogique des idées de la renormalisation appliquées à l'étude de l'effet Kondo est donnée par les articles de P. Nozières [17, 94, 116]. Depuis, la théorie de la renormalisation a été utilisée pour aborder d'autres problèmes de physique de la matière condensée, comme les systèmes unidimensionnels [117, 118].

L'approche perturbative du RG repose sur le concept de transformation d'échelle. Par la suite nous emploierons la terminologie anglaise de *scaling*. Les arguments de scaling permettent de bien comprendre le comportement d'un système Kondo. Considérons un spin localisé en interaction via un couplage J_K avec un gaz d'électrons décrit par une bande de conduction de largeur D , et d'énergie de Fermi ϵ_F . L'échec de la théorie de perturbation à basses températures provient, comme l'a montré J. Kondo [9], de l'existence de termes logarithmiques, $\ln(k_B T/D)$, par exemple dans le développement en température de la résistivité. L'idée principale de la méthode de scaling est d'incorporer ces excitations de hautes énergies par une renormalisation de la constante de couplage J_K . Plus précisément, seuls les électrons de conduction situés au voisinage de la surface de Fermi disposent d'un espace de phase suffisant pour interagir efficacement avec le spin de l'impureté localisée. Nous pouvons donc éliminer les degrés de liberté de hautes énergies: la bande des électrons de conduction est

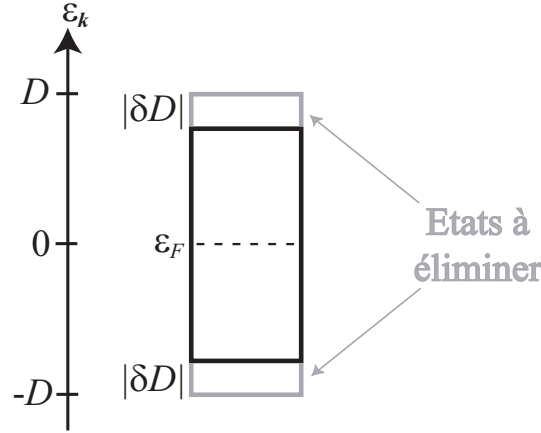


FIG. 6.1 – *Etats d'électron et de trou dans la bande de conduction. Après renormalisation, seuls les états d'énergie $\epsilon_{\mathbf{k}}$, tels que $\epsilon_{\mathbf{k}} \in [-D + \delta D, D - \delta D]$, sont conservés.*

partagée entre les états d'énergie $0 < |\epsilon_{\mathbf{k}}| < D - \delta D$, et ceux situés en bord de bande $|\epsilon_{\mathbf{k}}| > D - \delta D$ (voir Figure 6.1). En éliminant ces derniers, nous obtenons un modèle effectif caractérisé par une largeur de bande réduite $D' = D - \delta D$, un couplage renormalisé J'_K entre le spin de l'impureté et les électrons de conduction restants, et des termes additionnels d'interaction que l'on peut négliger. Ce processus de scaling génère ainsi successivement une famille de modèles effectifs, n'incorporant que les degrés de liberté physiquement pertinents.

Une question d'importance est de savoir jusqu'où le processus de scaling peut être réitéré. Deux situations peuvent se produire. A température finie, la largeur de bande des électrons de conduction ne peut être réduite en-dessous d'une valeur limite $D \sim k_B T$. Si T est suffisamment élevée, le système se trouve dans un régime pour lequel le couplage effectif de spin est faible et la théorie de perturbation reste valide. A l'inverse, à température nulle, qui est le seul cas que nous considérerons au cours de cette seconde partie, la renormalisation peut (et doit) être réitérée sans aucune contrainte. Les paramètres D et J_K atteignent alors des valeurs invariantes par transformation du RG, on dit qu'elles caractérisent un point fixe [80]. Les point fixes associés au modèle décrivent les différents régimes de basses énergies du système.

L'évolution du couplage J_K avec le scaling de la largeur de bande D définit le *flot de renormalisation* (cf. Figure 6.2). L'équation du flot de renormalisation est donnée par

$$\frac{d(J_K \rho)}{dD} = \frac{1}{D} f(J_K \rho), \quad (6.1)$$

où ρ est la densité d'états d'électroniques, considérée constante. Nous étudions maintenant les propriétés du flot de renormalisation d'un système d'électrons de conduction en interaction avec un spin d'impureté via un couplage Kondo supposé initialement faible. En utilisant l'approche perturbative de RG, Anderson a montré que l'équation du flot de renormalisation est [19]

$$\frac{d(J_K \rho)}{d(\ln D)} = -(J_K \rho)^2, \quad (6.2)$$

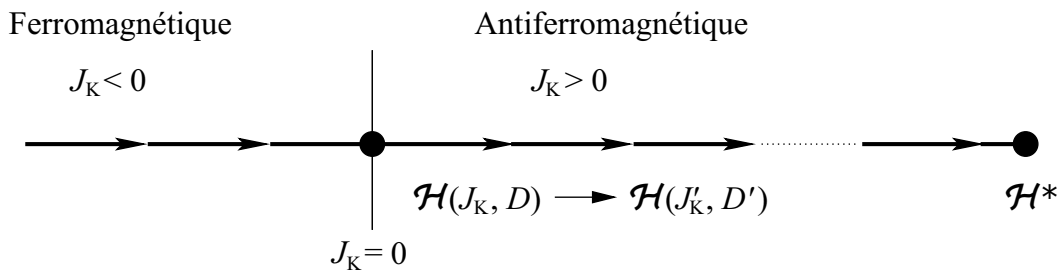


FIG. 6.2 – Flot de renormalisation du modèle Kondo, dérivé à partir de l'Equation (6.2). Le point fixe du système d'électrons libres ($J_K = 0$) est instable par rapport à une interaction antiferromagnétique ($J_K > 0$). Le scaling de la bande de conduction génère progressivement une famille de modèles effectifs, caractérisés chacun par un couplage Kondo J'_K renormalisé. Le point fixe de couplage fort est décrit par l'hamiltonien \mathcal{H}^* .

Si le couplage Kondo initial est ferromagnétique ($J_K < 0$), l'équation précédente montre que J_K diminue avec D jusqu'à atteindre la valeur 0 correspondant au point fixe du système d'électrons libres. L'interaction Kondo ferromagnétique peut donc être traitée comme une perturbation faible du point fixe $J_K = 0$. Dans un langage plus formel, nous dirons que l'interaction est une perturbation non pertinente du point fixe, ou encore que le point fixe est stable par rapport à cette perturbation. A l'inverse si le couplage Kondo initial est antiferromagnétique ($J_K > 0$), l'équation (6.2) montre que l'interaction effective J_K augmente au fur et à mesure que la largeur de bande D est renormalisée à 0. Le système s'éloigne donc du point fixe d'électrons libres pour atteindre un point fixe de nature différente caractérisé par un couplage Kondo au contraire renforcé. Nous dirons alors que l'interaction Kondo constitue une perturbation pertinente, et que le point fixe initial est instable. Dans ce cas on ne peut pas décrire correctement le comportement physique de basses énergies du système par une théorie de perturbation autour du point fixe d'électrons libres, ce qui explique la divergence logarithmique trouvée par Kondo dans le développement de la résistivité en fonction de la température [9]. Ce comportement ne peut être décrit que par deux méthodes : une théorie (nécessairement non-perturbative) capable de suivre le flot de renormalisation à partir du modèle initial jusqu'au régime de basses énergies, ou bien une théorie de perturbation autour du vrai point fixe caractérisant le système. Par exemple dans le cas du modèle Kondo le plus simple, décrivant un gaz d'électrons de conduction répartis sur un seul canal en interaction avec un spin localisé 1/2, Anderson [19, 115] avait émis la conjecture que le point fixe associé au modèle est caractérisé par un couplage infini, $J_K = \infty$ (point fixe de couplage fort), ce qui a été confirmé par Wilson grâce à la théorie du RG numérique [24, 25].

Dans cette deuxième partie, nous présentons une méthode permettant d'identifier puis étudier le point fixe de couplage intermédiaire associé au modèle Kondo, lorsque le point fixe de couplage fort est instable. Cette méthode repose sur la théorie du groupe de renormalisation, formulée suivant une approche perturbative. Un gaz d'électrons de conduction répartis sur K canaux portant chacun un spin de symétrie généralisée au groupe $SU(N)$ interagit par un couplage Kondo avec une impureté, dont le spin est associé à une représentation de $SU(N)$ caractérisée par une symétrie mixte, «en L» en terme de tableau de Young (voir la

Figure 7.1 du chapitre suivant). Ce modèle constitue donc la version multicanale de celui considéré dans la première partie. Le degré de liberté supplémentaire apporté par la multiplicité des canaux permet d'accéder à une physique potentiellement beaucoup plus riche. La représentation du spin de l'impureté que nous adoptons ici diffère de celle utilisée dans la partie précédente, bien que toutes deux soient équivalentes. En effet, chacun des états de spin de l'impureté n'est plus représenté en terme d'une combinaison de bosons et de fermions comme précédemment, mais par un unique pseudofermion d'Abrikosov [106]. Les propriétés de symétrie de spin sont donc maintenant entièrement contenues dans les matrices des générateurs de $SU(N)$. Afin d'incorporer convenablement la contrainte relative au nombre de particules représentant le spin de l'impureté présentes au point origine du réseau, problème inhérent à tout modèle impliquant un hamiltonien de spin quantique, nous suivons la méthode proposée par Popov et Fedotov [120]. Cette formulation est particulièrement puissante pour déterminer les propriétés de basses énergies, comme l'ont montré Gan *et al.* dans le cadre du modèle Kondo multicanal de symétrie $SU(2)$ [129, 130]. En utilisant une méthode d'intégration fonctionnelle, nous dérivons la *fonction d'échelle* β à température nulle à partir d'arguments de scaling décrits plus haut

$$\beta(J_K\rho) = \frac{d(J_K\rho)}{d(\ln D)}. \quad (6.3)$$

Cette dernière équation fournit des informations très instructives sur la physique de basses énergies du système. Les deux premiers termes du développement en perturbation en J_K de la fonction d'échelle sont obtenus en fonction des paramètres $2S$ et q caractérisant la représentation du spin de l'impureté et du nombre de canaux électroniques K , sans qu'aucune restriction ne soit imposée ni pour $2S$ ni pour q . La famille de représentations que nous pouvons ainsi étudier est donc vaste, puisqu'elle inclut toute représentation «en L» ainsi que les cas limites correspondant aux représentations purement bosonique ou fermionique (cf. Appendice B). Dans le cas du modèle Kondo multicanal caractérisé par une impureté de spin $1/2$, les résultats obtenus sont en accord avec ceux obtenus par Gan *et al.* [129, 130].

Cette seconde partie est organisée de la façon suivante. Le chapitre 7 présente le modèle et son formalisme, qui comme nous l'avons mentionné diffère de celui adopté dans la première partie. Nous présentons les différentes représentations des spins, associées à l'impureté et aux électrons de conduction. La formulation des états de spin de l'impureté est assez technique, comme tenu de la symétrie mixte dans le groupe $SU(N)$. Ces propriétés de symétrie sont contenues dans les matrices des générateurs qui ne se trouvent plus dans la représentation fondamentale, contrairement au cas des spins électroniques qui est beaucoup plus standard. Nous montrons ensuite comment, en généralisant la méthode développée par Popov et Fedotov [120], il est possible de prendre en compte la contrainte relative au nombre de pseudofermions présents sur le site de l'impureté. Cette méthode a l'avantage de traiter exactement la contrainte en éliminant les états non physiques, tout en donnant un cadre simple permettant un développement perturbatif de la fonction de partition. Elle repose sur l'introduction d'une distribution discrète de potentiels chimiques, qui sont des nombres complexes imaginaires purs. L'effet de ces potentiels chimiques est de modifier la nature fermionique des fréquences de Matsubara associées aux pseudofermions de l'impureté. Un moyen extrêmement puissant pour déterminer la fonction d'échelle β est fourni par l'équation

de Callan-Symanzik [139, 140], obtenue en garantissant l'invariance d'une quantité physique (à définir) par transformation du groupe de renormalisation. La quantité physique retenue est le taux de diffusion des électrons de conduction par le spin de l'impureté, proportionnel à la partie imaginaire de la self-energy électronique. Nous calculons cette dernière dans le chapitre 8. La self-energy des électrons de conduction est obtenue par un développement perturbatif de la fonction de partition en J_K , poursuivi au quatrième ordre. Ce calcul comporte à chacun des ordres de perturbation deux étapes distinctes : le traitement du facteur de spin, et celui de la contribution apportée par les potentiels chimiques imaginaires. De l'expression de la self-energy électronique, on peut alors en déduire la fonction d'échelle. Les résultats sont présentés dans le chapitre 9. La fonction β est ainsi dérivée dans une théorie perturbative au troisième ordre en J_K , pour plusieurs classes de représentation du spin de l'impureté. Nous identifions dans chacun des cas la valeur critique de couplage J^* , caractérisant le point fixe de couplage intermédiaire dans le régime où le point fixe de couplage fort est instable. Cette valeur critique J^* correspond au point où β s'annule : $\beta(J^*\rho) = 0$. On dit que J^* est un *zéro* de la fonction β . La valeur de J^* obtenue permet de définir le régime de validité du développement perturbatif : ce dernier n'est pertinent que dans le cas où le point fixe de couplage intermédiaire se situe au voisinage du point fixe du système d'électrons libres, autrement dit uniquement si J^* est proche de 0. Ce critère de validité impose des restrictions aux configurations concernant les valeurs de $2S$, q et K accessibles par cette méthode. Par exemple, l'étude de Nozières et Blandin [16] n'est physiquement pertinente que lorsque le nombre de canaux K devient très grand devant 1. Des propriétés de basses énergies caractérisant le système sont également obtenues. En particulier nous présentons les résultats concernant l'*exposant critique* Δ , donné par

$$\Delta = \left. \frac{d\beta}{d(J_K\rho)} \right]_{J_K=J^*}. \quad (6.4)$$

L'exposant critique Δ a une grande importance dans la caractérisation des propriétés de basses énergies du système. En effet, au voisinage du point fixe de couplage intermédiaire autrement dit dans le régime de basses énergies, la dépendance thermique des différentes quantités physiques du système (entropie, susceptibilité magnétique, . . .) suit des lois de puissance en (T/T_K) entièrement contrôlées par Δ . Cet exposant critique est une marque du concept d'universalité caractérisant le modèle Kondo.

L'appendice C présente les propriétés des matrices des générateurs du groupe $SU(N)$, associés aux représentations du spin de l'impureté et des électrons de conduction. Nous donnons notamment des relations d'identités utiles pour le calcul des facteurs de spin résultant des matrices des générateurs dans une représentation «en L» arbitraire. Nous présentons dans l'appendice D le calcul à température nulle du terme de troisième ordre en J_K intervenant dans le développement perturbatif de la self-energy électronique. Le facteur de spin et la contribution provenant des potentiels chimiques imaginaires sont dérivés de manière exhaustive. Les termes d'ordre supérieur dans le calcul en perturbation sont obtenus de façon similaire.

Chapitre 7

Modèle Kondo généralisé multicanal: présentation et méthodes

7.1 Préambule

Dans la partie précédente, nous avons étudié la stabilité du point fixe de couplage fort d'un modèle Kondo à une impureté de symétrie de spin $SU(N)$ comportant un seul canal de conduction, à partir d'une théorie de perturbation au second ordre en t , le terme de saut. Dans le langage des tableaux de Young, le spin de cette impureté est associé à une représentation dite «en L», comme montré sur la figure 7.1. Il peut s'exprimer comme une combinaison de degrés de liberté fermioniques et bosoniques [92, 93]. Les degrés de liberté bosoniques correspondent à la première ligne de $2S$ boîtes, tandis que les degrés fermioniques sont associés aux q boîtes constituant la première colonne.

$$\{\Gamma\} \equiv \left. \begin{array}{c} \overbrace{\square \square \square \square \square \square}^{2S} \\ \square \\ \square \end{array} \right\} q$$

FIG. 7.1 – Représentation du spin de l'impureté de symétrie $SU(N)$ en terme de tableau de Young. Cette représentation, dite «en L», est notée $[2S, 1^{q-1}]$. Elle peut être décrite en utilisant une combinaison de degrés de liberté bosoniques et fermioniques.

Dans le cas d'un couplage Kondo antiferromagnétique ($J_K > 0$), de précédentes analyses utilisant la méthode du Groupe de Renormalisation (RG) [14, 19, 94] ont montré que le flot de renormalisation conduit le système vers un point fixe caractérisé par un couplage infini ($J_K = \infty$), nommé point fixe de couplage fort (SC). Lorsque le point fixe de couplage fort est stable, le système se comporte comme un liquide Fermi. A l'inverse, le comportement non liquide de Fermi (NFL) est en général relié à l'existence d'une instabilité de ce point fixe.

Le modèle que nous avons considéré dans la première partie donne lieu à deux régimes. Le premier régime présente une instabilité du point fixe SC. Nous avons montré que ce caractère instable, venant du changement de signe dans l'interaction effective de spin, est relié au changement de nature, de répulsive à attractive, de l'interaction effective de charge. Il s'agit à notre connaissance du seul modèle de type Kondo où l'instabilité du point fixe SC n'est pas due à la présence de degrés de liberté supplémentaires, comme la considération de canaux électroniques de conduction supplémentaires (on parle alors de modèle Kondo multicanal [16]) ou d'une anisotropie du couplage Kondo, mais uniquement aux propriétés de symétrie du spin de l'impureté lui-même.

De façon plus précise dans la limite de grand N , le point fixe SC est stable pour $q < N/2$. Il décrit les propriétés de basses énergies du modèle Kondo à une impureté «en L» et un canal de conduction électronique. Par contre il devient instable dès que $q > N/2$, ce qui suggère l'existence d'un point fixe de couplage intermédiaire (IC) caractérisé par une valeur critique finie de la constante de couplage de spin. Dans ce chapitre nous allons présenter plus en détail le modèle étudié, ainsi que les méthodes utilisées pour identifier et analyser le point fixe IC.

7.2 Modèle Kondo généralisé $SU(N) \times SU(K)$

Nous avons considéré initialement un modèle Kondo $SU(N)$ à un seul canal de conduction électronique. Cependant afin d'aborder une physique potentiellement beaucoup plus riche, nous considérons maintenant la version multicanale du modèle. Le cas à un canal sera étudié comme un cas particulier.

L'hamiltonien décrivant le modèle Kondo généralisé multicanal à une impureté de symétrie de spin $SU(N)$ que nous allons étudier est donné par

$$\mathcal{H}_K = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}_K, \quad (7.1)$$

où \mathcal{H}_0 est la partie électronique libre et \mathcal{V}_K représente l'interaction entre le spin de l'impureté et le spin des électrons de conduction. La symétrie de spin $SU(N)$ ($N \geq 2$) est imposée à la fois pour l'impureté et les électrons de conduction, et on suppose qu'il existe $K (\geq 1)$ canaux de conduction électronique

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1}^N \sum_{\lambda=1}^K \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma,\lambda}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma,\lambda}, \quad (7.2)$$

où $c_{\mathbf{k},\sigma,\lambda}^\dagger$ est l'opérateur de création d'un électron de conduction d'impulsion \mathbf{k} correspondant à l'énergie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, de couleur de spin σ et d'indice de canal λ . Nous avons pour le second terme \mathcal{V}_K de l'hamiltonien \mathcal{H}_K (7.1)

$$\mathcal{V}_K = J_K \vec{\mathbf{S}}_i \cdot \vec{\mathbf{S}}_e(0), \quad (7.3)$$

qui correspond à l'interaction Kondo antiferromagnétique ($J_K > 0$) entre le spin $\vec{\mathbf{S}}_i$ de l'impureté placée à l'origine et le spin $\vec{\mathbf{S}}_e(0)$ des électrons de conduction situés sur le site de l'impureté.

Nous allons maintenant nous attacher aux représentations associées respectivement au spin de l'impureté et à celui des électrons de conduction.

7.2.1 Représentation du spin de l'impureté

Les états de spin de l'impureté correspondant à la représentation irréductible $\{\Gamma\}$ du groupe $SU(N)$ peuvent être écrits en terme de pseudofermions d'Abrikosov [106]. Nous notons $d_{\{\Gamma\}}$ la dimension de $\{\Gamma\}$, dont l'expression générale est donnée dans l'appendice C. Chaque état de spin est décrit par un fermion. Par conséquent nous avons $d_{\{\Gamma\}}$ types de pseudofermions respectivement créés et annihilés par les opérateurs

$$f_{\gamma}^{\dagger}, f_{\gamma}, 1 \leq \gamma \leq d_{\{\Gamma\}}, \quad (7.4)$$

soumis à la contrainte suivante

$$\hat{n}_f = \sum_{\gamma=1}^{d_{\{\Gamma\}}} f_{\gamma}^{\dagger} f_{\gamma} = 1. \quad (7.5)$$

Compte-tenu de la structure du groupe de Lie $SU(N)$ [101], les opérateurs de spin comportent $(N^2 - 1)$ composantes données par l'expression suivante

$$\vec{\mathbf{S}}_i = \left[\mathbf{S}_i^A \right]_{1 \leq A \leq N^2 - 1},$$

avec

$$\mathbf{S}_i^A = \sum_{\gamma, \gamma'=1}^{d_{\{\Gamma\}}} f_{\gamma'}^{\dagger} \mathbf{\Gamma}_{\gamma', \gamma}^A f_{\gamma}, \quad (7.6)$$

où $\tilde{\mathbf{\Gamma}}^A$ est l'un des $(N^2 - 1)$ générateurs du groupe de spin $SU(N)$ dans la représentation $\{\Gamma\}$.

Un point technique crucial doit être soulevé ici. Compte tenu de la forme du spin de l'impureté généralisée que nous considérons, qui n'est pas dans la représentation fondamentale de $SU(N)$ (à savoir une boîte simple en terme de tableau de Young), et du formalisme de pseudofermions que nous adoptons, les générateurs de $SU(N)$ ne sont pas représentés par des matrices de dimension $(N \times N)$, que l'on rencontre le plus souvent, mais par des matrices de dimension $(d_{\{\Gamma\}} \times d_{\{\Gamma\}})$. Une telle situation peut déjà se produire dans le groupe $SU(2)$, si au lieu de considérer un spin $1/2$ (correspondant à la représentation fondamentale) on travaille avec un spin $1, 3/2, \text{etc} \dots$ [119]. Les propriétés des matrices $\{\tilde{\mathbf{\Gamma}}^A\}$ dont nous aurons besoin sont détaillées dans l'appendice C.

Nous devons remarquer que cette façon de représenter les états de spin de l'impureté, bien qu'équivalente, est totalement différente de celle que nous avons utilisée au cours de la première partie : les états de spin de l'impureté étaient dans ce cas obtenus par une combinaison de $(2S + q - 1)$ particules, chaque boîte du tableau de Young «en L» étant associée soit à un boson soit à un fermion. Les générateurs de $SU(N)$ à considérer, correspondant

alors à la représentation fondamentale, étaient exprimés comme des matrices ($N \times N$). Cette formulation était la plus pertinente, car dans la partie précédente nous devions écrire explicitement les états d'impureté, et calculer les éléments de matrice de transition entre l'état fondamental et les états excités.

Cependant l'approche que nous considérons maintenant en terme de pseudofermions s'avèrera beaucoup plus appropriée dans le cadre du formalisme d'intégration fonctionnelle que nous allons développer. En effet au cours de cette seconde partie nous utilisons les propagateurs de Green, sans avoir à considérer la forme explicite des différents états.

7.2.2 Représentation du spin électronique

Comme il est indiqué sur la figure 7.2, chaque électron de conduction est associé à la représentation fondamentale de $SU(N)$. Le spin $\vec{S}_e(0)$ des électrons de conduction situés à l'origine comporte $(N^2 - 1)$ composantes

$$\begin{aligned} \vec{S}_e(0) &= \left[\mathbf{S}_e^A(0) \right]_{1 \leq A \leq N^2-1}, \\ \mathbf{S}_e^A(0) &= \sum_{\sigma, \sigma'=1}^N \sum_{\lambda=1}^K c_{\sigma', \lambda}^\dagger(0) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma', \sigma}^A c_{\sigma, \lambda}(0), \end{aligned} \quad (7.7)$$

où $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^A$ est l'un des $(N^2 - 1)$ générateurs du groupe de spin $SU(N)$ dans la représentation $\{\sigma\}$ et $c_{\sigma', \lambda}(0)$ l'opérateur d'annihilation d'un électron de conduction de spin σ' dans le canal de conduction λ , situé à l'origine. L'expression de ce dernier dans l'espace des impulsions est donnée par

$$c_{\sigma', \lambda}^\dagger(0) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_s}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma', \lambda}^\dagger, \quad (7.8)$$

où \mathcal{N}_s est le nombre de sites du réseau. On obtient ainsi

$$\mathbf{S}_e^A(0) = \frac{1}{\mathcal{N}_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'=1}^N \sum_{\lambda=1}^K c_{\mathbf{k}', \sigma', \lambda}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma', \sigma}^A c_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}. \quad (7.9)$$

$$\{\sigma\} \equiv \square$$

FIG. 7.2 – Description en tableau de Young de la représentation fondamentale $\{\sigma\}$, associée à chaque électron de conduction.

Les générateurs de $SU(N)$ pour le spin des électrons de conduction sont placés dans la représentation fondamentale. Ils sont donc représentés par des matrices $\{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^A\}_{1 \leq A \leq N^2-1}$

hermitiennes, de trace nulle et de dimension $(N \times N)$. Ces matrices satisfont à la règle de normalisation suivante

$$\text{Tr}[\tilde{\sigma}^A \tilde{\sigma}^B] = \frac{1}{2} \delta_{AB}.$$

Dans le cas des groupes de $SU(2)$ et $SU(3)$, $\tilde{\sigma}^A = \tilde{\pi}^A/2$, où $\{\tilde{\pi}^A\}$ sont les matrices de Pauli et Gell-Mann, respectivement.

7.2.3 Expression de l'hamiltonien

En utilisant les précédentes équations (7.1), (7.2), (7.3), (7.6) et (7.9), nous obtenons le hamiltonien associé au modèle Kondo multicanal $SU(N) \times SU(K)$ à une impureté, cette impureté étant représentée par un tableau de Young «en L» (cf. figure 7.1)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_K = & \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1}^N \sum_{\lambda=1}^K \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma,\lambda}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma,\lambda} \\ & + \frac{J_K}{\mathcal{N}_s} \sum_{A=1}^{N^2-1} \left(\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sum_{\sigma,\sigma'=1}^N \sum_{\lambda=1}^K c_{\mathbf{k}',\sigma',\lambda}^\dagger \sigma_{\sigma',\sigma}^A c_{\mathbf{k},\sigma,\lambda} \right) \left(\sum_{\gamma,\gamma'=1}^{d_{\{\Gamma\}}} f_{\gamma'}^\dagger \Gamma_{\gamma',\gamma}^A f_{\gamma} \right). \end{aligned} \quad (7.10)$$

7.3 Méthode d'intégrales fonctionnelles

La fonction de partition associée à \mathcal{H}_K (7.10) est

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\text{spin}} \exp[-\beta \mathcal{H}_K], \quad (7.11)$$

avec $\beta = 1/k_B T$. La difficulté rencontrée dans le calcul de \mathcal{Z} provient de la contrainte (7.5) qui impose de considérer la trace Tr_{spin} sur les états physiques définis par la présence d'un seul pseudofermion sur le site de l'impureté. Néanmoins le principe de Pauli autorise le nombre de pseudofermions à l'origine à prendre n'importe quelle valeur comprise entre 0 et $d_{\{\Gamma\}}$. Plus précisément, la représentation du spin de l'impureté en terme d'opérateurs de pseudofermions, donnée par l'équation (7.4), augmente la dimension de l'espace de Hilbert sur lequel ces champs agissent, par rapport à celle de l'espace physique. Les états non physiques résultant de la formulation en pseudofermions sont donc éliminés grâce à la contrainte. Par conséquent la trace de l'équation (7.11) ne peut être simplement calculée, par un développement perturbatif par exemple, mais requiert la mise en place de méthodes plus élaborées.

Afin de résoudre ce problème, nous allons utiliser la méthode initialement proposée par Popov et Fedotov [120].

7.3.1 Méthode de Popov et Fedotov

Nous allons expliquer brièvement une méthode extrêmement puissante, bien que très simple dans son principe, permettant un traitement exact de la contrainte fixant le nombre

de pseudofermions sur le site de l'impureté. Proposée initialement par Popov et Fedotov [120] pour des spins 1/2 et 1 du groupe SU(2), cette approche a été développée dans le cas des spins de SU(2) arbitraires [121], puis généralisée à SU(N) [122]. Elle a été utilisée afin d'étudier des systèmes de spins très variés, comme l'hamiltonien de Heisenberg [123], le réseau Kondo [124] et les systèmes désordonnés [125, 126].

Le principe consiste à exprimer la fonction de partition d'un système de spins sous la forme d'une somme de fonctions de partition du système fermionique correspondant, les spins étant représentés à l'aide d'opérateurs de pseudofermions. Le problème est d'incorporer correctement la contrainte fermionique, à savoir d'éliminer le sous-espace de Hilbert non physique, sans supprimer les vrais états de spin. Cela peut être fait en remarquant que le hamiltonien Kondo (7.10) sans contrainte imposée comporte différents secteurs de charge, correspondant chacun à une valeur donnée du nombre de pseudofermions et qui sont déconnectés entre eux. Par conséquent la trace sur l'espace de Fock complet (i.e. sans contrainte) peut se décomposer en une somme de traces dans des sous-espaces pour lesquels le nombre de pseudofermions est fixé (valeur entière comprise entre 0 et $d_{\{\Gamma\}}$, compte tenu du principe de Pauli)

$$\mathrm{Tr}_{\mathrm{Fock}} \exp \left[-\beta (\mathcal{H}_{\mathrm{K}} - \mu \hat{n}_f) \right] = \sum_{n_f=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \mathrm{Tr}_{n_f} \exp \left[-\beta (\mathcal{H}_{\mathrm{K}} - \mu \hat{n}_f) \right], \quad (7.12)$$

avec Tr_{n_f} la trace locale ne considérant que les états à nombre n_f fixé de pseudofermion(s) sur le site de l'impureté. La fonction de partition physique \mathcal{Z} (7.11) incluant la contrainte fermionique devient

$$\mathcal{Z} = \delta(n_f - 1) \cdot \mathrm{Tr}_{\mathrm{Fock}} \exp \left[-\beta (\mathcal{H}_{\mathrm{K}} - \mu \hat{n}_f) \right]. \quad (7.13)$$

En utilisant l'identité

$$\delta(n_f - 1) = \frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_{n=1}^{d_{\{\Gamma\}}} e^{i\pi(2n-1)/d_{\{\Gamma\}}} \cdot e^{i\pi(1-2n)n_f/d_{\{\Gamma\}}},$$

nous obtenons

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\mu P\{\mu\} \mathrm{Tr}_{\mathrm{Fock}} \exp \left[-\beta (\mathcal{H}_{\mathrm{K}} - \mu \hat{n}_f) \right], \quad (7.14)$$

où la distribution discrète de potentiels chimiques imaginaires $P\{\mu\}$ est donnée par

$$P\{\mu\} = \frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_{n=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \exp \left[\frac{i\pi}{d_{\{\Gamma\}}} (2n-1) \right] \cdot \delta \left(\mu + \frac{i\pi}{\beta d_{\{\Gamma\}}} (2n-1) \right). \quad (7.15)$$

Une propriété très importante résulte de l'équation (7.15): les potentiels chimiques imaginaires introduits dépendent de la température.

7.3.2 Détermination de la fonction de partition

Ainsi en introduisant un ensemble de potentiels chimiques imaginaires $\{i\mu_n\}_{1 \leq n \leq d_{\{\Gamma\}}}$ gouverné par la distribution (7.15), nous pouvons dériver l'expression exacte de la fonction de partition en présence de la contrainte fermionique

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\mu P\{\mu\} \text{Tr}_{\text{Fock}} \exp \left[-\beta(\mathcal{H}_K - \mu \hat{n}_f) \right]. \quad (7.16)$$

Tr_{Fock} est calculée sur l'espace de Fock complet associé à un nombre entier quelconque de pseudofermion(s), compris entre 0 et $d_{\{\Gamma\}}$ pour respecter le principe de Pauli. Les contributions des états non physiques ($n_f \neq 1$) dans le calcul de la fonction de partition sont automatiquement éliminées par l'introduction des potentiels chimiques imaginaires. Nous obtenons

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_{n=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \exp[i\beta\mu_n] \text{Tr}_{\text{Fock}} \exp \left[-\beta(\mathcal{H}_K + i\mu_n \hat{n}_f) \right], \quad (7.17)$$

avec

$$i\mu_n = -\frac{i\pi}{\beta d_{\{\Gamma\}}} (2n - 1).$$

Dans l'équation précédente, et contrairement à l'équation (7.11), \mathcal{Z} est équivalente à une somme de fonctions de partition dans l'ensemble grand canonique. Elle peut donc être calculée à l'aide des techniques standards, comme l'intégrale fonctionnelle, la méthode des fonctions de Green et le développement en perturbations.

Suivant un formalisme d'intégrale de chemin à température finie [127, 128], chaque trace Tr_{Fock} apparaissant dans (7.17) est donnée par

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{\text{Fock}} \exp \left[-\beta(\mathcal{H}_K + i\mu_n \hat{n}_f) \right] \\ &= \int \mathcal{D}\bar{c}^* \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \exp \left[-\int_0^\beta d\tau \{ \mathcal{L}_n(\tau) + \mathcal{H}_K(\tau) \} \right], \end{aligned} \quad (7.18)$$

où \bar{c}^* , \bar{c} , \bar{f}^* , \bar{f} sont les variables de Grassmann associées aux opérateurs fermioniques c^\dagger , c , f^\dagger , f , respectivement, et $\mathcal{L}_n(\tau)$ est le lagrangien de particules libres

$$\mathcal{L}_n(\tau) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma=1}^N \sum_{\lambda=1}^K \bar{c}_{\mathbf{k},\sigma,\lambda}^*(\tau) \partial_\tau \bar{c}_{\mathbf{k},\sigma,\lambda}(\tau) + \sum_{\gamma=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \bar{f}_\gamma^*(\tau) (\partial_\tau + i\mu_n) \bar{f}_\gamma(\tau). \quad (7.19)$$

Une conséquence immédiate de l'introduction des potentiels chimiques imaginaires, visible dans l'expression précédente, est le décalage des fréquences de Matsubara de pseudofermions d'un facteur égal à $(-i\mu_n)$.

En utilisant (7.17) et (7.18), nous obtenons l'expression finale de la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_{n=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \exp[i\beta\mu_n] \int \mathcal{D}\bar{c}^* \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \exp \left[-\int_0^\beta d\tau \{ \mathcal{L}_n(\tau) + \mathcal{H}_K(\tau) \} \right]. \quad (7.20)$$

Nous allons maintenant effectuer un développement perturbatif aux premiers ordres en J_K de la fonction de partition, afin de calculer la self-energy des électrons de conduction. Ce calcul est présenté dans le chapitre 8. Il constitue une étape nécessaire afin d'obtenir la fonction d'échelle β , qui nous permettra de caractériser le point fixe de couplage intermédiaire.

Chapitre 8

Calcul perturbatif de la self-energy des électrons de conduction

Dans ce chapitre nous déterminons la self-energy des électrons de conduction par un calcul perturbatif aux premiers ordres du couplage Kondo J_K . Nous considérons donc la limite de couplage faible. Nous suivons de façon proche la méthode développée par Gan *et al* [129, 130] dans le cas particulier d'un modèle Kondo $SU(2) \times SU(K)$, comportant une impureté de spin 1/2. Nous utilisons les techniques diagrammatiques [131, 132]. En raison de l'introduction des potentiels chimiques imaginaires, la fonction de partition revêt une forme particulière. Un certain nombre d'adaptations sont donc nécessaires.

8.1 Détermination des diagrammes perturbatifs

Nous résumons ici les règles de construction des diagrammes de Feynman permettant de dériver la self-energy des électrons de conduction, en utilisant un développement perturbatif de la fonction de partition aux ordres successifs en J_K . Une méthode détaillée pour construire les diagrammes associés à la self-energy électronique dans le cadre du modèle Kondo est présentée dans un article de Silverstein et Duke [133], en prolongement du travail d'Abrikosov. [106]. Ces règles sont les suivantes:

(i) Pour obtenir la contribution à l'ordre n de l'interaction Kondo J_K , i.e. $\mathcal{O}[(J_K)^n]$, nous traçons tous les diagrammes topologiquement distincts liant n vertex.

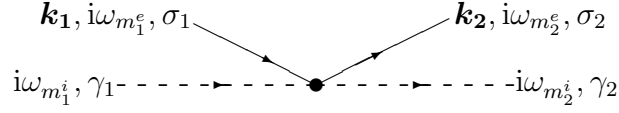
(ii) Chaque propagateur d'électron de conduction (8.28) est représenté par une ligne continue

$$\xrightarrow{\mathbf{k}_1, i\omega_{m_1^e}, \sigma_1} .$$

(iii) Chaque propagateur de pseudofermion associé au spin de l'impureté (8.35) est noté par une ligne pointillée

$$\cdots \xrightarrow{i\omega_{m_1^i}, \gamma_1} \cdots .$$

(iv) Chaque vertex



est associé à un facteur

$$-\frac{J_K}{\beta \mathcal{N}_s} \delta_{m_1^e+m_1^i, m_2^e+m_2^i} \sum_{A=1}^{N^2-1} \sigma_{\sigma_2, \sigma_1}^A \Gamma_{\gamma_2, \gamma_1}^A. \quad (8.1)$$

(v) Les impulsions, fréquences et spins indépendants doivent être sommés.

(vi) Chaque boucle d'électron de conduction donne un facteur $(-K)$.

(vii) Chaque boucle de pseudofermion contribue par un facteur (-1) .

(viii) Chaque diagramme $\mathcal{O}[(J_K)^n]$, noté $(2,0)$ ou $(3,0)$ par exemple dans ce qui suit, possède un facteur combinatoire de symétrie noté f_{sym} . Ce facteur résulte de la non compensation entre le nombre de permutations des vertex et la contribution $(1/n!)$ due au théorème de Wick [134]. Nous le reportons explicitement sur la figure 8.1, quand sa valeur n'est pas égale à 1.

8.2 Calcul de la self-energy aux premiers ordres de perturbation en J_K

Sur la figure 8.1 nous montrons les diagrammes qui nous permettront de calculer la fonction d'échelle β au troisième ordre en perturbation en J_K , dans le chapitre 9 suivant. Les deux indices différenciant les diagrammes entre eux correspondent aux ordres de J_K et K , respectivement.

La contribution de chacun des diagrammes au calcul de la self-energy se factorise en deux termes principaux. Le premier correspond à un facteur de spin, il fait intervenir la sommation sur les degrés de liberté de spin internes. Dans la section 8.2.1 suivante, nous présenterons le calcul de ces facteurs de spin pour chacun des diagrammes que nous considérons. Nous aurons besoin pour cela d'un certain nombre de propriétés relatives aux générateurs de $SU(N)$ $\{\tilde{\mathbf{F}}\}$ (7.6) et $\{\tilde{\boldsymbol{\sigma}}\}$ (7.9), associés aux spins d'impureté et d'électrons de conduction, respectivement. Ces propriétés sont présentées dans l'appendice C. Le second terme correspond à la contribution apportée par les propagateurs fermioniques. Il fait intervenir les sommations sur les impulsions et fréquences de Matsubara internes. En raison de la présence des potentiels chimiques imaginaires $\{i\mu_n\}_{1 \leq n \leq d_{\{\Gamma\}}}$, les propagateurs libres associés au spin des électrons de conduction et au spin de l'impureté doivent être redéfinis, ce que nous ferons dans la section 8.2.2.

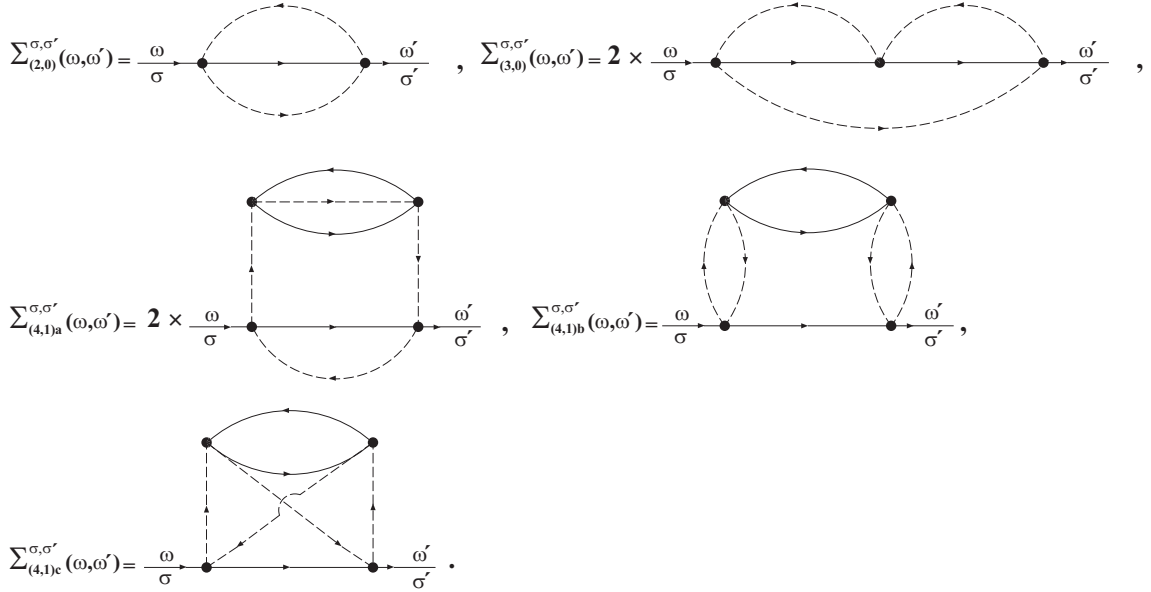


FIG. 8.1 – Diagrammes de Feynman donnant les contributions aux différents ordres en J_K et K à la self-energy des électrons de conduction.

Pour résumer, chacune des contributions $\Sigma_{(j,l)}^{\sigma,\sigma'}$ à la self-energy des électrons de conduction donnée par un diagramme de la figure 8.1 peut de mettre sous la forme factorisée suivante

$$\Sigma_{(j,l)}^{\sigma,\sigma'} = (-1)^{b_{pf}} \times (-K)^l \times (N_i) \times f_{sym} \times \text{Spin} \left[\Sigma_{(j,l)}^{\sigma,\sigma'} \right] \times F_{(j,l)}, \quad (8.2)$$

où b_{pf} est le nombre de boucle(s) de pseudofermions, l le nombre de boucle(s) d'électrons, f_{sym} le facteur de symétrie du diagramme, $\text{Spin} \left[\Sigma_{(j,l)}^{\sigma,\sigma'} \right]$ le terme de spin correspondant à la contribution des opérateurs de spin faisant intervenir une sommation sur les degrés de liberté de spin internes et $F_{(j,l)}$ le facteur correspondant à la contribution des propagateurs fermioniques faisant intervenir une sommation sur les impulsions et les fréquences de Matsubara internes.

Nous limitons notre étude à $T = 0$, ce qui nous permettra de calculer analytiquement les intégrales en énergie ainsi que les sommations sur les potentiels chimiques imaginaires intervenant dans le calcul du propagateur libre du spin de l'impureté (8.35). Nous suivons la méthode standard de la renormalisation du pauvre («Poor Man's Scaling») [14, 19]: un cut-off en énergie est imposé sur la bande des électrons de conduction, à savoir $-D \leq \varepsilon_{\mathbf{k}} \leq D$, avec une densité d'états par spin et par canal supposée constante.

Le champ d'application du modèle Kondo à une impureté peut être étendu à l'étude des systèmes réels d'impuretés diluées (à faible concentration), à l'aide de la méthode du moyennage aléatoire sur la position des impuretés [106] que nous adopterons. Son principe est le suivant. Nous supposons qu'un nombre N_i de spins d'impureté sont distribués au hasard dans le système. Seules les contributions linéaires en fonction de la densité d'impuretés

$n_i = N_i/\mathcal{N}_s$ sont conservées. Les interactions entre les différentes impuretés étant totalement négligées, on se ramène alors à un modèle Kondo à une impureté.

L'appendice D présente le calcul général du diagramme au troisième ordre $\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'}$, les autres pouvant être traités de la même manière.

8.2.1 Calcul des facteurs de spin de la self-energy

Dans cette section nous présentons la méthode de calcul des facteurs de spin, qui sont nécessaires pour déterminer perturbativement la self-energy des électrons de conduction. Nous utiliserons intensivement les propriétés des générateurs de $SU(N)$ présentées dans l'appendice C. Nous expliciterons les contributions de chacun des diagrammes apparaissant sur la figure 8.1. Une propriété générale que l'on peut remarquer est que les propagateurs de spin d'impureté forment toujours une boucle fermée. Par conséquent, les matrices $\{\tilde{\Gamma}^A\}$ apparaîtront systématiquement sous forme de traces sur les produits de générateurs dans la représentation $\{\Gamma\}$.

8.2.1.a Facteur de spin intervenant dans le calcul de la self-energy au second ordre

La contribution en spin après sommation sur les degrés de liberté internes est donnée par

$$\text{Spin}\left[\Sigma_{(2,0)}^{\sigma,\sigma'}\right] = \sum_{A,B=1}^{N^2-1} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^B] \cdot [\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^A]_{\sigma'\sigma}. \quad (8.3)$$

En utilisant l'équation de normalisation (C.11) suivie par les générateurs du groupe $SU(N)$ dans la représentation $\{\Gamma\}$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^B] &= \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \\ &\times \frac{2S}{2N(N^2 - 1)} [2S(N - 1) - q(N + 1) + (N^2 + 1)] \delta_{AB}, \end{aligned} \quad (8.4)$$

où $2S$ et q caractérisent le tableau de Young «en L» (cf. figure 7.1).

En utilisant (8.4) et (C.5), nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \text{Spin}\left[\Sigma_{(2,0)}^{\sigma,\sigma'}\right] &= \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \\ &\times \frac{2S}{4N^2} [2S(N - 1) - q(N + 1) + (N^2 + 1)] \delta_{\sigma,\sigma'}. \end{aligned} \quad (8.5)$$

8.2.1.b Facteur de spin intervenant dans le calcul de la self-energy au troisième ordre

Ce facteur après sommation sur les degrés de liberté internes de spin est donné par (cf. appendice D)

$$\text{Spin} \left[\sum_{(3,0)}^{\sigma, \sigma'} \right] = \sum_{A,B,C=1}^{N^2-1} \text{Tr} [\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B] \cdot [\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma}. \quad (8.6)$$

Le calcul de la trace $\text{Tr} [\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B]$ pour une représentation «en L» du groupe $\text{SU}(N)$ est relativement technique. Fort heureusement, une telle quantité a déjà été largement étudiée dans le domaine de la physique des particules. Nous pouvons l'exprimer à l'aide d'une trace symétrisée, définissant un tenseur invariant associé à $\{\Gamma\}$ [135]

$$\text{Tr} [\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B] = \text{STr}_{\{\Gamma\}}^{ACB} + \frac{i}{2} \frac{d_{\{\Gamma\}} \mathcal{C}_2(\{\Gamma\})}{N^2 - 1} \mathbf{f}^{ACB}, \quad (8.7)$$

où $\text{STr}_{\{\Gamma\}}^{ACB}$ est une trace symétrisée d'ordre 3

$$\text{STr}_{\{\Gamma\}}^{A_{\pi(1)} A_{\pi(2)} A_{\pi(3)}} = \frac{1}{3!} \sum_{\pi} \text{Tr} [\tilde{\Gamma}^{A_{\pi(1)}} \tilde{\Gamma}^{A_{\pi(2)}} \tilde{\Gamma}^{A_{\pi(3)}}],$$

où la somme est étendue à toutes les permutations des indices de générateurs. $\text{STr}_{\{\Gamma\}}^{ACB}$ peut être calculée pour toute représentation de $\text{SU}(N)$ ($N \geq 3$) en suivant la méthode développée par Okubo [136], que nous résumons ici. Le tableau de Young en arrangement standard associé à la représentation «en L» est décrit par N nombres entiers $(g_i)_{1 \leq i \leq N}$, g_i étant le nombre de boîtes de la $i^{\text{ème}}$ ligne numérotée à partir du haut du tableau

$$\begin{cases} g_1 = 2S \\ g_i = 1, \quad 2 \leq i \leq q \\ g_i = 0, \quad q+1 \leq i \leq N. \end{cases} \quad (8.8)$$

En introduisant les indices $(\sigma_j)_{1 \leq j \leq N}$ définis par

$$\sigma_j = g_j + \frac{N+1}{2} - j - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i = \frac{N+1}{2} - \frac{2S+q-1}{N} - (j - g_j),$$

on a

$$\text{STr}_{\{\Gamma\}}^{ACB} = \frac{\mathbf{d}^{ACB}}{2} M(\{\Gamma\}), \quad (8.9)$$

avec

$$M(\{\Gamma\}) = \frac{N}{(N^2-1)(N^2-4)} d_{\{\Gamma\}} \sum_{j=1}^N (\sigma_j)^3. \quad (8.10)$$

Nous obtenons en utilisant (C.8), (C.9), (8.7), (8.9) et (8.10)

$$\begin{aligned}
& \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B] \\
= & \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \cdot \frac{2S}{2(N^2 - 1)} \\
& \times \left\{ \frac{1}{(N^2 - 4)} \left((2S)^2 \left[\frac{2}{N} - 3 + N \right] + q^2 \left[\frac{2}{N} + 3 + N \right] + 2S \cdot q \left[\frac{4}{N} - N \right] \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + 2S \left[-\frac{4}{N} + 3 - \frac{7N}{2} + \frac{3N^2}{2} \right] + q \left[-\frac{4}{N} - 3 - \frac{7N}{2} - \frac{3N^2}{2} \right] \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left[\frac{2}{N} + \frac{7N}{2} + \frac{N^3}{2} \right] \right) \mathbf{d}^{ACB} \right. \\
& \quad \left. + \frac{i}{2} \left(2S \left[1 - \frac{1}{N} \right] - q \left[1 + \frac{1}{N} \right] + \left[N + \frac{1}{N} \right] \right) \mathbf{f}^{ACB} \right\}. \tag{8.11}
\end{aligned}$$

A titre de vérification, nous avons appliqué la formule précédente à des représentations «en L» particulières, correspondant à des valeurs numériques données des paramètres $2S$ et q , comme les ont étudiées par Okubo et Patera [137] pour un groupe $SU(N)$ quelconque. Nous avons obtenu un accord parfait.

En ce qui concerne les électrons de conduction, nous obtenons grâce à la loi de multiplication (C.3)

$$[\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma} = \frac{1}{2N} \delta_{BC} [\tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{G=1}^{N^2-1} (\mathbf{d}^{BCG} + i\mathbf{f}^{BCG}) [\tilde{\sigma}^G \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma}. \tag{8.12}$$

En utilisant (C.5), (C.6) et (C.7), nous obtenons finalement la contribution en spin présente au troisième ordre en perturbation

$$\begin{aligned}
\text{Spin} \left[\Sigma_{(3,0)}^{\sigma, \sigma'} \right] = & \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \cdot \frac{2S}{8N^3} \\
& \times \left[(2S)^2 (2 - 3N + N^2) + q^2 (2 + 3N + N^2) + 2S \cdot q (4 - N^2) \right. \\
& \quad \left. + 2S (-4 + 3N - 4N^2 + 2N^3) + q (-4 - 3N - 4N^2 - 2N^3) \right. \\
& \quad \left. + (2 + 4N^2 + N^4) \right] \delta_{\sigma, \sigma'}. \tag{8.13}
\end{aligned}$$

8.2.1.c Facteurs de spin intervenant dans le calcul de la self-energy au quatrième ordre

La première contribution de spin à l'ordre 4 en théorie de perturbation est donnée par le diagramme associé à $\Sigma_{(4,1)a}$

$$\text{Spin} \left[\Sigma_{(4,1)a}^{\sigma, \sigma'} \right] = \sum_{A,B,C,D=1}^{N^2-1} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^D \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B \tilde{\Gamma}^A] \cdot \text{Tr}[\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C] \cdot [\tilde{\sigma}^D \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma}. \tag{8.14}$$

En utilisant (C.3), (C.4) et (C.13) nous avons

$$\begin{aligned} & \sum_{B,C} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^D \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B \tilde{\Gamma}^A] \cdot \text{Tr}[\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C] \\ &= \frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S(2S+q-1)}{8N^2(N^2-1)} \\ & \quad \times \left[2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right]^2 \delta_{AD}. \end{aligned} \quad (8.15)$$

et finalement

$$\begin{aligned} \text{Spin} \left[\Sigma_{(4,1)a}^{\sigma, \sigma'} \right] &= \frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S(2S+q-1)}{16N^3} \\ & \quad \times \left[2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right]^2 \delta_{\sigma, \sigma'}. \end{aligned} \quad (8.16)$$

La seconde contribution de spin au quatrième ordre en perturbation correspond au diagramme $\Sigma_{(4,1)b}$

$$\text{Spin} \left[\Sigma_{(4,1)b}^{\sigma, \sigma'} \right] = \sum_{A,B,C,D=1}^{N^2-1} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^B] \cdot \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^D] \cdot \text{Tr}[\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C] \cdot [\tilde{\sigma}^D \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma}. \quad (8.17)$$

On trouve avec (C.4), (C.5) et (C.11)

$$\begin{aligned} & \text{Spin} \left[\Sigma_{(4,1)b}^{\sigma, \sigma'} \right] \\ &= \left\{ \frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S}{N} \left[2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right] \right\}^2 \\ & \quad \times \frac{1}{16N(N^2-1)} \delta_{\sigma, \sigma'}. \end{aligned} \quad (8.18)$$

La dernière contribution de spin d'ordre 4 correspond au diagramme $\Sigma_{(4,1)c}$

$$\text{Spin} \left[\Sigma_{(4,1)c}^{\sigma, \sigma'} \right] = \sum_{A,B,C,D=1}^{N^2-1} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^D \tilde{\Gamma}^B] \cdot \text{Tr}[\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C] \cdot [\tilde{\sigma}^D \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma}. \quad (8.19)$$

Les expressions (C.4) et (C.12) donnent

$$\begin{aligned} & \sum_{B,C} \text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^D \tilde{\Gamma}^B] \cdot \text{Tr}[\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C] \\ &= \frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S}{4N(N^2-1)} \\ & \quad \times \left[\frac{2S+q-1}{2N} \left\{ 2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right\} - \frac{N}{2} \right] \\ & \quad \times \left[2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right] \delta_{AD}. \end{aligned} \quad (8.20)$$

Grâce à (C.3) nous déduisons

$$\begin{aligned} \text{Spin} \left[\sum_{(4,1)c}^{\sigma, \sigma'} \right] &= \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \cdot \frac{2S}{16N^3} \\ &\times \left\{ \left[2S(N - 1) - q(N + 1) + (N^2 + 1) \right]^2 (2S + q - 1) \right. \\ &\quad \left. - \left[2S(N - 1) - q(N + 1) + (N^2 + 1) \right] N^2 \right\} \delta_{\sigma, \sigma'}. \end{aligned} \quad (8.21)$$

8.2.2 Expressions des propagateurs libres associés à l'impureté et aux électrons de conduction

Nous effectuons un développement perturbatif de la self-energy des électrons de conduction. Nous utilisons pour cela une approche standard basée sur les diagrammes de Feynman [131, 132]. Nous avons besoin au préalable d'établir les expressions des propagateurs libres associés aux électrons de conduction et au spin de l'impureté. Compte tenu de la présence des potentiels chimiques imaginaires (7.15) dans la fonction de partition \mathcal{Z} (7.20), nous devons procéder avec soin. Pour cette raison, nous avons recours à la technique de la fonctionnelle génératrice [127, 138].

8.2.2.a Fonctionnelle génératrice

La fonction de partition libre, en l'absence du terme d'interaction \mathcal{V}_K (7.3), s'écrit de la façon suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0 &= \int \mathcal{D}\bar{c}^* \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_n \exp [i\beta\mu_n] \\ &\quad \times \exp \left[- \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda} \{ \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) (i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{i\omega_m} \sum_{\gamma} \{ \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) (i\omega_m - i\mu_n) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) \} \right]. \end{aligned} \quad (8.22)$$

Nous introduisons les sources termes J^* , J et η^* , η couplées aux variables de Grassmann associées aux électrons de conduction \bar{c}, \bar{c}^* et au spin de l'impureté \bar{f}, \bar{f}^* , respectivement. Ces sources externes sont également des nombres de Grassmann. La fonctionnelle génératrice est

donnée par

$$\begin{aligned}
& \mathcal{Z}^G[\mathbf{J}, \mathbf{J}^*, \eta, \eta^*] \\
= & \int \mathcal{D}\bar{c}^* \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \\
& \times \left(\frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_n \exp[i\beta\mu_n] \right. \\
& \quad \times \exp \left[- \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda} \left\{ \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) (i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. - \mathbf{J}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) - \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) \mathbf{J}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \right\} \right. \\
& \quad \quad \left. - \sum_{i\omega_m} \sum_{\gamma} \left\{ \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) (i\omega_m - i\mu_n) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) \right. \right. \\
& \quad \quad \quad \left. \left. - \eta_{\gamma}^*(i\omega_m) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) - \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) \eta_{\gamma}(i\omega_m) \right\} \right] \Big). \quad (8.23)
\end{aligned}$$

Dans la limite où les sources externes sont nulles nous retrouvons aisément

$$\mathcal{Z}^G[\mathbf{J} = 0, \mathbf{J}^* = 0, \eta = 0, \eta^* = 0] = \mathcal{Z}_0. \quad (8.24)$$

Les propagateurs libres s'obtiennent de la façon suivante

$$\langle \bar{c}_{\mathbf{k}_0, \sigma_0, \lambda_0}(i\omega_{m_0}) \bar{c}_{\mathbf{k}_0, \sigma_0, \lambda_0}^*(i\omega_{m_0}) \rangle_0 = - \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}^G[\mathbf{J}, \mathbf{J}^*, \eta, \eta^*]}{\partial \mathbf{J}_{\mathbf{k}_0, \sigma_0, \lambda_0}(i\omega_{m_0}) \partial \mathbf{J}_{\mathbf{k}_0, \sigma_0, \lambda_0}^*(i\omega_{m_0})} \Bigg|_{\substack{\mathbf{J}, \mathbf{J}^* \rightarrow 0 \\ \eta, \eta^* \rightarrow 0}} \quad (8.25)$$

$$\langle \bar{f}_{\gamma_0}(i\omega_{m_0}) \bar{f}_{\gamma_0}^*(i\omega_{m_0}) \rangle_0 = - \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}^G[\mathbf{J}, \mathbf{J}^*, \eta, \eta^*]}{\partial \eta_{\gamma_0}(i\omega_{m_0}) \partial \eta_{\gamma_0}^*(i\omega_{m_0})} \Bigg|_{\substack{\mathbf{J}, \mathbf{J}^* \rightarrow 0 \\ \eta, \eta^* \rightarrow 0}}. \quad (8.26)$$

8.2.2.b Dérivation des propagateurs libres

Afin de calculer explicitement les propagateurs libres, nous utilisons l'identité suivante concernant les intégrales gaussiennes sur les champs de Grassmann

$$\begin{aligned}
& \int \mathcal{D}\bar{c}^* \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \exp \left[- \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda} \left\{ \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) (i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \right. \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. - J_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) - \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) J_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \right\} \right. \\
& \qquad \qquad \left. - \sum_{i\omega_m} \sum_{\gamma} \left\{ \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) (i\omega_m - i\mu_n) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) \right. \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. - \eta_{\gamma}^*(i\omega_m) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) - \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) \eta_{\gamma}(i\omega_m) \right\} \right] \\
& = \exp \left[\sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda} \left\{ J_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) \left(\frac{1}{i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) J_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \right\} \right. \\
& \qquad \left. + \sum_{i\omega_m} \sum_{\gamma} \left\{ \eta_{\gamma}^*(i\omega_m) \left(\frac{1}{i\omega_m - i\mu_n} \right) \eta_{\gamma}(i\omega_m) \right\} \right] \\
& \times \int \mathcal{D}\bar{c}^* \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \exp \left[- \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda} \left\{ \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}^*(i\omega_m) (i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \bar{c}_{\mathbf{k}, \sigma, \lambda}(i\omega_m) \right\} \right. \\
& \qquad \qquad \left. - \sum_{i\omega_m} \sum_{\gamma} \left\{ \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) (i\omega_m - i\mu_n) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) \right\} \right]. \tag{8.27}
\end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi les dérivées de la fonctionnelle génératrice \mathcal{Z}^G (8.23) par rapport aux sources, et donc pour les propagateurs libres

$$\langle \bar{c}_{\mathbf{k}_0, \sigma_0, \lambda_0}(i\omega_{m_0}) \bar{c}_{\mathbf{k}_0, \sigma_0, \lambda_0}^*(i\omega_{m_0}) \rangle_0 = - \frac{1}{i\omega_{m_0} - \varepsilon_{\mathbf{k}_0}}, \tag{8.28}$$

$$\langle \bar{f}_{\gamma_0}(i\omega_{m_0}) \bar{f}_{\gamma_0}^*(i\omega_{m_0}) \rangle_0 = - \frac{\frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_n e^{i\beta\mu_n} \left(\frac{1}{i\omega_{m_0} - i\mu_n} \right) \mathcal{Z}_0^f(i\mu_n)}{\frac{1}{d_{\{\Gamma\}}} \sum_n e^{i\beta\mu_n} \mathcal{Z}_0^f(i\mu_n)}, \tag{8.29}$$

où \mathcal{Z}_0^f représente la partie fermionique libre de la fonction de partition, associée au potentiel chimique ($i\mu_n$)

$$\mathcal{Z}_0^f(i\mu_n) = \int \mathcal{D}\bar{f}^* \mathcal{D}\bar{f} \exp \left[- \sum_{i\omega_m} \sum_{\gamma} \left\{ \bar{f}_{\gamma}^*(i\omega_m) (i\omega_m - i\mu_n) \bar{f}_{\gamma}(i\omega_m) \right\} \right]. \tag{8.30}$$

\mathcal{Z}_0^f correspond à la fonction de partition d'un système de fermions libres [127], «d'énergie» ($i\mu_n$)

$$\mathcal{Z}_0^f(i\mu_n) = \prod_{\gamma=1}^{d_{\{\Gamma\}}} [1 + e^{-i\beta\mu_n}] = [1 + e^{-i\beta\mu_n}]^{d_{\{\Gamma\}}}. \tag{8.31}$$

Compte tenu de la forme particulière des potentiels chimiques imaginaires (7.15), nous déduisons en utilisant de simples arguments trigonométriques les trois identités suivantes, qui s'avèreront très utiles pour effectuer les calculs impliquant les propagateurs de pseudo-fermions

$$\sum_{\gamma=1}^{d_{\{\Gamma\}}} e^{i\beta\mu_n} [1 + e^{-i\beta\mu_n}]^{d_{\{\Gamma\}}-1} = [d_{\{\Gamma\}}]^{d_{\{\Gamma\}}}, \quad (8.32)$$

$$\sum_{\gamma=1}^{d_{\{\Gamma\}}} [1 + e^{-i\beta\mu_n}]^{d_{\{\Gamma\}}-1} = d_{\{\Gamma\}}, \quad (8.33)$$

$$\sum_{\gamma=1}^{d_{\{\Gamma\}}} e^{i\beta\mu_n} [1 + e^{-i\beta\mu_n}]^{d_{\{\Gamma\}}-1} = d_{\{\Gamma\}}(d_{\{\Gamma\}} - 1). \quad (8.34)$$

La formule (8.32) permet de simplifier l'expression (8.29), et le propagateur du pseudo-fermion associé au spin de l'impureté est donné finalement par

$$\langle \bar{f}_{\gamma_0}(i\omega_{m_0}) \bar{f}_{\gamma_0}^*(i\omega_{m_0}) \rangle_0 = -\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \left(\frac{1}{i\omega_{m_0} - i\mu_n} \right) e^{i\beta\mu_n} [1 + e^{-i\beta\mu_n}]^{d_{\{\Gamma\}}}. \quad (8.35)$$

8.2.3 Expression de la self-energy aux premiers ordres d'une théorie de perturbation en J_K

Nous disposons maintenant de tous les éléments nécessaires pour terminer le calcul de la self-energy des électrons de conduction aux premiers ordres d'une théorie de perturbation. Chacun des diagrammes est obtenu en suivant la méthode présentée dans l'appendice D. A température nulle et après continuation analytique le long de l'axe réel, la partie imaginaire

de la self-energy électronique est donnée par

$$\begin{aligned}
& \text{Im} \left[\Sigma_{(2,0)}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] \tag{8.36} \\
&= - \left(\frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S}{4N^2} \left[2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right] \right) \\
&\quad \times (J_K)^2 \cdot n_i \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \cdot \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) \\
&\quad \times \rho \cdot \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)} \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{Im} \left[\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] \tag{8.37} \\
&= - \left(\left[(2S)^2(N^2 - 3N + 2) + q^2(N^2 + 3N + 2) - 2S \cdot q(N^2 - 4) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 2S(2N^3 - 4N^2 + 3N - 4) - q(2N^3 + 4N^2 + 3N + 4) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (N^4 + 4N^2 + 2) \right] \frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S}{2N^3} \right) \\
&\quad \times (J_K)^3 \cdot n_i \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \\
&\quad \times \rho^2 \cdot \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \right. \\
&\quad \left. \times \left[n_f(\varepsilon_2) \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) - \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^3} \right) \right] \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{Im} \left[\Sigma_{(4,1)a}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] + \text{Im} \left[\Sigma_{(4,1)b}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] + \text{Im} \left[\Sigma_{(4,1)c}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] \tag{8.38} \\
&= \left(\frac{(N+2S-1)!}{(2S)!(q-1)!(N-q)!} \cdot \frac{2S}{8N} \left[2S(N-1) - q(N+1) + (N^2+1) \right] \right) \\
&\quad \times (J_K)^3 \cdot n_i \cdot K \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \cdot \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) \\
&\quad \times \rho^3 \cdot \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 \frac{n_f(-\varepsilon_1)n_f(\varepsilon_2)n_f(-\varepsilon_3) + n_f(\varepsilon_1)n_f(-\varepsilon_2)n_f(\varepsilon_3)}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\omega - \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 + i0^+)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)} \right\}.
\end{aligned}$$

Pour d'effectuer une analyse perturbative du groupe de renormalisation, il n'y a que la gamme d'énergie $0 < \omega \ll D$ qui soit pertinente. Dans les expressions précédentes, seuls les termes donnant lieu à une contribution logarithmique en $\ln(\omega/D)$ ont été retenus, et nous avons négligé les termes en loi de puissance de (ω/D) . La partie principale des intégrales est donnée par les intégrales de Cauchy. Les intégrales en énergie sont calculées en utilisant

la méthode introduite par Gan [130]. Nous obtenons

$$\text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)} \right\} = -\pi , \quad (8.39)$$

$$\begin{aligned} & \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \left[n_f(\varepsilon_2) \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) - \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^3} \right) \right] \right\} \\ = & \pi \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) \ln(\omega/D) , \end{aligned} \quad (8.40)$$

$$\begin{aligned} & \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 \frac{n_f(-\varepsilon_1)n_f(\varepsilon_2)n_f(-\varepsilon_3) + n_f(\varepsilon_1)n_f(-\varepsilon_2)n_f(\varepsilon_3)}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\omega - \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 + i0^+)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)} \right\} \\ = & \pi \ln(\omega/D) . \end{aligned} \quad (8.41)$$

Nous obtenons ainsi à température nulle la partie imaginaire de la self-energy aux premiers ordres d'un calcul de perturbation en J_K .

$$\begin{aligned} & \text{Im} \left[\Sigma_{\{\Gamma\}}^{\sigma, \sigma'}(\omega, \omega') \right] \\ = & \pi \left(\frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \cdot \frac{2S}{2N} \right) \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) (J_K)^2 \rho \cdot n_i \cdot \delta_{\sigma, \sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \\ \times & \left\{ \left(\frac{1}{2N} \left[2S(N - 1) - q(N + 1) + (N^2 + 1) \right] \right) \right. \\ & - \left(\frac{1}{N^2} \left[(2S)^2(N^2 - 3N + 2) + q^2(N^2 + 3N + 2) - 2S \cdot q(N^2 - 4) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + 2S(2N^3 - 4N^2 + 3N - 4) - q(2N^3 + 4N^2 + 3N + 4) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + (N^4 + 4N^2 + 2) \right] \right) (J_K \rho) \ln(\omega/D) \\ & + \left(\frac{1}{4} \left[2S(N - 1) - q(N + 1) + (N^2 + 1) \right] \right) (J_K \rho)^2 K \cdot \ln(\omega/D) \\ & \left. + \dots \right\} . \end{aligned} \quad (8.42)$$

La self-energy électronique ainsi obtenue constitue le point de départ du calcul de la fonction de couplage faible β , qui nous permettra de caractériser le point fixe de couplage intermédiaire. Ce calcul est présenté dans le chapitre 9. Il est basé sur une approche perturbative du groupe de renormalisation.

Chapitre 9

Méthode du Groupe de Renormalisation perturbatif

Dans ce chapitre nous poursuivons notre étude en utilisant une méthode du groupe de renormalisation perturbatif, due à Anderson et appelée renormalisation du pauvre («poor man's scaling») [14, 19]. Il s'agit comme son nom l'indique d'une mise en œuvre relativement simple des concepts de la théorie de la renormalisation, d'une difficulté sans commune mesure avec l'approche numérique développée par Wilson [25].

Nous identifions le point fixe de couplage intermédiaire (IC) associé au modèle considéré, pour plusieurs classes de représentations associées au spin de l'impureté. Nous commençons par calculer la fonction d'échelle $\beta(J_K\rho)$. Le point fixe de la transformation appliquée à l'hamiltonien est obtenu en identifiant les zéros de la fonction β . Une analyse simple des propriétés de la fonction d'échelle au voisinage d'un point fixe permet d'en déterminer la stabilité [80]. De façon générale l'existence d'un point fixe IC s'accompagne de l'émergence d'une physique très riche, tel qu'un comportement du système ne respectant pas la théorie de Landau des liquides de Fermi [2, 3]. On parle alors de comportement non-liquide de Fermi (NFL). Il en résulte des propriétés très inhabituelles des quantités physiques, comme l'entropie et la susceptibilité dynamique de spin.

9.1 Dérivation de la fonction d'échelle

Nous évaluons maintenant les termes dominants dans la limite de couplage faible de la fonction d'échelle $\beta(J_K\rho)$. Nous pouvons pour cela utiliser les résultats obtenus dans la section 8.2.3 précédente concernant la self-energy des électrons de conduction, dont la partie imaginaire est un invariant par transformation du groupe de renormalisation comme nous l'expliquerons plus loin. Dans le cadre de la théorie de la renormalisation, la relation entre ces deux quantités est donnée par l'équation de Callan-Symanzik [139, 140, 141].

9.1.1 Equation de Callan-Symanzik

En omettant la dépendance en spin de la self-energy des électrons de conduction, nous notons $\Sigma''_{\{\Gamma\}}$ sa partie imaginaire $\text{Im} \left[\Sigma_{\{\Gamma\}}^{\sigma, \sigma'} \right]$ calculée précédemment (8.42). Suivant le travail

de Gan *et al* [129, 130], l'expression de $\Sigma''_{\{\Gamma\}}$ au quatrième ordre d'un calcul perturbatif en J_K est donnée par

$$\begin{aligned} \Sigma''_{\{\Gamma\}}(\omega, D, J_K\rho) = & \frac{\alpha}{\rho} \left[P_0 (J_K\rho)^2 + P_1 \ln(\omega/D) (J_K\rho)^3 + P_2 \cdot K \cdot \ln(\omega/D) (J_K\rho)^4 \right. \\ & \left. + P_3 \cdot K \cdot (J_K\rho)^4 + P_4 \ln^2(\omega/D) (J_K\rho)^4 + \mathcal{O}(J_K\rho)^5 \right], \end{aligned} \quad (9.1)$$

où α, P_0, \dots, P_4 sont des constantes, indépendantes de ω, D et $J_K\rho$ (voir la section 9.1.2 suivante). $(\rho\Sigma''_{\{\Gamma\}})$ correspond au taux de diffusion des électrons de conduction par le spin de l'impureté (i.e. à l'inverse du temps de vie électronique) sans dimension. L'idée fondamentale à la base de la théorie de la renormalisation est la suivante : les propriétés physique dérivées ne dépendent pas du schéma de renormalisation utilisé et sont donc indépendantes de l'énergie de coupure («cut-off») D . Par conséquent le taux de diffusion obtenu après chaque transformation du groupe de renormalisation est invariant. L'équation de Callan-Symanzik qui en découle est

$$\left(\frac{\partial}{\partial \ln D} + \beta(J_K\rho) \frac{\partial}{\partial J_K\rho} \right) \rho \Sigma''_{\{\Gamma\}}(\omega, D, J_K\rho) = 0. \quad (9.2)$$

De façon très générale, on peut utiliser la forme suivante de la fonction d'échelle β correspondant à un développement au troisième ordre en $(J_K\rho)$

$$\beta(J_K\rho) = \kappa_1 (J_K\rho)^2 + \kappa_2 \cdot K \cdot (J_K\rho)^3 + \kappa_3 (J_K\rho)^3 + \mathcal{O}(J_K\rho)^4. \quad (9.3)$$

En incorporant les expressions (9.1) et (9.3) dans l'équation (9.2), on trouve

$$\begin{aligned} & [2\kappa_1 P_0 - P_1] (J_K\rho)^3 + [2\kappa_2 P_0 - P_2] K \cdot (J_K\rho)^4 + 2\kappa_3 P_0 (J_K\rho)^4 \\ & [3\kappa_1 P_1 - 2P_4] \ln(\omega/D) (J_K\rho)^4 + \mathcal{O}(J_K\rho)^5 = 0. \end{aligned} \quad (9.4)$$

L'équation précédente qui conduit à des termes logarithmiques est valable quelle que soit la valeur du couplage J_K . Par conséquent les coefficients apparaissant devant les termes d'ordres successifs en $(J_K\rho)$ sont identiquement nuls. On a

$$\kappa_1 = \frac{P_1}{2P_0}, \quad (9.5)$$

$$\kappa_2 = \frac{P_2}{2P_0}, \quad (9.6)$$

$$\kappa_3 = 0, \quad (9.7)$$

$$P_4 = \frac{3}{2} \kappa_1 P_1. \quad (9.8)$$

9.1.2 Expression de la fonction d'échelle β

Les valeurs de P_0 , P_1 et P_2 s'obtiennent à partir de la partie imaginaire de la self-energy des électrons de conduction (8.42)

$$P_0 = \left[1 - \frac{q}{N}\right] \left(\frac{N}{2} + \frac{1}{2}\right) + \left(\frac{2S}{N}\right) \left(\frac{N}{2} - \frac{1}{2}\right) - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2N}\right), \quad (9.9)$$

$$P_1 = - \left\{ \left[1 - \frac{q}{N}\right]^2 (N^2 + 3N + 2) + \left[1 - \frac{q}{N}\right] \left[\left(\frac{2S}{N}\right) (N^2 - 4) - \left(2N + 1 - \frac{4}{N}\right) \right] + \left[N \left(\frac{2S}{N}\right) - 2 \right]^2 - \left(\frac{2S}{N}\right)^2 (3N - 2) + \left(\frac{2S}{N}\right) \left(N^2 + 7 - \frac{4}{N}\right) - \left(N + 1 + \frac{4}{N} - \frac{2}{N^2}\right) \right\}, \quad (9.10)$$

$$P_2 = \left[1 - \frac{q}{N}\right] \left(\frac{N^2}{4} + \frac{N}{4}\right) + \left(\frac{2S}{N}\right) \left(\frac{N^2}{4} - \frac{N}{4}\right) - \left(\frac{N}{4} - \frac{1}{4}\right). \quad (9.11)$$

Nous soulignons que les expressions précédentes sont exactes quelles que soient les valeurs de N , $2S$ and q , et ne supposent donc aucune approximation. On remarque que :

$$P_2 = N \cdot P_0 / 2 .$$

L'équation d'auto-cohérence (9.8) a été vérifiée par Gan [130] pour un spin d'impureté dans la représentation fondamentale du groupe $SU(2)$. A chacun des ordres en perturbation, l'approche généralisée que nous proposons conduit aux mêmes intégrales en énergie (8.39), (8.40) et (8.41). La seule différence entre le travail de Gan et le nôtre réside dans les facteurs de spin qui dépendent du groupe et de la représentation associée au spin d'impureté considérés. Comme nous avons calculé ces facteurs de spin de façon exacte, nous en concluons que l'équation de self-consistence précédente est automatiquement satisfaite quels que soient le groupe $SU(N)$ et la représentation de spin $\{\Gamma\}$. A l'ordre considéré (nous nous limitons au troisième ordre en perturbation pour β), le calcul de P_4 n'est pas nécessaire.

En utilisant les résultats de la section 9.1.1, la fonction d'échelle β est donnée au troisième ordre en théorie de perturbation en J_K par

$$\beta(J_K \rho) = \frac{P_1}{2P_0} (J_K \rho)^2 + \frac{P_2}{2P_0} K (J_K \rho)^3 + \mathcal{O}(J_K \rho)^4. \quad (9.12)$$

La valeur critique J^* , caractérisant le couplage Kondo au point fixe de couplage intermédiaire, est donnée par le zéro de la fonction β . Nous obtenons dans le cas général

$$J^* \rho = - \frac{P_1}{K P_2} .$$

La valeur de J^* obtenue détermine le régime de validité du développement perturbatif. Comme la méthode du groupe de renormalisation perturbatif que nous avons utilisée n'est pertinente que dans le régime de couplage faible, le point fixe de couplage intermédiaire doit se situer au voisinage du point fixe du système d'électrons libres. Le développement perturbatif de la fonction β est donc valable uniquement si J^* est proche de 0. Ce critère de validité impose des restrictions pour les valeurs de $2S$, q et K accessibles par cette méthode, comme nous allons le voir dans les différents cas suivants.

En analysant le comportement de la fonction β , nous pouvons dériver les propriétés de basses énergies du système. La quantité principale est l'exposant critique Δ , donné par la pente de β au voisinage de J^*

$$\Delta = \left. \frac{d\beta}{d(J_K \rho)} \right]_{J_K=J^*} = \frac{N}{K} \left(\frac{P_1}{2P_2} \right)^2 .$$

Dans le régime de basses températures, toutes les quantités physiques du système suivent des lois de puissance en (T/T_K) , dont les exposants sont déterminés uniquement par Δ .

9.2 Analyse du point fixe de couplage intermédiaire

Nous utilisons ici les résultats de la section 9.1 afin d'étudier le point fixe de couplage intermédiaire associé au modèle Kondo lorsque le point fixe de couplage fort est instable, pour plusieurs classes de représentations associées au spin de l'impureté.

9.2.1 Représentation fondamentale du groupe SU(2)

Nous considérons d'abord le cas où le spin de l'impureté est caractérisé par la représentation fondamentale de SU(2), autrement dit que l'impureté (comme les électrons de conduction) porte un spin 1/2. Il s'agit du cas étudié par Gan *et al.* [129, 130].

A température nulle et après continuation analytique le long de l'axe réel, nous obtenons pour la partie imaginaire de la self-energy des électrons de conduction

$$\begin{aligned} & \text{Im} \left[\Sigma_{(2,0)}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] \\ &= -\frac{3n_i}{32} (J_K)^2 \rho \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \cdot \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)} \right\} , \end{aligned} \quad (9.13)$$

$$\begin{aligned} & \text{Im} \left[\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] \\ &= \frac{3n_i}{32} (J_K)^3 \rho^2 \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \cdot \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \frac{\tanh(\beta\varepsilon_2/2)}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \right\} , \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$\begin{aligned}
& \text{Im} \left[\Sigma_{(4,1)\text{a}}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] + \text{Im} \left[\Sigma_{(4,1)\text{b}}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] + \text{Im} \left[\Sigma_{(4,1)\text{c}}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \right] \\
&= \frac{3n_i}{32} K \cdot (J_K)^4 \rho^3 \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \\
& \times \text{Im} \left\{ \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 \frac{n_f(-\varepsilon_1)n_f(\varepsilon_2)n_f(-\varepsilon_3) + n_f(\varepsilon_1)n_f(-\varepsilon_2)n_f(\varepsilon_3)}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\omega - \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 + i0^+)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)} \right\},
\end{aligned} \tag{9.15}$$

d'après les expressions générales (8.36), (8.37) et (8.38), respectivement. Les expressions précédentes sont à comparer aux équations (5)-(7), de l'article de Gan [130]. Les résultats sont identiques à un facteur 1/2 près, le terme 3/32 étant remplacé par 3/16 à chacun des ordres en perturbation dans les expressions de Gan. Cette différence d'un facteur 1/2 ne constitue pas un problème, dans la mesure où la self-energy électronique n'est pas en elle-même une quantité physique. Par contre, on peut vérifier que cette différence ne joue pas sur la fonction d'échelle, à partir de laquelle les quantités physiques peuvent être dérivées. L'expression générale (9.12) donne dans le cas présent

$$\beta(J_K \rho) = -(J_K \rho)^2 + \frac{1}{2} K (J_K \rho)^3 + \mathcal{O}(J_K \rho)^4, \tag{9.16}$$

en utilisant les équations (9.9), (9.10) et (9.11). La fonction β que nous obtenons est identique à l'expression donnée par Gan au troisième ordre d'un développement en perturbation (cf. Eq. (20) de la référence [130]). L'expression (9.16) est en accord avec celle dérivée par Abrikosov et Migdal pour un seul canal de conduction [142], ainsi qu'avec celle obtenue en utilisant la théorie de l'invariance conforme appliquée au modèle Kondo multicanal [39]. Elle diffère d'un facteur 2 avec le résultat donné par Nozières et Blandin [16] ($K/2$ dans l'expression ci-dessus doit alors être remplacé par K).

Nous mentionnons que notre approche, bien qu'inspirée par le travail de Gan, est cependant d'un point de vue technique assez différente, car les calculs de Gan n'impliquent qu'un seul potentiel chimique contrairement aux nôtres qui en incluent deux. Il est en effet possible en utilisant la symétrie électron-trou de l'hamiltonien de construire une distribution de potentiels chimiques comportant non pas d potentiels chimiques comme nous l'avons fait (voir la section 7.3.1), mais $d/2$ [122], où d est la dimension de la représentation associée au spin de l'impureté. L'utilisation de la propriété de symétrie électron-trou n'apporte aucune simplification lorsque le spin de l'impureté est associé à une représentation générale du groupe $SU(N)$, mais est par contre très efficace dans le cas d'un spin d'impureté 1/2 comme nous l'étudions ici. Ainsi les sommations sur les potentiels chimiques (cf. section 8.2.2.b) n'interviennent plus en présence d'une symétrie électron-trou. En effet le seul potentiel chimique présent disparaît dès lors que l'on effectue les sommations sur les fréquences de Matsubara. Le fait que nos résultats soient en accord avec ceux de Gan constitue donc une vérification non triviale de la validité de notre approche.

Nous obtenons pour la valeur critique J^*

$$J^* \rho = \frac{2}{K} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{K^2}\right). \tag{9.17}$$

Comme chacune des boucles d'électrons de conduction contient au moins deux vertex, et que chaque terme $(J_K \rho)$ apporte un facteur $(1/K)$ d'après l'équation précédente, nous en déduisons que les diagrammes de la self-energy électronique schématisés sur la Figure 8.1 (voir chapitre précédent) incluent toutes les contributions jusqu'à l'ordre $(1/K^3)$. Concernant le régime de validité du développement perturbatif de la fonction d'échelle, J^* doit être proche de 0. D'après l'équation (9.17), le seul paramètre de contrôle sur J^* dans le cas présent est donné par le nombre de canaux de conduction K . Le développement en perturbation de la fonction β n'est valable que dans la limite d'un grand nombre de canaux, $K \gg 1$, qui correspond au cas de l'impureté sur-écrantée décrit par Nozières et Blandin dans le cadre du modèle Kondo multicanal [16].

L'exposant critique Δ est donné par l'expression suivante

$$\Delta = \frac{2}{K} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{K^2}\right). \quad (9.18)$$

9.2.2 Spin arbitraire du groupe SU(2)

Nous considérons maintenant le cas où le spin de l'impureté est S dans le groupe SU(2). La représentation de ce spin est complètement symétrique, elle correspond en termes de tableaux de Young à une ligne horizontale de $2S$ boîtes

$$\{\Gamma\} \equiv \overbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & \\ \hline \end{array}}^{2S}.$$

Nous obtenons pour la valeur du couplage au point fixe de couplage intermédiaire

$$J^* \rho = \frac{2}{K} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{K^2}\right). \quad (9.19)$$

Le régime de validité du développement perturbatif doit être examiné avec soin. L'expression précédente montre que, comme dans le cas d'un spin $1/2$, on doit se placer dans la limite d'un grand nombre de canaux, $K \gg 1$. Par ailleurs, comme l'ont déjà noté Abrikosov-Migdal [142] et Affleck-Ludwig [39], le terme d'ordre 4 du développement de la fonction d'échelle, $\mathcal{O}(J_K \rho)^4$, comporte un coefficient proportionnel à la valeur propre de l'opérateur quadratique de Casimir, $S(S+1)$. Afin que cette contribution, qui n'a pas été prise en compte jusqu'ici, ne l'emporte pas sur les termes d'ordre 2 et 3, nous devons également supposer que le nombre de composantes bosoniques $2S$ caractérisant la représentation du spin de l'impureté n'est pas trop grand. Autrement dit, le point fixe de couplage intermédiaire décrit le cas d'une impureté sur-écrantée, $K \gg 2S$.

Concernant la valeur de l'exposant critique, nous trouvons

$$\Delta = \frac{2}{K} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{K^2}\right). \quad (9.20)$$

Ces résultats coïncident avec ceux obtenus dans le cas d'un spin 1/2 (voir la section précédente). Nous voyons donc que dans le groupe SU(2), la physique du système est indépendante de la représentation du spin de l'impureté, elle ne dépend que de la nature sous ou sur-écrantée de cette impureté. Les représentations de ce type ont déjà été étudiées, en utilisant la méthode de l'ansatz de Bethe [111]. Nous obtenons pour les valeurs de l'interaction Kondo au point fixe de couplage intermédiaire J^* et de l'exposant critique Δ des résultats identiques.

9.2.3 Symétrie électron-trou dans le groupe SU(N)

Nous considérons maintenant le cas de la représentation fermionique respectant la symétrie électron-trou dans le groupe SU(N), décrite dans la section 4.2.3. Cette représentation est caractérisée en terme de tableau de Young par une colonne comprenant $q = N/2$ boîtes

$$\{\Gamma\} \equiv \left. \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right\} q = N/2 .$$

Le spin d'un électron de conduction correspond à la représentation fondamentale du groupe SU(N).

Les coefficients du développement perturbatif en J_K de la partie imaginaire de la self-energy donnent dans le cas présent

$$P_0 = \frac{N+1}{4} \quad (9.21)$$

$$P_1 = -\frac{N(N+1)}{4} \quad (9.22)$$

$$P_2 = \frac{N(N+1)}{8} \quad (9.23)$$

d'après les expressions (9.9), (9.10) et (9.11), respectivement. Nous en déduisons la forme de la fonction d'échelle

$$\beta(J_K\rho) = -\frac{N}{2}(J_K\rho)^2 + \frac{N}{4}K(J_K\rho)^3 + \mathcal{O}(J_K\rho)^4 . \quad (9.24)$$

Nous trouvons pour la valeur du couplage critique

$$J^*\rho = \frac{2}{K} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{K^2}\right) .$$

Concernant le régime de validité du développement perturbatif, J^* n'est proche de 0 que dans la limite $K \gg 1$. Le point fixe de couplage intermédiaire décrit donc à nouveau le cas d'une impureté sur-écrantée. Contrairement au cas du groupe SU(2) pour lequel un seul paramètre de contrôle, K , était présent, il existe ici un deuxième paramètre, N , qui contrôle

le développement perturbatif. Nous avons donc considéré les diagrammes d'ordres supérieurs du développement perturbatif de la self-energy (voir la Figure 1 de l'article de Gan [130]), et vérifié que ces ordres supérieurs n'introduisent pas, notamment par l'intermédiaire des facteurs de spin, de termes en puissance de N qui domineraient les premiers ordres auxquels nous nous sommes limités ici.

Nous obtenons pour la valeur de l'exposant critique

$$\Delta = \frac{N}{K} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{K^2}\right), \quad (9.25)$$

qui est en accord avec les résultats obtenus en utilisant les méthodes de l'ansatz de Bethe [111] et d'invariance conforme [39].

Chapitre 10

Conclusion

Dans cette deuxième partie, nous avons considéré un modèle Kondo multicanal caractérisé par une impureté dont le spin est associé à une représentation mixte du groupe $SU(N)$, combinant des degrés de liberté bosoniques et fermioniques. Les résultats obtenus dans la première partie ont fait apparaître une instabilité du point fixe de couplage fort pour certaines classes de représentations du spin de l'impureté, lorsque les électrons de conduction se répartissent sur un canal. Dans le régime où le point fixe de couplage fort est instable, la physique du système est décrite par un point fixe de couplage intermédiaire, en général associé à un comportement de type non liquide de Fermi. La caractérisation du point fixe de couplage intermédiaire est donc particulièrement intéressante, en vue de comprendre à terme le comportement non-liquide de Fermi observé dans de nombreux composés de fermions lourds. Nous avons développé une méthode permettant d'analyser le point fixe de couplage intermédiaire, en supposant que ce point fixe de couplage intermédiaire est situé au voisinage du point fixe du système libre. Cette méthode est basée sur l'approche perturbative du groupe de renormalisation. En utilisant un formalisme d'intégration fonctionnelle permettant un développement perturbatif de la fonction de partition avec un traitement exact de la contrainte de spin, nous avons dérivé dans un calcul perturbatif aux premiers ordres du couplage Kondo J_K l'expression de la partie imaginaire de la self-energy électronique, qui est proportionnelle au taux de diffusion des électrons de conduction par le spin de l'impureté. Cette quantité physique est invariante par transformation du groupe de renormalisation. À l'aide d'arguments de scaling, nous avons dérivé l'expression de la fonction d'échelle β aux premiers ordres en perturbation de J_K . La fonction β caractérise non seulement le flot de renormalisation, ce qui permet d'identifier le point fixe de couplage intermédiaire, mais donne également accès aux propriétés de basses énergies du système. Dans le cas de représentations simples du spin de l'impureté, nous avons dérivé l'expression de l'exposant critique universel contrôlant la dépendance thermique des différentes quantités physiques du système à basses températures. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux obtenus par les méthodes de l'ansatz de Bethe et d'invariance conforme.

Ce travail est en cours. Nous voulons étendre maintenant cette approche au cas d'une représentation «en L» du groupe $SU(N)$ arbitraire. Le développement perturbatif en J_K de la fonction β a déjà été effectué, en revanche le régime de validité de ce développement perturbatif s'avère subtil à établir. Nous devons donc répondre aux questions suivantes :

- Quelles sont les relations liant les paramètres de l'impureté $2S$ et q et le nombre de

canaux K qui permettent d'assurer que le point fixe de couplage intermédiaire se situe bien au voisinage du point fixe du système libre?

- Dans le cas où l'on considère une représentation complètement antisymétrique du spin de l'impureté dans le groupe $SU(N)$ respectant la symétrie électron-trou (cf. Section 9.2.3), quel est l'effet d'ajouter une composante symétrique à cette représentation? Les premiers résultats préliminaires obtenus indiquent que la valeur de l'exposant critique universel associé à la représentation «en L» ainsi obtenue est modifiée.

- Si ces résultats se confirment, cela signifierait que dans le cas d'une représentation «en L» les propriétés de basses énergies du système dépendent de la forme de la représentation. Ceci serait très nouveau, en rupture complète avec les résultats connus concernant les représentations complètement symétriques ou antisymétriques du groupe $SU(N)$. Une explication possible à ce comportement pourrait être la forme particulière de la représentation mixte. En effet, dans le régime $1 < K < 2S$, l'impureté «en L» présente une dualité très intéressante: elle est sur-écrantée si l'on considère la composante fermionique, mais sous-écrantée vis-à-vis de la composante bosonique.

Partie III

Une approche de la supraconductivité à haute température critique

D. Bensimon, and N. Nagaosa,
"Antiferromagnetism and singlet formation in underdoped high-T_c cuprates:
implications for superconducting pairing",
in preparation.

Chapitre 11

Introduction

Depuis la découverte des composés supraconducteurs à haute température critique [51], il a été établi que la forte répulsion coulombienne entre électrons joue un rôle essentiel. Cependant aucun mécanisme microscopique n'est accepté à ce jour comme explication globale à cette supraconductivité clairement non conventionnelle. Les mécanismes de type magnétiques potentiellement impliqués ont été étudiés intensivement. Deux voies dominantes pour appréhender le problème sont apparues juste après cette découverte. La première, appelée théorie du spin-bag [65], considère l'échange de fluctuations de spin dans un état presque antiferromagnétique (AF). Lorsque le système est dopé en trous, les porteurs de charge sont dans un état d'onde de densité de spin (SDW) et des petites poches de trous se forment. Les fluctuations longitudinales de spin reliées à la susceptibilité χ^{zz} , suivant la direction z perpendiculaire aux plans de CuO_2 , joue un rôle prédominant dans la formation des paires de Cooper. Cette théorie prédit pour le gap supraconducteur une symétrie d_{xy} . La seconde approche est l'état résonant de liaison de valence (RVB) [66], reposant sur la formation d'un singulet de spin dans les plans de CuO_2 via un terme d'interaction d'échange J de type Heisenberg. Dans ce cas la prédiction est que l'appariement entre électrons est médié essentiellement par les fluctuations (transverses) de spin dans ces plans $x - y$ reliées à la susceptibilité χ^\pm . En général, les théories basées sur un mécanisme RVB ne tiennent pas compte de l'ordre antiferromagnétique à longue distance (AFLR). Elles prédisent une symétrie $d_{x^2-y^2}$ du gap supraconducteur. Ces deux approches qualitativement très différentes ont été extrêmement étudiées de façon indépendante, mais la relation entre les deux reste un problème ouvert.

Hsu a le premier considéré simultanément les corrélations AF et RVB en utilisant une approximation de type Gutzwiller [143], dans le cas d'un système à demi rempli. Ses résultats indiquent l'apparition d'un ordre AFLR coexistant avec un état RVB de symétrie d correspondant à une phase de flux alterné [144]. Ils sont confirmés par des études numériques du modèle de Heisenberg utilisant la méthode variationnelle de Monte-Carlo [145, 146]. Ces études montrent que la fonction d'onde projetée de Gutzwiller $\Psi_{\text{RVB}+\text{SDW}}$ supposant la coexistence entre les états RVB et SDW conduit à des résultats en très bon accord avec ceux obtenus par diagonalisation exacte, pour ce qui concerne l'énergie de l'état fondamental et le module de l'aimantation alternée [147, 148]. La fonction d'onde variationnelle n'impliquant qu'un état SDW est associée à une énergie plus élevée. On peut donc en déduire que les deux phénomènes, SDW et RVB, coexistent dans un isolant de Mott. Lorsque le système est

faiblement dopé en trous (en concentration x), l'ordre AFLR est rapidement supprimé et la supraconductivité apparaît. Une question importante est de déterminer lesquelles des fluctuations AF ou des corrélations RVB prédominent. Comme aucun ordre AFLR n'a jamais été observé expérimentalement dans la phase supraconductrice (SC) et qu'il est impossible de distinguer les contributions provenant des susceptibilités χ^{zz} et χ^\pm au potentiel d'appariement SC, cette question pourrait sembler académique. Cependant les études numériques [145, 146] mentionnées précédemment (basées sur la méthode variationnelle de Monte-Carlo) ont également montré qu'à faible dopage les états SDW et RVB coexistent toujours. Du point de vue de la symétrie particule-trou dans le groupe de spin SU(2), cela signifie que la dégénérescence, autrement dit la symétrie de jauge SU(2), entre l'état d'appariement de symétrie d et la phase de flux est levée, le premier (état SC) étant caractérisé par une énergie plus basse.

Cependant ce point de vue qui était communément accepté a été remis en question récemment par de nouvelles études utilisant la diagonalisation exacte et la méthode variationnelle de Monte-Carlo [149]. Le résultat de ces travaux est que l'état le plus favorable énergétiquement présente des petites poches de trous à faible dopage, et surtout n'est pas supraconducteur. Cet état non supraconducteur est cohérent avec l'état combinant une instabilité SDW et une phase de flux de π et présentant des poches de trous aux quatre nœuds situés aux points $\mathbf{k} = (\pi/2, \pm\pi/2)$ de la première zone de Brillouin. Cela signifie qu'à faible dopage l'approche de champ moyen doit être mise en place avec soin. En effet les fluctuations de la phase du paramètre d'ordre SC sont importantes lorsque la concentration en trous est faible, et la densité de charge, qui est l'opérateur canonique conjugué de la phase, est supprimée. Une fois que la supraconductivité est détruite par ces fluctuations quantiques, le seul ordre restant est l'ordre AFLR, et le système demeure non supraconducteur. En nous guidant des résultats numériques mentionnés précédemment, nous prenons l'état (SDW + phase de flux de π) avec de petites poches de trous comme point de départ d'une théorie de champ moyen à x faible mais fini.

Du point de vue expérimental, des expériences utilisant la technique de photoémission résolue en angle (ARPES) effectuées récemment sur le composé $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ (Na-CCOC) ont mis en évidence un petit «arc de Fermi» au voisinage des points $\mathbf{k} = (\pi/2, \pm\pi/2)$. La dépendance angulaire du «pseudo-gap» qui en résulte diffère de la forme $(\cos k_x - \cos k_y)$ prévue par un appariement de symétrie $d_{x^2-y^2}$ [150, 151]. Ces résultats suggèrent fortement que le pseudo-gap est distinct du gap SC, et que la supraconductivité est provoquée par d'autres interactions, différentes du couplage magnétique J . Bien qu'un seul arc ne soit observé par ARPES, il est raisonnable d'envisager que la surface de Fermi forme une boucle fermée autour de chacun des nœuds. En effet, si l'on admet que la surface de Fermi disparaît en présence d'un pseudo-gap de valeur élevée dans les zones anti-nodales, i.e. près des points $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ et $(0, \pi)$, on peut penser qu'un second arc limitant la petite poche de trous est également présent dans la région où l'intensité du signal est trop faible pour être détectée expérimentalement. La question de la symétrie du gap supraconducteur se pose alors car une symétrie de type $d_{x^2-y^2}$ nécessite la présence de points nodaux au voisinage de la surface de Fermi, autrement dit dans les petites poches de trous, ce qui réduit l'énergie de condensation supraconductrice et rend l'état SC énergétiquement défavorable. Ainsi la symétrie d_{xy} , qui

n'implique pas l'existence des nœuds dans les petites poches de trous, a souvent été retenue comme la symétrie la plus pertinente, tel que le prédit la théorie du spin-bag [65].

Dans cette troisième partie, nous étudions la supraconductivité à haute température critique dans une approximation de champ moyen pour laquelle les états SDW et phase de flux alternée coexistent, pour une faible valeur du dopage x en trous. Cet état inclut à la fois l'ordre AFLR et les corrélations RVB. Ces corrélations RVB introduites par la phase de flux ont deux effets importants. Le premier est d'introduire un spectre de fermions caractérisé par la présence de deux types de fermions de Dirac associés aux points nodaux $\mathbf{k} = (\pi/2, \pm\pi/2)$. Ces fermions de Dirac indiquent une caractéristique topologique non triviale. Comme nous le verrons plus loin, il s'agit d'un équivalent des anomalies rencontrées en théorie quantique des champs [152]. La deuxième conséquence résultant des corrélations RVB est d'accroître les fluctuations transverses de spin par rapport aux fluctuations longitudinales. Ces deux effets ont un impact crucial sur la supraconductivité dans la région sous-dopée, que nous avons étudiée en utilisant un développement en $1/N$ analogue à l'approximation de la phase aléatoire (RPA).

Cette troisième partie est organisée de la façon suivante. Le chapitre 12 présente le modèle et les hypothèses nous permettant de construire la théorie de champ moyen. Comme les intégrales de recouvrement d'électrons entre plans de CuO_2 sont très faibles, nous les négligeons et pouvons considérer que le système est bidimensionnel, modélisé par un réseau carré. L'hamiltonien dans l'approximation de champ moyen est obtenu dans un formalisme d'intégration fonctionnelle en terme d'opérateurs fermioniques et de champs bosoniques résultant du découplage du terme d'interaction, effectué suivant les hypothèses précédentes. Cet hamiltonien est ensuite diagonalisé à l'aide d'une transformation canonique unitaire, qui fait apparaître les opérateurs de quasiparticules. Nous terminons ce chapitre 12 en donnant quelques résultats sur le comportement des fermions de Dirac mentionnés plus haut, qui sont une conséquence de l'anomalie introduite par les corrélations RVB. Dans le chapitre 13, nous considérons les fluctuations des différents champs bosoniques au premier ordre autour de leur valeur au point-selle et en déduisons le système d'équations de champ moyen couplées. Nous avons résolu ce système numériquement, et présentons les solutions obtenues à différentes valeurs du dopage en trous (inférieures à 10 %). Le chapitre 14 est consacré spécifiquement à l'étude des effets résultant de la coexistence entre antiferromagnétisme et corrélations RVB sur la supraconductivité. Après avoir dérivé l'action au second ordre des fluctuations des champs de bosons, nous obtenons l'action effective modélisant à un niveau RPA les interactions entre quasiparticules, en suivant de façon proche la procédure développée dans la théorie du spin-bag. Nous pouvons ainsi dériver le potentiel d'appariement de type BCS, dont les intensités ont été calculées numériquement en fonction du vecteur de diffusion \mathbf{q} situé dans la zone de Brillouin magnétique, pour différentes valeurs faibles du dopage. Nos résultats sont très différents de ceux obtenus par les théories précédentes. En considérant que la supraconductivité résulte d'un appariement entre les trous situés dans les petites poches centrées autour des points $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ de la zone de Brillouin, l'interaction BCS effective correspondante que nous obtenons est essentiellement répulsive. Nos résultats signifient donc que la coexistence entre antiferromagnétisme et corrélation RVB ne peut mener à l'apparition d'une phase supraconductrice, en accord avec les résultats numériques

récents [149] mentionnés plus haut. Nous terminons ce chapitre 14 par l'étude de la symétrie du paramètre d'ordre supraconducteur. Une description complète de ce paramètre d'ordre nécessiterait la résolution de l'équation de gap, qui n'a pas été effectuée: compte tenu du grand nombre de degrés de liberté collectifs présents, ce travail demanderait un effort numérique très conséquent. En utilisant simplement des arguments de symétrie, nous avons pu néanmoins obtenir des informations très intéressantes, là encore en rupture avec un grand nombre des théories précédentes. En effet notre travail prédit un gap supraconducteur de symétrie $d_{x^2-y^2}$, en accord avec de nombreux résultats expérimentaux [153, 154]. Le chapitre 15 présente une discussion concernant les implications des résultats obtenus.

L'appendice E donne les expressions des différentes intégrales thermiques rencontrées dans le chapitre 14, qui sont nécessaires au calcul du potentiel d'appariement. L'appendice F présente un résultat intermédiaire montrant que la fonction de corrélation spin-spin transverse contient un pôle sans gap, conformément au théorème de Goldstone.

Chapitre 12

Modèle et théorie de champ moyen

Dans ce chapitre, nous présentons le modèle utilisé, et les hypothèses nous permettant de construire une théorie de champ moyen.

12.1 Formulation du modèle microscopique

12.1.1 Hamiltonien de départ

Le modèle microscopique que nous considérons pour l'étude des cuprates est le modèle $t - J$ [66, 155]. Nous utilisons une formulation en bosons esclaves [156, 157] des opérateurs d'électron

$$c_{i,\sigma}^\dagger = f_{i,\sigma}^\dagger b_i, \quad (12.1)$$

soumis à la contrainte

$$b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} f_{i,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma} = 1. \quad (12.2)$$

Dans ce formalisme, la double occupation d'un site est exclue [158, 159, 160]. Les opérateurs fermioniques f sont appelés spinons alors que les bosons esclaves b sont dénommés holons. Dans la suite de cette partie, nous travaillerons à très basse température, et les holons seront supposés tous condensés.

Nous partons de l'hamiltonien suivant, pour un réseau carré constitué de N_s sites avec un paramètre de réseau égal à 1

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \left(- \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} - \sum_{\langle i,j \rangle'} t'_{ij} - \sum_{\langle i,j \rangle''} t''_{ij} \right) \sum_{\sigma=\downarrow,\uparrow} \left[b_i b_j^\dagger f_{i,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + b_j b_i^\dagger f_{j,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma} \right] \\ & + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \end{aligned} \quad (12.3)$$

où t_{ij} , t'_{ij} et t''_{ij} représentent les intégrales de saut entre sites premiers, seconds et troisièmes voisins, repérés par les couples $\langle \rangle$, $\langle \rangle'$, $\langle \rangle''$. Par la suite, nous considérerons des intégrales

de saut uniformes dans le réseau: $t_{ij} = t$, $t'_{ij} = t'$, $t''_{ij} = t''$. Pour $t' < 0$, $t'' > 0$, l'hamiltonien précédent décrit bien la situation des cuprates dopés en trous (type p), alors que le cas $t' > 0$, $t'' < 0$ correspond au cas des cuprates dopés en électrons que nous n'aborderons pas. Les énergies sont renormalisées par la valeur de l'intégrale de saut entre premiers voisins: $t \cong 0.4 \text{ eV} = 1$. Ainsi nous posons: $t' = -0.3$, $t'' = 0.2$ et $J = 0.3$.

12.1.2 Découplage du terme d'interaction

Nous construisons maintenant une théorie de champ moyen à partir de l'hamiltonien précédent.

On sait que la validité d'une approche de champ moyen est très délicate à démontrer dans le cas d'une théorie comportant une contrainte, par exemple de non-double occupation des sites (12.2). Une simple comparaison des énergies associées aux états fondamentaux, telle qu'elles sont obtenues à l'aide d'une méthode variationnelle, n'offre pas un critère fiable. En effet une théorie de champ moyen viole nécessairement la contrainte, qui n'est satisfaite alors que globalement et non plus localement. Il n'est donc pas impossible que la théorie de champ moyen conduise à un état fondamental appartenant au sous-espace de Hilbert interdit par la contrainte.

Le choix des paramètres caractérisant la théorie de champ moyen requiert donc une certaine intuition physique. Nous avons choisi pour cela de nous laisser guider par les résultats obtenus grâce aux méthodes numériques présentées dans le chapitre 11 précédent, qui prédisent un état fondamental non supraconducteur. Afin d'étudier simultanément les effets de l'antiferromagnétisme (AF) et d'une phase de flux dans un état RVB, nous introduisons deux paramètres de champ moyen. Le premier est l'aimantation, qui sera supposée alternée dans la direction z [65]

$$\begin{aligned} m_i^{s_m} &= \langle \mathbf{S}_i^{s_m} \rangle, \quad s_m = x, y, z, \\ \mathbf{S}_i^{s_m} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} f_{i, \sigma}^\dagger \sigma_{\sigma, \sigma'}^{s_m} f_{i, \sigma'}, \end{aligned} \quad (12.4)$$

où $\tilde{\sigma}^{s_m}$ sont les matrices de Pauli. Le second est le paramètre de phase de flux [144]

$$\begin{aligned} \chi_{ij} &= \langle \sum_{\sigma=\downarrow, \uparrow} f_{i, \sigma}^\dagger f_{j, \sigma} \rangle, \quad \chi = |\chi_{ij}|, \\ \chi_{i, i+x} &= \chi \cdot \exp \left[+i \frac{\phi}{4} (-1)^i \right], \quad \chi_{i, i+y} = \chi \cdot \exp \left[-i \frac{\phi}{4} (-1)^i \right]. \end{aligned} \quad (12.5)$$

La Figure 12.1 schématise l'effet de ces deux paramètres de champ moyen sur le réseau.

L'hamiltonien (12.3) s'écrit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^t + \mathcal{H}^m + \mathcal{H}^\chi, \quad (12.6)$$

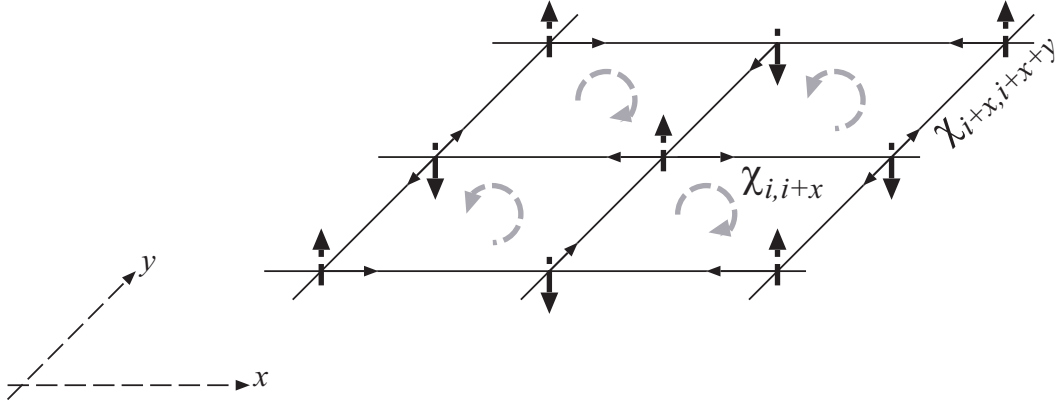


FIG. 12.1 – Réseau carré présentant simultanément une aimantation alternée et une phase de flux.

avec

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}^t &= \left(- \sum_{\langle i,j \rangle} t - \sum_{\langle i,j \rangle'} t' - \sum_{\langle i,j \rangle''} t'' \right) \sum_{\sigma} \left[b_j b_i^{\dagger} f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{j,\sigma} + b_j b_i^{\dagger} f_{j,\sigma}^{\dagger} f_{i,\sigma} \right], \\
 \mathcal{H}^m &= \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \\
 \mathcal{H}^x &= (1 - \alpha) J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.
 \end{aligned} \tag{12.7}$$

L'hamiltonien effectif correspondant à chacun des paramètres de champ moyen est donné par

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{MF}^m &= \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s_m=x,y,z} \left[m_j^{s_m} \mathbf{S}_i^{s_m} + m_i^{s_m} \mathbf{S}_j^{s_m} - m_i^{s_m} m_j^{s_m} \right], \\
 \mathcal{H}_{MF}^x &= - \frac{(1 - \alpha) J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left[\chi_{ij} f_{j,\sigma}^{\dagger} f_{i,\sigma} + \chi_{ij}^* f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{j,\sigma} \right] + \frac{(1 - \alpha) J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \chi_{ij} \chi_{ij}^*.
 \end{aligned}$$

Nous avons introduit un paramètre α afin de décomposer l'interaction d'échange de Heisenberg en une partie AF et une partie de flux, respectivement. La valeur de α a été déterminée de manière à reproduire le résultat optimal obtenu à demi-remplissage par méthode variationnelle de Gutzwiller [143]. Ainsi α doit être considéré comme un paramètre variationnel. Nous conserverons sa valeur constante sur toute la gamme de dopage que nous étudierons ($\alpha = 0.301127$), comme expliqué dans le chapitre 13 suivant.

Nous utilisons un formalisme d'intégrale de chemin à température finie. Grâce à la transformation de Stratonovitch - Hubbard [163, 164] nous obtenons la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\bar{\Psi} \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\chi \mathcal{D}m \mathcal{D}\lambda \mathcal{D}b \exp \left(- \int_0^{\beta} d\tau \mathcal{L}(\tau) \right), \tag{12.8}$$

avec $\beta = 1/k_B T$. Le lagrangien est donné par

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\tau) = & \sum_{i,\sigma} \bar{\Psi}_{i,\sigma}(\tau) [\partial_\tau - i\lambda_i(\tau) - \mu] \Psi_{i,\sigma}(\tau) + \sum_i b_i^\dagger(\tau) [\partial_\tau - i\lambda_i(\tau)] b_i(\tau) \\
& + \left(- \sum_{\langle i,j \rangle} t - \sum_{\langle i,j \rangle'} t' - \sum_{\langle i,j \rangle''} t'' \right) \sum_\sigma [b_i(\tau) b_j^\dagger(\tau) \bar{\Psi}_{i,\sigma}(\tau) \Psi_{j,\sigma}(\tau) \\
& \quad \quad \quad + b_j(\tau) b_i^\dagger(\tau) \bar{\Psi}_{j,\sigma}(\tau) \Psi_{i,\sigma}(\tau)] \\
& + \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{s_m=x,y,z} [m_j^{s_m}(\tau) \bar{\Psi}_{i,\sigma}(\tau) \tilde{\sigma}_{\sigma,\sigma'}^{s_m} \Psi_{i,\sigma'}(\tau) + m_i^{s_m}(\tau) \bar{\Psi}_{j,\sigma}(\tau) \tilde{\sigma}_{\sigma,\sigma'}^{s_m} \Psi_{j,\sigma'}(\tau)] \\
& - \frac{(1-\alpha)J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_\sigma [\chi_{ij}(\tau) \bar{\Psi}_{j,\sigma}(\tau) \Psi_{i,\sigma}(\tau) + \chi_{ij}^*(\tau) \bar{\Psi}_{i,\sigma}(\tau) \Psi_{j,\sigma}(\tau)] \\
& - \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} [m_i^x(\tau) m_j^x(\tau) + m_i^y(\tau) m_j^y(\tau) + m_i^z(\tau) m_j^z(\tau)] \\
& + \frac{(1-\alpha)J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \chi_{ij}(\tau) \chi_{ij}^*(\tau). \tag{12.9}
\end{aligned}$$

Dans l'expression précédente (12.9) $\bar{\Psi}_{i,\sigma}$, $\Psi_{i,\sigma}$ sont les variables de Grassmann associées aux opérateurs de spinons $f_{i,\sigma}^\dagger$, $f_{i,\sigma}$. Les multiplicateurs de Lagrange $i\lambda_i$ assurent que la contrainte de non-double occupation (12.2) est satisfaite. Nous travaillons dans l'ensemble grand canonique: un potentiel chimique μ associé est fixé de façon à contrôler le nombre de spinons, à savoir la concentration (dopage) en trous x .

12.2 Hypothèses de point selle et hamiltonien de champ moyen

12.2.1 Approximations de champ moyen

Nous faisons les hypothèses suivantes:

(i) Comme nous travaillons à température (presque) nulle, tous les holons sont supposés condensés

$$(b_i)_0 = b_0, \quad (b_0)^2 = x, \quad \text{où } x \text{ est le dopage en trous.}$$

Ainsi les spinons f peuvent être considérés comme de simples électrons renormalisés.

(ii) On suppose que les multiplicateurs de Lagrange ne dépendent pas du site, ce qui signifie que la contrainte est imposée globalement mais non localement

$$(i\lambda_i)_0 = \lambda_0. \tag{12.10}$$

(iii) Pour la partie AF nous considérons une aimantation alternée le long de la direction z perpendiculaire au plan de CuO_2

$$(m_i^x)_0 = 0, (m_i^y)_0 = 0, (m_i^z)_0 = (-1)^i m. \quad (12.11)$$

(iv) En ce qui concerne la contribution de flux nous supposons que le flux au demi-remplissage ($x = 0$) est égal à π ($\phi = \pi$), ce qui correspond à la solution la plus favorable énergétiquement dans le cas d'un réseau carré [165]

$$\begin{aligned} (\chi_{i,i+x})_0 &= (\chi_i^x)_0 = \chi \cdot \exp \left[+i \frac{\pi}{4} (-1)^i \right], \\ (\chi_{i,i+y})_0 &= (\chi_i^y)_0 = \chi \cdot \exp \left[-i \frac{\pi}{4} (-1)^i \right]. \end{aligned} \quad (12.12)$$

12.2.2 Expression de l'hamiltonien en champ moyen

Afin de dériver le hamiltonien en champ moyen \mathcal{H}_{MF} , nous remarquons que les seules composantes AF et de flux non nulles dans l'espace des impulsions correspondent aux vecteurs de diffusion $\mathbf{q} = (0, 0)$ et $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$

$$\begin{aligned} (m_q^x)_0 &= (m_q^y)_0 = 0, (m_q^z)_0 = m \sqrt{N_s} \cdot \delta(q_x - \pi) \delta(q_y - \pi), \\ (\chi_q^x)_0 &= \chi \sqrt{N_s} \cdot \left[\cos(\phi/4) \cdot \delta(q_x) \delta(q_y) + i \cdot \sin(\phi/4) \cdot \delta(q_x - \pi) \delta(q_y - \pi) \right], \\ (\chi_q^y)_0 &= \chi \sqrt{N_s} \cdot \left[\cos(\phi/4) \cdot \delta(q_x) \delta(q_y) - i \cdot \sin(\phi/4) \cdot \delta(q_x - \pi) \delta(q_y - \pi) \right]. \end{aligned}$$

La sommation habituelle sur les impulsions étendue à la première zone de Brillouin peut donc se ramener à une sommation sur la zone de Brillouin magnétique, dont les bords sont donnés par la surface de Fermi du modèle de Hubbard au demi-remplissage. On parle ainsi de zone de Brillouin réduite. L'une de ses caractéristiques marquantes est la propriété d'emboîtement («nesting») par le vecteur $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, comme on le voit sur la Figure 12.2.

On peut écrire \mathcal{H}_{MF} dans une base appropriée de spineurs dans l'espace des impulsions

$$\begin{bmatrix} f_{\mathbf{k},\sigma} \\ f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{bmatrix}. \quad (12.13)$$

Nous obtenons alors l'expression matricielle de l'hamiltonien $t - J$ de champ moyen

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MF} &= \sum_{\mathbf{k}} ' \sum_{\sigma} \begin{bmatrix} f_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger & f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \\ -(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m)^* - (\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x)^* & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{bmatrix} \\ &\quad \times \begin{bmatrix} f_{\mathbf{k},\sigma} \\ f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (12.14)$$

La sommation sur les impulsions $\sum_{\mathbf{k}} '$ est réduite à la zone de Brillouin magnétique, et nous avons défini les termes d'énergie

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{k}} &= -2t [\cos(k_x) + \cos(k_y)] - 4t' [\cos(k_x) \cdot \cos(k_y)] - 2t'' [\cos(2k_x) + \cos(2k_y)], \\ \xi_{\mathbf{k}} &= \epsilon_{\mathbf{k}^X} - (1 - \alpha) J \chi \cos(\phi/4) [\cos(k_x) + \cos(k_y)] - (\lambda_0 + \mu), \end{aligned} \quad (12.15)$$

$$\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}^X} + (1 - \alpha) J \chi \cos(\phi/4) [\cos(k_x) + \cos(k_y)] - (\lambda_0 + \mu). \quad (12.16)$$

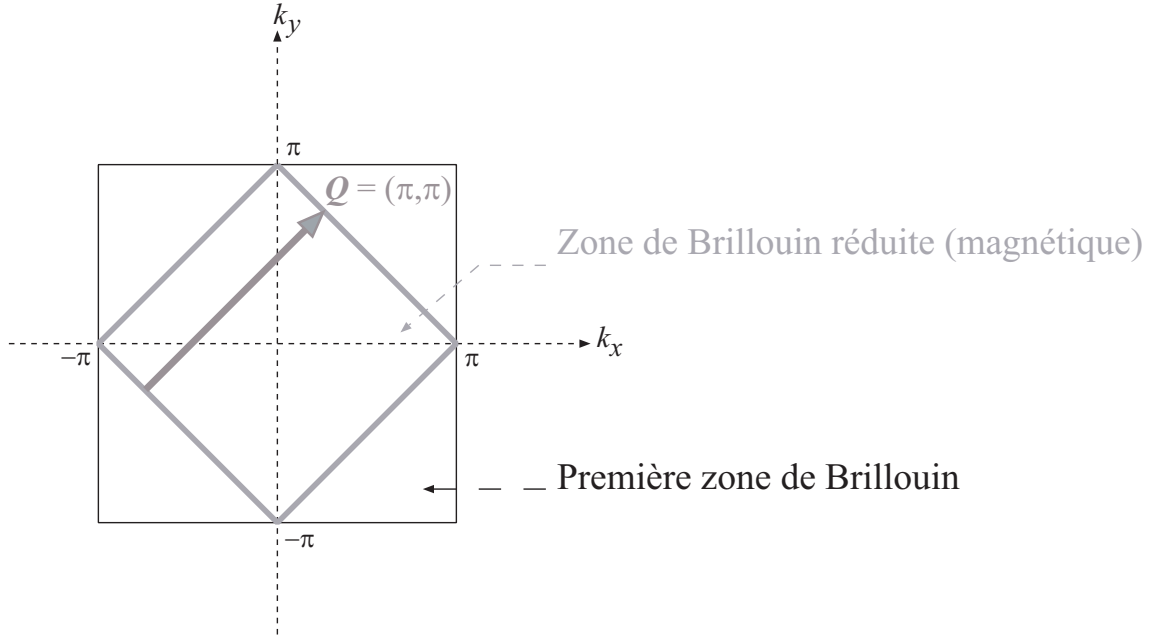


FIG. 12.2 – Première zone de Brillouin et zone de Brillouin réduite (magnétique) pour un réseau carré.

Nous définissons les paramètres d'ordre associés respectivement à l'aimantation et au flux par

$$\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m = 2\alpha J m \sigma, \quad \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x = i(1 - \alpha) J \chi \sin(\phi/4) [\cos(k_x) - \cos(k_y)], \quad (12.17)$$

pour $\sigma = \pm 1$.

12.2.3 Diagonalisation de l'hamiltonien de champ moyen

\mathcal{H}_{MF} peut être mis sous une forme diagonale

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \left[E_{\mathbf{k}}^{up} \gamma_{1\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \gamma_{1\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}}^{low} \gamma_{2\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \gamma_{2\mathbf{k},\sigma} \right],$$

grâce à une transformation unitaire de Bogoliubov-Valatin [166, 167]

$$\begin{bmatrix} f_{\mathbf{k},\sigma} \\ f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k},\sigma} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k},\sigma}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_{1\mathbf{k},\sigma} \\ \gamma_{2\mathbf{k},\sigma} \end{bmatrix}, \quad (12.18)$$

où $\gamma_{1\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}, \gamma_{1\mathbf{k},\sigma}$ ($\gamma_{2\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}, \gamma_{2\mathbf{k},\sigma}$) sont les opérateurs de création et annihilation de quasiparticules dans la bande de Hubbard supérieure (inférieure), respectivement (voir la Figure 12.3). Les valeurs propres d'énergie correspondantes sont

$$E_{\mathbf{k}}^{up} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{[\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}]^2 + 4(|\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m|^2 + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2)}, \quad (12.19)$$

$$E_{\mathbf{k}}^{low} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{[\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}]^2 + 4(|\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m|^2 + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2)}, \quad (12.20)$$

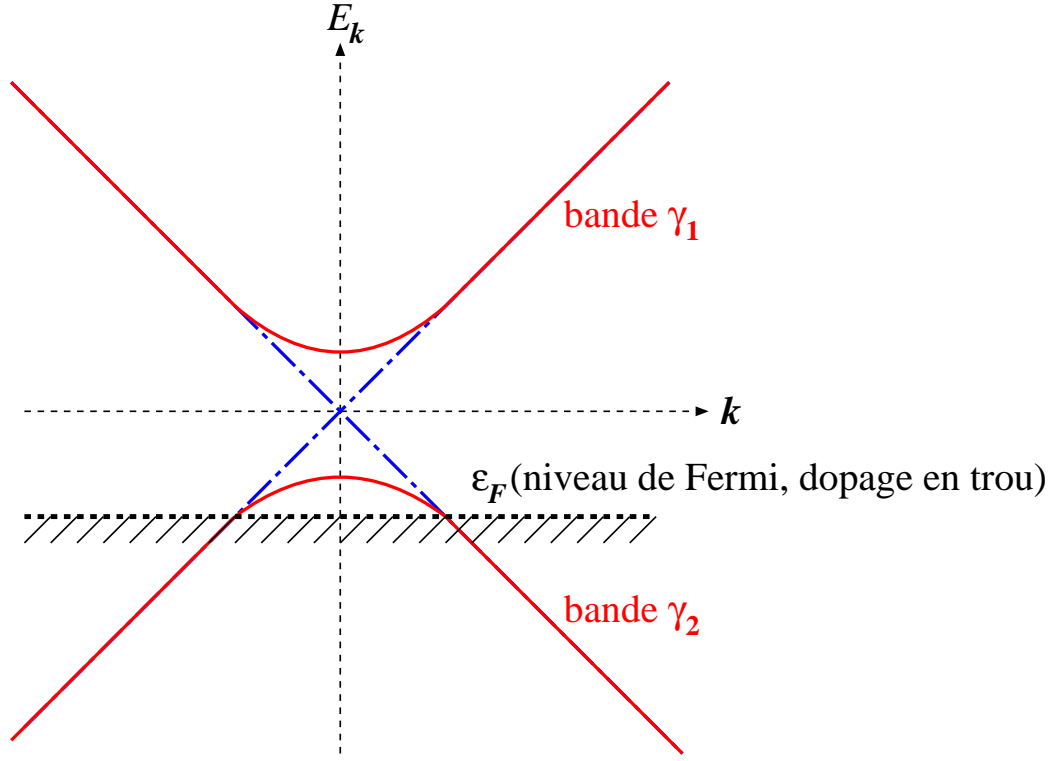


FIG. 12.3 – Bandes de Hubbard inférieure et supérieure correspondant aux valeurs propres $E_{\mathbf{k}}^{up}$ et $E_{\mathbf{k}}^{low}$ de \mathcal{H}_{MF} .

Les éléments de matrice $u_{\mathbf{k},\sigma}$ et $v_{\mathbf{k}}$ (coefficients de Bogoliubov) sont donnés par

$$\begin{aligned}
 u_{\mathbf{k},\sigma} &= \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \cdot e^{i\phi_{\mathbf{k},\sigma}}, \quad v_{\mathbf{k}} = \sin(\theta_{\mathbf{k}}), \\
 \cos(\theta_{\mathbf{k}}) &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})^2 + 4(|\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m|^2 + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2)}} \right)}, \\
 \sin(\theta_{\mathbf{k}}) &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{\sqrt{(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})^2 + 4(|\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m|^2 + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2)}} \right)}, \\
 \cos(\phi_{\mathbf{k},\sigma}) &= \frac{\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m}{\sqrt{|\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m|^2 + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2}}, \quad \sin(\phi_{\mathbf{k},\sigma}) = \frac{-i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x}{\sqrt{|\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m|^2 + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2}}.
 \end{aligned}$$

12.2.4 Apparition de l'anomalie de parité et fermions de Dirac

L'un des résultats les plus marquants de la théorie de Spin Bag [65] est que la supraconductivité se produit grâce à un appariement des trous situés dans de petites poches centrées

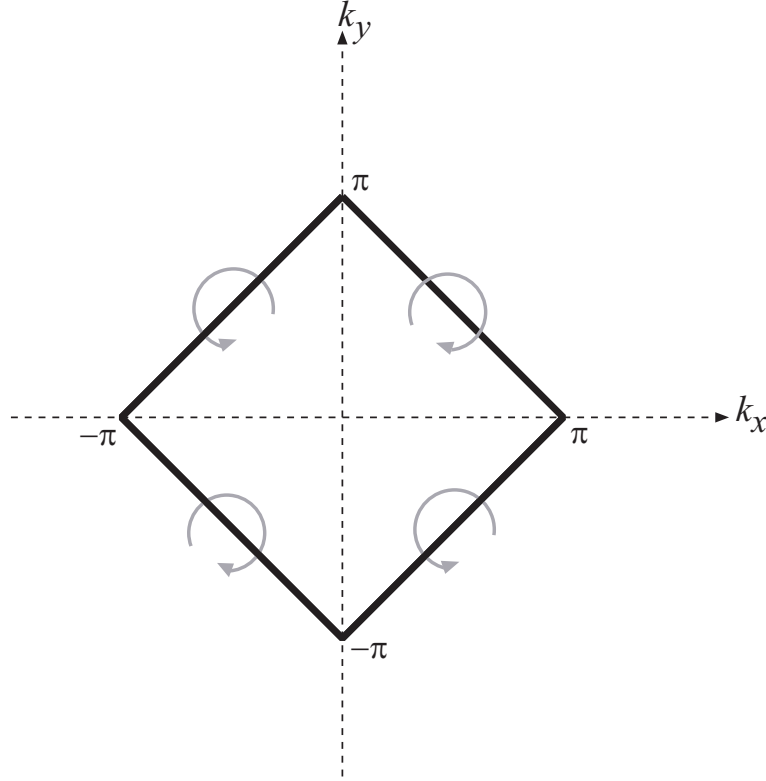


FIG. 12.4 – Schéma des deux types de fermions de Dirac, caractérisés par des sens de rotation opposés. Ces fermions de Dirac sont localisés sur les noeuds situés aux points $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$.

autour de $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$, comme schématisé sur la Figure 13.4. Afin de préciser cette idée nous reformulons l'hamiltonien de champ moyen (12.14)

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \left[f_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \ f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^{\dagger} \right] H_{MF}(\mathbf{k}, \sigma) \begin{bmatrix} f_{\mathbf{k},\sigma} \\ f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{bmatrix},$$

et linéarisons H_{MF} au voisinage de ces points.

Au voisinage du point $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ nous définissons p_x, p_y

$$k_x = \frac{\pi}{2} + p_x, \quad k_y = \frac{\pi}{2} + p_y.$$

La contribution H_{MF} à l'hamiltonien peut être linéarisée en \mathbf{p}

$$\begin{aligned} & H_{MF}(\mathbf{k} \rightarrow (\pi/2, \pi/2), \sigma) \\ \simeq & \begin{bmatrix} [2t + (1 - \alpha)J\chi\cos(\phi/4)](p_x + p_y) + 4t'' & i(1 - \alpha)J\chi\sin(\phi/4)(p_x - p_y) - 2\alpha Jm\sigma \\ -i(1 - \alpha)J\chi\sin(\phi/4)(p_x - p_y) - 2\alpha Jm\sigma & -[2t + (1 - \alpha)J\chi\cos(\phi/4)](p_x + p_y) + 4t'' \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (12.21)$$

tandis qu'au voisinage de $(\pi/2, -\pi/2)$ avec

$$k_x = \frac{\pi}{2} + p_x, \quad k_y = -\frac{\pi}{2} + p_y$$

nous trouvons

$$H_{MF}(\mathbf{k} \rightarrow (\pi/2, -\pi/2), \sigma) \simeq \begin{bmatrix} [2t + (1 - \alpha)J\chi\cos(\phi/4)](p_x - p_y) + 4t'' & i(1 - \alpha)J\chi\sin(\phi/4)(p_x + p_y) - 2\alpha Jm\sigma \\ -i(1 - \alpha)J\chi\sin(\phi/4)(p_x + p_y) - 2\alpha Jm\sigma & -[2t + (1 - \alpha)J\chi\cos(\phi/4)](p_x - p_y) + 4t'' \end{bmatrix}. \quad (12.22)$$

En comparant les expressions linéarisées (12.21) et (12.22) nous remarquons que $(p_x + p_y)$ et $(p_x - p_y)$ sont échangés. Cela signifie que \mathcal{H}_{MF} décrit deux types de fermions de Dirac situés aux points $(\pi/2, \pi/2)$, $(-\pi/2, -\pi/2)$ et $(\pi/2, -\pi/2)$, $(-\pi/2, \pi/2)$, respectivement. Ces deux types de fermions de Dirac sont caractérisés par des sens de rotation opposés. En effet la transformation $(x \rightleftharpoons y)$ inverse le sens de rotation, comme le montre la Figure 12.4. Le changement du sens de rotation est donné par le facteur de phase $e^{i\phi_{\mathbf{k},\sigma}}$, apparaissant dans le coefficient de Bogoliubov $u_{\mathbf{k},\sigma}$. Ce facteur de phase est une conséquence de la présence de la phase de flux. Il jouera un rôle important lorsque nous définirons un potentiel d'appariement de type BCS au cours du chapitre 14.

Ce changement du sens de rotation constitue une analogie parfaite avec l'anomalie de parité en dimension $D = (2+1)$ [168], bien connue en théorie quantique des champs. Sans entrer dans les détails, cet effet tire son origine de la forme particulière de l'équation de Dirac [169] décrivant un fermion se déplaçant dans un champ de jauge externe [170, 171, 172]. Bien que de tels phénomènes aient été plus particulièrement étudiés dans le domaine de la physique des particules, il est à noter que des analogies avec la physique de la matière condensée ont déjà été soulignées [173, 174, 175].

12.2.5 Fonctions de Green libres

Nous adoptons à nouveau un formalisme d'intégrale de chemin, et pouvons maintenant écrire l'action dans l'approximation de point-selle

$$S_0 = - \sum_{\mathbf{k}} ' \sum_{\sigma} \sum_{i\omega_n} [\bar{\Psi}_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega_n) \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}(i\omega_n)] \tilde{\mathcal{G}}_0^{-1}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \times \begin{bmatrix} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega_n) \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}(i\omega_n) \end{bmatrix}, \quad (12.23)$$

où $i\omega_n$ sont les fréquences de Matsubara fermioniques et $\tilde{\mathcal{G}}_0^{-1}$ est l'inverse de la fonction de Green libre en représentation matricielle

$$\tilde{\mathcal{G}}_0^{-1}(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) = \begin{bmatrix} i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \\ (\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m)^* + (\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x)^* & i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{bmatrix},$$

de sorte que

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) = & \frac{1}{\omega_n^2 + i\omega_n(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - \xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + |\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x|^2} \\ & \times \begin{bmatrix} -(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) & \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \\ \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x & -(i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}}) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (12.24)$$

Chapitre 13

Solution de point-selle et équations de champ moyen

Dans ce chapitre, nous établissons les équations de champ moyen permettant de déterminer les valeurs des champs au point-selle. Nous présentons ensuite les résultats numériques obtenus.

13.1 Développement de l'action au premier ordre des fluctuations

Considérons les fluctuations des différents champs introduits précédemment autour de leur valeur de champ moyen

$$\begin{aligned} b_i &= b_0(1 + \delta b_i) , \quad i\lambda_i = \lambda_0 + i\delta\lambda_i, \\ m_i^{s_m} &= (m_i^{s_m})_0 + \delta m_i^{s_m} , \quad s_m = x, y, z, \\ \chi_{i,i+s_\chi} = \chi_i^{s_\chi} &= (\chi_i^{s_\chi})_0 + \delta\chi_i^{s_\chi} , \quad \delta\chi_i^{s_\chi} = \delta' \chi_i^{s_\chi} + i\delta'' \chi_i^{s_\chi} , \quad s_\chi = x, y. \end{aligned}$$

En ne retenant que les termes linéaires en δb , $\delta\lambda$, δm et $\delta\chi$, l'action au premier ordre des fluctuations peut s'écrire de la façon suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_1 = \int_0^\beta d\tau \left\{ \right. & - \sum_i (b_0)^2 (i\delta\lambda_i + 2\lambda_0 \cdot \delta b_i) - \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} [(-1)^i m \cdot \delta m_j^z + (-1)^j m \cdot \delta m_i^z] \\ & + \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} [(\chi_{ij})_0 \cdot \delta\chi_{ij}^* + (\chi_{ij})_0^* \cdot \delta\chi_{ij}] - \sum_{i,\sigma} [i\delta\lambda_i \cdot \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{i,\sigma}] \\ & - \left(\sum_{\langle i,j \rangle} t + \sum_{\langle i,j \rangle'} t' + \sum_{\langle i,j \rangle''} t'' \right) \sum_\sigma (b_0)^2 (\delta b_i + \delta b_j) [\bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{j,\sigma} + \bar{\Psi}_{j,\sigma} \Psi_{i,\sigma}] \\ & + \frac{\alpha}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{s_m=x,y,z} [\delta m_j^{s_m} (\bar{\Psi}_{i,\sigma} \tilde{\sigma}_{\sigma,\sigma'}^{s_m} \Psi_{i,\sigma'}) + \delta m_i^{s_m} (\bar{\Psi}_{j,\sigma} \tilde{\sigma}_{\sigma,\sigma'}^{s_m} \Psi_{j,\sigma'})] \\ & \left. - \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_\sigma [\delta\chi_{i,j} \cdot \bar{\Psi}_{j,\sigma} \Psi_{i,\sigma} + \delta\chi_{i,j}^* \cdot \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{j,\sigma}] \right\}. \end{aligned} \quad (13.1)$$

Pour plus de clarté nous décomposons \mathcal{S}_1 en deux parties

$$\mathcal{S}_1 = \mathcal{S}_{1,B} + \mathcal{S}_{1,F}. \quad (13.2)$$

13.1.1 Contribution bosonique

$\mathcal{S}_{1,B}$ ne contient que les champs auxiliaires bosoniques et pas de variables de Grassmann. Elle correspond aux trois premiers termes de l'action totale au premier ordre des fluctuations (13.1)

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{1,B} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \right. & - \sum_i (b_0)^2 (i\delta\lambda_i + 2\lambda_0 \cdot \delta b_i) - \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} [(-1)^i m \cdot \delta m_j^z + (-1)^j m \cdot \delta m_i^z] \\ & \left. + \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} [(\chi_{ij})_0 \cdot \delta\chi_{ij}^* + (\chi_{ij})_0^* \cdot \delta\chi_{ij}] \right\}. \end{aligned} \quad (13.3)$$

Dans l'espace des impulsions et des fréquences de Matsubara nous avons

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{1,B} = & \left[- (b_0)^2 \cdot i\delta\lambda_{\mathbf{q}=0}(i\omega_\ell = 0) - 2(b_0)^2 \lambda_0 \cdot \delta b_{\mathbf{q}=0}(i\omega_\ell = 0) \right. \\ & \left. + 4(\alpha J) m \cdot \delta m_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}}^z(i\omega_\ell = 0) \right] \sqrt{\beta N_s} \\ & + (1-\alpha) J \sum_{\mathbf{q}, i\omega_\ell} [\chi_{-\mathbf{q}}^y(-i\omega_\ell) \cdot \delta\chi_{\mathbf{q}}^x(i\omega_\ell) + \chi_{-\mathbf{q}}^x(-i\omega_\ell) \cdot \delta\chi_{\mathbf{q}}^y(i\omega_\ell)], \end{aligned} \quad (13.4)$$

où $i\omega_\ell$ correspond aux fréquences de Matsubara bosoniques et $(\sum_{\mathbf{q}})$ désigne la sommation étendue à la première zone de Brillouin.

13.1.2 Contribution fermionique

Nous examinons maintenant la partie fermionique. $\mathcal{S}_{1,F}$ regroupe tous les termes de l'action totale au premier ordre des fluctuations (13.1) contenant des variables de Grassmann $\bar{\Psi}, \Psi$, à savoir les quatres derniers

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{1,F} = \int_0^\beta d\tau \left\{ \right. & - \sum_{i,\sigma} [i\delta\lambda_i \cdot \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{i,\sigma}] \\ & - \left(\sum_{\langle i,j \rangle} t + \sum_{\langle i,j \rangle'} t' + \sum_{\langle i,j \rangle''} t'' \right) \sum_{\sigma} (b_0)^2 (\delta b_i + \delta b_j) [\bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{j,\sigma} + \bar{\Psi}_{j,\sigma} \Psi_{i,\sigma}] \\ & + \frac{\alpha}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{s_m=x,y,z} [\delta m_j^{s_m} (\bar{\Psi}_{i,\sigma} \tilde{\sigma}_{\sigma,\sigma'}^{s_m} \Psi_{i,\sigma'}) + \delta m_i^{s_m} (\bar{\Psi}_{j,\sigma} \tilde{\sigma}_{\sigma,\sigma'}^{s_m} \Psi_{j,\sigma'})] \\ & \left. - \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} [\delta\chi_{i,j} \cdot \bar{\Psi}_{j,\sigma} \Psi_{i,\sigma} + \delta\chi_{i,j}^* \cdot \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{j,\sigma}] \right\}. \end{aligned} \quad (13.5)$$

Nous décomposons $\mathcal{S}_{1,F}$ en quatre contributions

$$\mathcal{S}_{1,F} = \mathcal{S}_1^\lambda + \mathcal{S}_1^b + \mathcal{S}_1^m + \mathcal{S}_1^\chi. \quad (13.6)$$

Dans l'espace des moments et des fréquences de Matsubara nous obtenons

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_1^\lambda = & \frac{1}{\sqrt{\beta N_s}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} ' \sum_{\sigma', \sigma} \sum_{i\omega_m, i\omega_n} \sigma_{\sigma', \sigma}^0 \\
& \times [\bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}(i\omega_m) \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}, \sigma'}(i\omega_m)] \\
& \times \begin{bmatrix} -i\delta\lambda_{\mathbf{q}}(i\omega_m - i\omega_n) & -i\delta\lambda_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_m - i\omega_n) \\ -i\delta\lambda_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_m - i\omega_n) & -i\delta\lambda_{\mathbf{q}}(i\omega_m - i\omega_n) \end{bmatrix} \\
& \times \begin{bmatrix} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}(i\omega_n) \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}(i\omega_n) \end{bmatrix}, \tag{13.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_1^b = & \frac{1}{\sqrt{\beta N_s}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} ' \sum_{\sigma', \sigma} \sum_{i\omega_m, i\omega_n} \sigma_{\sigma', \sigma}^0 \\
& \times [\bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}(i\omega_m) \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}, \sigma'}(i\omega_m)] \\
& \times \begin{bmatrix} -2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\delta b_{\mathbf{q}}(i\omega_m - i\omega_n) \\ -2(b_0)^2(-\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_m - i\omega_n) \\ -2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_m - i\omega_n) \\ -2(b_0)^2(-\tilde{t}_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}' + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\delta b_{\mathbf{q}}(i\omega_m - i\omega_n) \end{bmatrix} \\
& \times \begin{bmatrix} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}(i\omega_n) \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}(i\omega_n) \end{bmatrix}, \tag{13.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_1^m = & \frac{1}{\sqrt{\beta N_s}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} ' \sum_{\sigma', \sigma} \sum_{i\omega_m, i\omega_n} \sum_{s_m=x,y,z} \sigma_{\sigma', \sigma}^{s_m} \\
& \times [\bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}(i\omega_m) \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}, \sigma'}(i\omega_m)] \\
& \times \begin{bmatrix} \alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}} \delta m_{\mathbf{q}}^{s_m}(i\omega_m - i\omega_n) & -\alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}} \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_m}(i\omega_m - i\omega_n) \\ -\alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}} \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_m}(i\omega_m - i\omega_n) & \alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}} \delta m_{\mathbf{q}}^{s_m}(i\omega_m - i\omega_n) \end{bmatrix} \\
& \times \begin{bmatrix} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}(i\omega_n) \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}(i\omega_n) \end{bmatrix}, \tag{13.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_1^\chi = & \frac{1}{\sqrt{\beta N_s}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} ' \sum_{\sigma', \sigma} \sum_{i\omega_m, i\omega_n} \sum_{s_x=x, y} \sigma_{\sigma', \sigma}^0 \\
& \times \left[\bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}(i\omega_m) \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}, \sigma'}(i\omega_m) \right] \\
& \times \left[\begin{array}{l} (1-\alpha)J \left[-\delta' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \cos(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right. \\ \left. -\delta'' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \sin(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right] \\ (1-\alpha)J \left[-\delta' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \sin(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right. \\ \left. +\delta'' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \cos(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right] \\ (1-\alpha)J \left[+\delta' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \sin(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right. \\ \left. -\delta'' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \cos(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right] \\ (1-\alpha)J \left[+\delta' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \cos(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right. \\ \left. +\delta'' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \sin(k_{s_x} + q_{s_x}/2) \right] \end{array} \right] \\
& \times \left[\begin{array}{l} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}(i\omega_n) \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}(i\omega_n) \end{array} \right]. \tag{13.10}
\end{aligned}$$

Dans les équations précédentes $\sigma_{\sigma', \sigma}^0$ est un élément de la matrice identité (2×2) , $i\omega_m$ et $i\omega_n$ sont les fréquences de Matsubara fermioniques et nous définissons $\tilde{t}_{\mathbf{k}}$, $\tilde{t}'_{\mathbf{k}}$, $\tilde{t}''_{\mathbf{k}}$ et $\tilde{J}_{\mathbf{q}}$ par les égalités

$$\tilde{t}_{\mathbf{k}} = t [\cos(k_x) + \cos(k_y)], \tag{13.11}$$

$$\tilde{t}'_{\mathbf{k}} = t' [2 \cdot \cos(k_x) \cdot \cos(k_y)], \tag{13.12}$$

$$\tilde{t}''_{\mathbf{k}} = t'' [\cos(2k_x) + \cos(2k_y)], \tag{13.13}$$

$$\tilde{J}_{\mathbf{q}} = J [\cos(q_x) + \cos(q_y)]. \tag{13.14}$$

En introduisant les matrices de Pauli, nous pouvons regrouper les différentes contributions (13.7) - (13.10), et obtenons ainsi la partie fermionique $\mathcal{S}_{1,F}$ de l'action au premier ordre des fluctuations

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_{1,F} = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} ' \sum_{\sigma', \sigma} \sum_{i\omega_m, i\omega_n} \left[\bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}(i\omega_m) \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}, \sigma'}(i\omega_m) \right] \\
& \times \tilde{\mathcal{V}}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_m; \mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \left[\begin{array}{l} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}(i\omega_n) \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}(i\omega_n) \end{array} \right], \tag{13.15}
\end{aligned}$$

où $\tilde{\mathcal{V}}_1$ est la matrice d'interaction définie de la façon suivante

$$\begin{aligned}
& \sqrt{\beta N_s} \tilde{\mathcal{V}}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_m; \mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \\
= & \sum_{s_x=x,y} \left\{ \begin{aligned} & [-(1-\alpha)J\cos(k_{s_x} + q_{s_x}/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^z] \delta' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \\ & + [-(1-\alpha)J\sin(k_{s_x} + q_{s_x}/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 i\tilde{\sigma}^y] \delta' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \\ & + [-(1-\alpha)J\sin(k_{s_x} + q_{s_x}/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^z] \delta'' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \\ & + [(1-\alpha)J\cos(k_{s_x} + q_{s_x}/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 i\tilde{\sigma}^y] \delta'' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_m - i\omega_n) \end{aligned} \right\} \\
& + \sum_{s_m=x,y,z} \left\{ \begin{aligned} & [\alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^{s_m}\tilde{\sigma}^0] \delta m_{\mathbf{q}}^{s_m}(i\omega_m - i\omega_n) + [-\alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^{s_m}\tilde{\sigma}^x] \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_m}(i\omega_m - i\omega_n) \end{aligned} \right\} \\
& + \left\{ \begin{aligned} & [-\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^0] i\delta\lambda_{\mathbf{q}}(i\omega_m - i\omega_n) + [-\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^x] i\delta\lambda_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_m - i\omega_n) \end{aligned} \right\} \\
& + \left\{ \begin{aligned} & [-2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^0 \\ & - 2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^z] \delta b_{\mathbf{q}}(i\omega_m - i\omega_n) \\ & + [-2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\sigma_{\sigma',\sigma}^0\tilde{\sigma}^x \\ & + 2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\sigma_{\sigma',\sigma}^0 i\tilde{\sigma}^y] \delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_m - i\omega_n) \end{aligned} \right\}. \tag{13.16}
\end{aligned}$$

13.2 Dérivation des équations de champ moyen

En effectuant l'intégration sur les variables de Grassmann dans l'action \mathcal{S}_1 (13.1), on obtient l'expression de l'énergie libre au premier ordre des fluctuations. Les équations de point-selle sont obtenues en annulant la dérivée première de l'énergie libre par rapport aux fluctuations des champs bosoniques [176]. Il en résulte le système d'équations de point-selle couplées

$$1 - \frac{4}{N_s} \alpha J \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{1}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \right\} = 0, \tag{13.17}$$

$$\begin{aligned}
\chi - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{[\cos(k_x) + \cos(k_y)](\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}})\cos(\phi/4)}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \right. \\
\left. - \frac{2i[\cos(k_x) - \cos(k_y)]\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \sin(\phi/4)}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \right\} = 0, \tag{13.18}
\end{aligned}$$

$$\chi \cos(\phi/4) - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{[\cos(k_x) + \cos(k_y)](\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \right\} = 0, \tag{13.19}$$

$$\lambda_0 + \frac{4}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \tilde{t}_{\mathbf{k}} \frac{(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} + (\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'') \frac{(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}} - 2E_{\mathbf{k}}^{low})}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \right\} = 0, \tag{13.20}$$

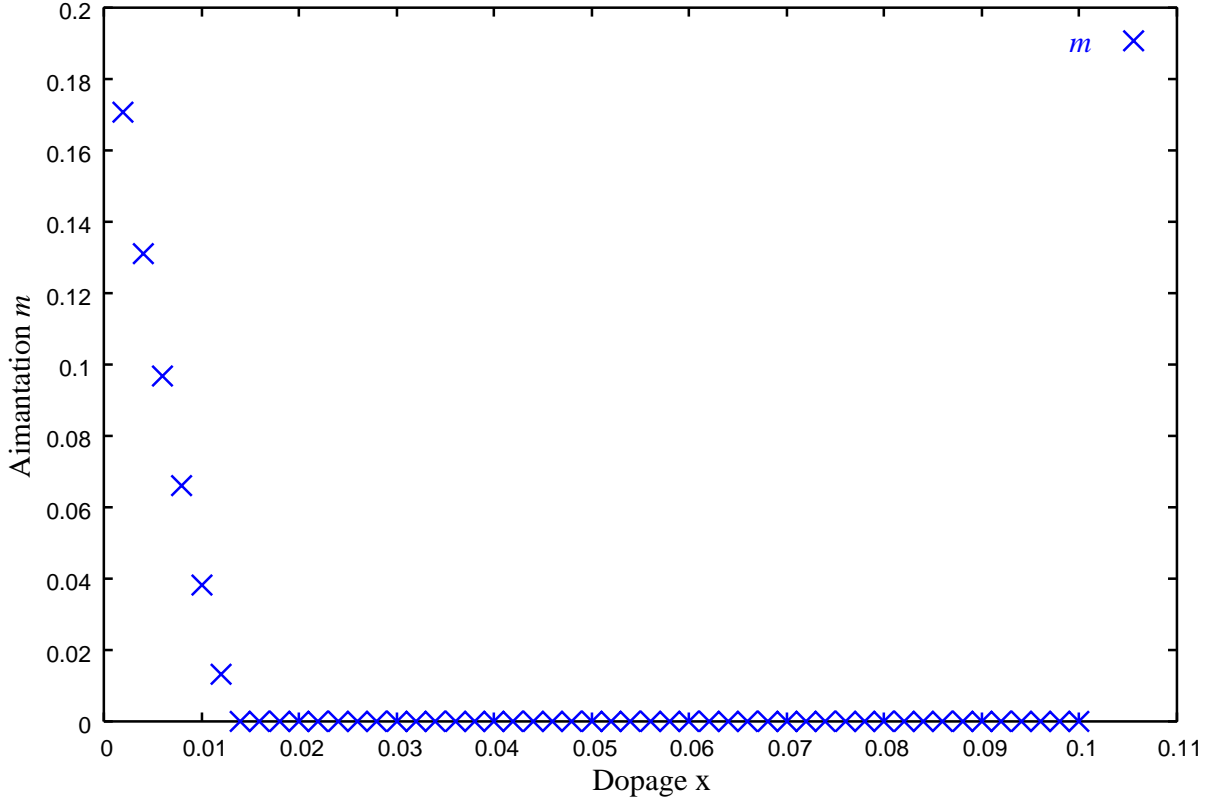


FIG. 13.1 – Dépendance du module de l'aimantation alternée m obtenue au point-selle en fonction du dopage $x = 1 - n_f$.

où les quantités $\xi_{\mathbf{k}}$, $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$, $\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x$, $E_{\mathbf{k}}^{up}$, $E_{\mathbf{k}}^{low}$, $\tilde{t}_{\mathbf{k}}$, $\tilde{t}'_{\mathbf{k}}$ et $\tilde{t}''_{\mathbf{k}}$ sont données par les équations (12.15), (12.16), (12.17), (12.19), (12.20), (13.11), (13.12) et (13.13), respectivement.

Le nombre d'électrons est ajusté par le potentiel chimique μ . A très basse température la bande de Hubbard supérieure est vide et

$$\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp[\beta E_{\mathbf{k}}^{low}] + 1} = 1 - x, \quad (13.21)$$

où $\sum_{\mathbf{k}}$ correspond à la sommation sur la première zone de Brillouin.

13.3 Solution de champ moyen

Nous avons résolu numériquement le système d'équations de champ moyen couplées en utilisant un algorithme récursif standard. La zone de Brillouin magnétique a été discrétisée en deux millions de points, ce qui assure une précision supérieure à 10^{-5} . A demi-remplissage ($x = 0$), la phase de flux est caractérisée par un flux $\phi = \pi$, et nous avons obtenu la valeur suivante pour le paramètre variationnel α

$$\alpha = 0.301127, \quad (13.22)$$

respectant la relation obtenue par Hsu [143]: $m = 0.5\chi$.

En dehors du demi-remplissage, cette relation entre m et χ n'est plus respectée. Par contre la valeur de α (13.22) est supposée constante quelle que soit la valeur du dopage, ce qui est autorisé par les équations de champ moyen. Cela revient à considérer que le poids attribué à chacun des deux découplages du terme d'interaction est maintenu constant en fonction du dopage.

Nous reportons sur les Figures 13.1, 13.2 et 13.3 la dépendance des paramètres de champs moyen en fonction de l'écart x au remplissage moitié. On remarque que l'état de Néel disparaît très rapidement avec le dopage, une valeur inférieure à 1,5% est suffisante pour annuler le module de l'aimantation alternée (cf. Figure 13.1). Cette disparition brutale de l'antiferromagnétisme est en bon accord avec le diagramme de phase expérimental (voir Figure 11 de l'introduction générale), mais marque une rupture avec plusieurs études antérieures du modèle $t - J$ pour lesquelles un dopage de l'ordre de 10 - 15% était nécessaire [177]. L'existence supposée d'un état de Néel sur une si large gamme de dopage a souvent conduit ces théories à prédire la coexistence entre les états supraconducteur et antiferromagnétique, coexistence qui n'a jamais été observée expérimentalement. Il apparaît sur la Figure 13.2 que le flux ϕ décroît relativement linéairement à partir de π ($x = 0$) pour atteindre une valeur voisine de 2 lorsque le dopage est de 10%; ce résultat est très similaire à celui obtenu par Hsu *et al.* [178].

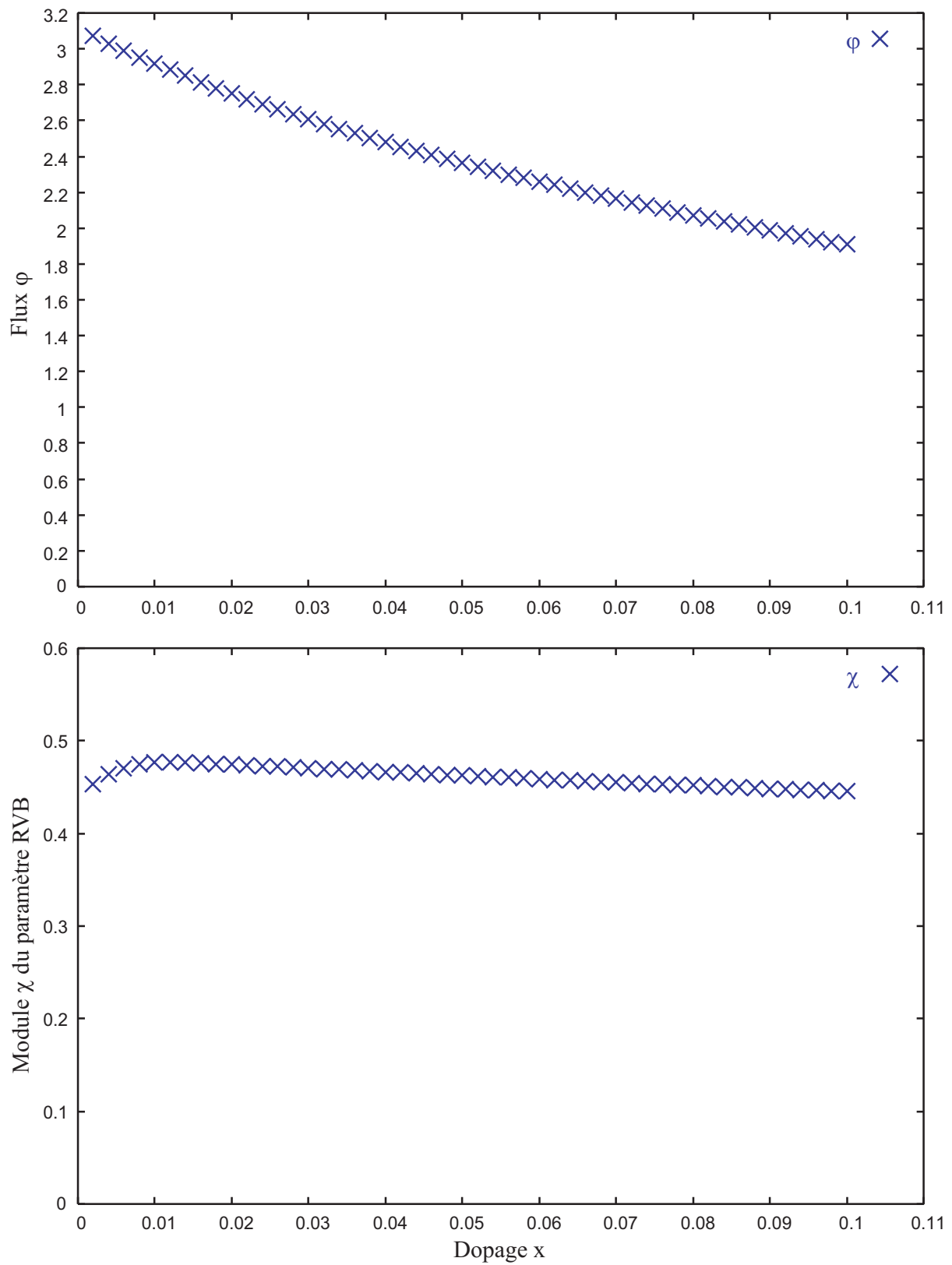


FIG. 13.2 – Dépendance des paramètres de flux ϕ (angle) et χ (module) obtenue au point-selle en fonction du dopage $x = 1 - n_f$.

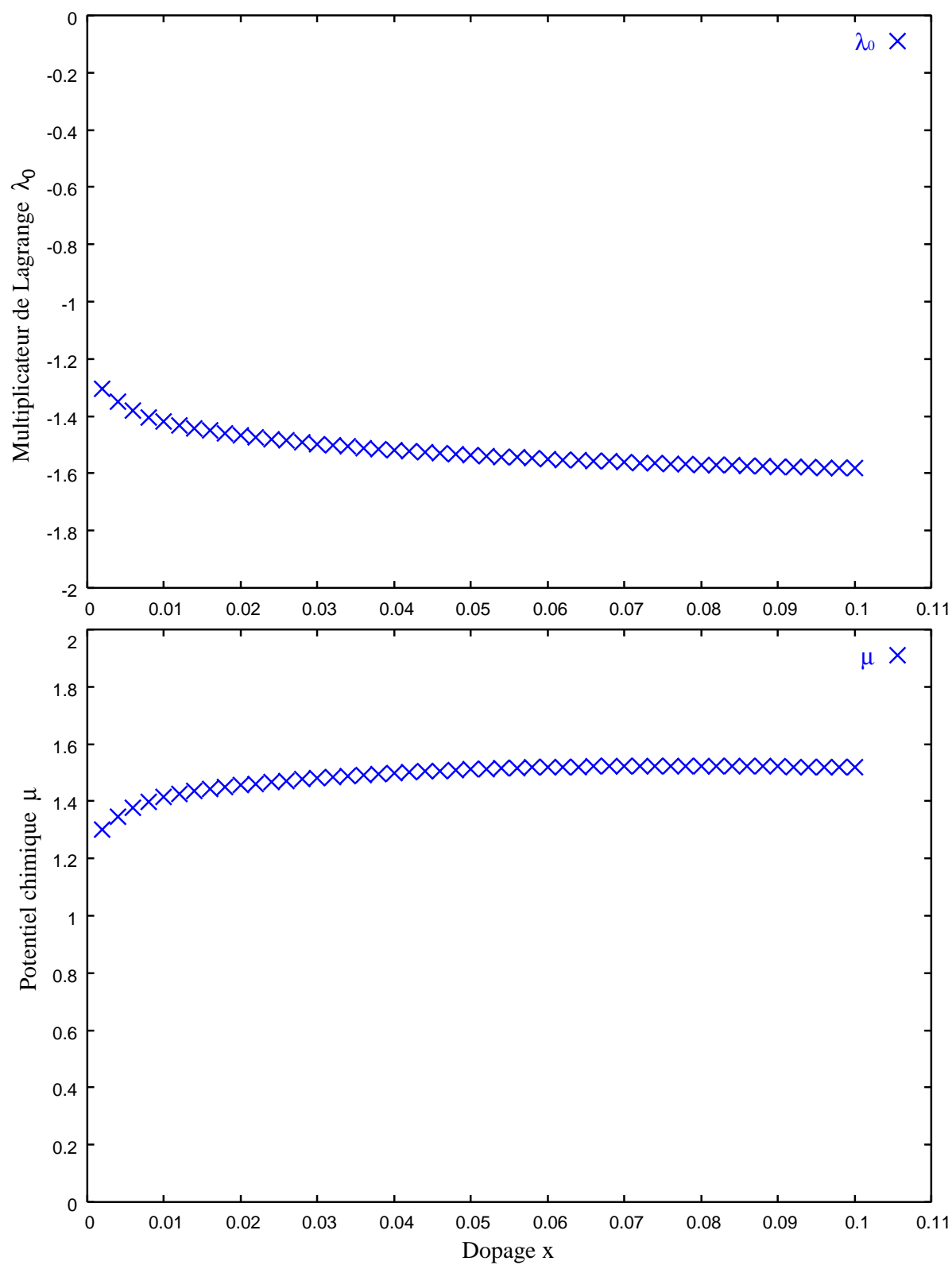


FIG. 13.3 – Dépendance du multiplicateur de Lagrange λ_0 et du potentiel chimique μ obtenue au point-selle en fonction du dopage $x = 1 - n_f$.

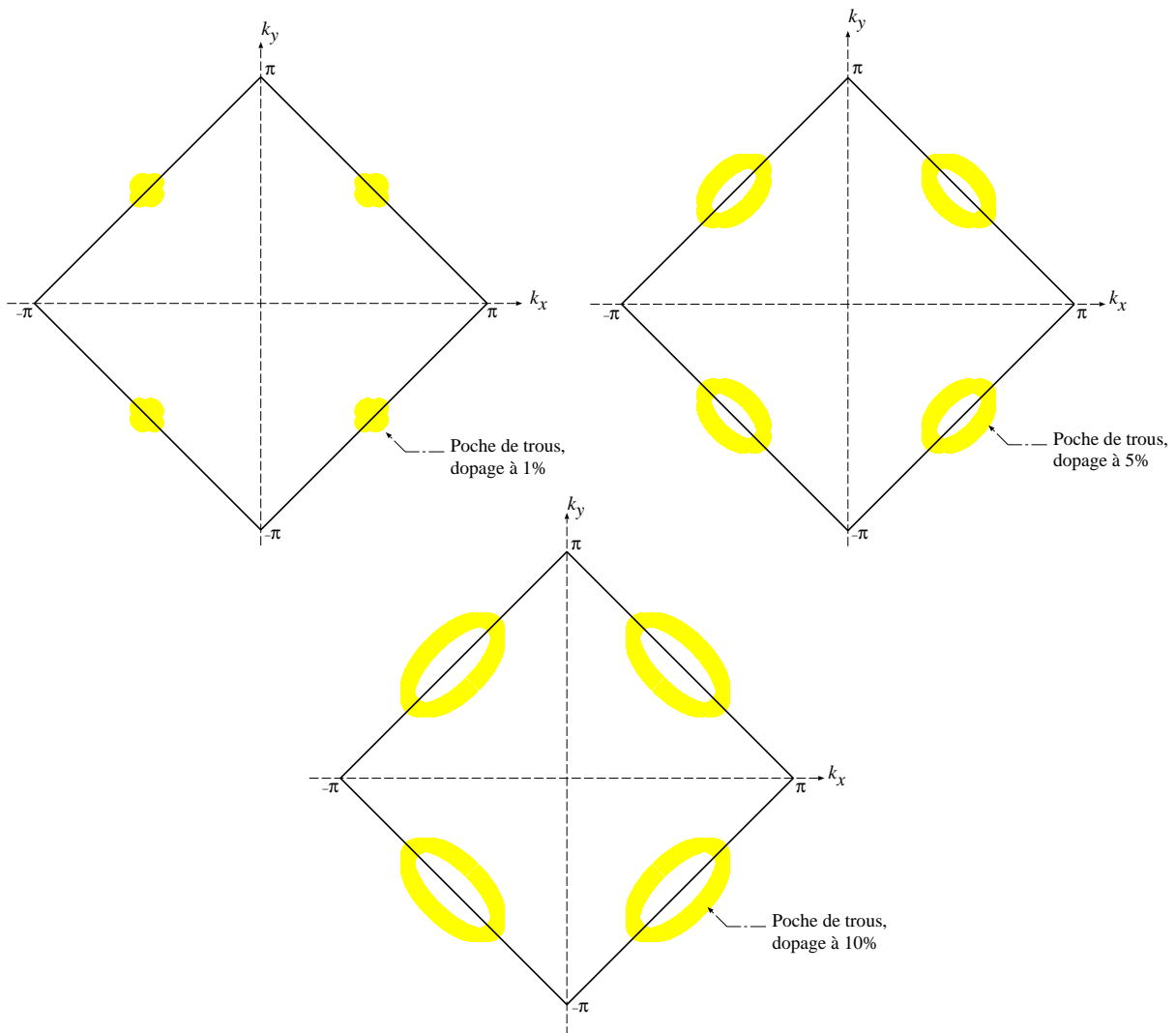


FIG. 13.4 – Représentation de la surface de Fermi pour trois valeurs différentes du dopage: $x = 0.01, 0.05, 0.1$.

Nous représentons également la surface de Fermi évaluée pour trois valeurs différentes du dopage ($x = 0.01, 0.05, 0.1$) sur la Figure 13.4. La surface de Fermi est formée d'arcs délimitant les poches de trous centrées autour des quatre nœuds situés aux points $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$.

Chapitre 14

Fluctuations gaussiennes et appariement BCS

Dans ce chapitre, nous examinons l'effet des fluctuations gaussiennes des champs introduits autour de la solution de point-selle. Les fluctuations gaussiennes correspondent à une approximation de type RPA (approximation de la phase aléatoire) au deuxième ordre en théorie de perturbation. Nous définissons puis calculons un potentiel d'appariement “à la *B.C.S.*” [53, 54] entre quasiparticules, médié par ces fluctuations. Le comportement de ce potentiel d'appariement nous permet d'examiner les effets résultant de la coexistence de l'antiferromagnétisme et d'une phase de flux dans un état RVB sur la supraconductivité des cuprates sous-dopés.

14.1 Action au deuxième ordre des fluctuations et fonctions de corrélation

Nous allons d'abord établir l'expression de l'action au second ordre des fluctuations des champs bosoniques introduits, autour de la solution de point-selle du modèle $t - J$. Par analogie avec les méthodes diagrammatiques [131, 132], un tel traitement est équivalent à une approche de type RPA prenant en compte les boucles associées aux fluctuations des champs bosoniques [176]. Ce traitement nous permet de calculer les différentes fonctions de corrélation (ou susceptibilités, les deux étant reliées par le théorème de fluctuation-dissipation [179]) entre ces champs. En utilisant ces fonctions de corrélation, nous pouvons définir un potentiel d'appariement entre quasiparticules de type BCS.

Après intégration sur les variables de Grassmann, on dérive l'action au second ordre des

fluctuations δb , $\delta\lambda$, δm et $\delta\chi$

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_2 = & \int_0^\beta d\tau \left\{ - \sum_i (b_0)^2 [2i\delta\lambda_i \cdot \delta b_i + \lambda_0(\delta b_i)^2] \right. \\
& - \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s_m=x,y,z} [\delta m_i^{s_m} \cdot \delta m_j^{s_m}] + \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} [\delta\chi_{ij} \cdot \delta\chi_{ij}^*] \\
& \left. - \left(\sum_{\langle i,j \rangle} t + \sum_{\langle i,j \rangle'} t' + \sum_{\langle i,j \rangle''} t'' \right) \sum_{\sigma} (b_0)^2 \delta b_i \cdot \delta b_j [\langle \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{j,\sigma} \rangle + \langle \bar{\Psi}_{j,\sigma} \Psi_{i,\sigma} \rangle] \right\} \\
& + \frac{1}{2} \text{Tr} [\tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1 \tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1] . \tag{14.1}
\end{aligned}$$

Nous décomposons \mathcal{S}_2 (14.1) en deux parties

$$\mathcal{S}_2 = \mathcal{S}_{2,B} + \mathcal{S}_{2,F}. \tag{14.2}$$

14.1.1 Expression de la contribution bosonique

$\mathcal{S}_{2,B}$ provient des champs auxiliaires bosoniques. Elle inclut l'ensemble des termes du membre de droite de l'équation (14.1) à l'exception du dernier

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_{2,B} = & \int_0^\beta d\tau \left\{ - \sum_i (b_0)^2 [2i\delta\lambda_i \cdot \delta b_i + \lambda_0(\delta b_i)^2] \right. \\
& - \left(\sum_{\langle i,j \rangle} t + \sum_{\langle i,j \rangle'} t' + \sum_{\langle i,j \rangle''} t'' \right) \sum_{\sigma} (b_0)^2 \delta b_i \cdot \delta b_j [\langle \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{j,\sigma} \rangle + \langle \bar{\Psi}_{j,\sigma} \Psi_{i,\sigma} \rangle] \\
& \left. - \alpha J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s_m=x,y,z} [\delta m_i^{s_m} \cdot \delta m_j^{s_m}] + \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\langle i,j \rangle} [\delta\chi_{ij} \cdot \delta\chi_{ij}^*] \right\} . \tag{14.3}
\end{aligned}$$

Lorsque les sommations sont effectuées dans l'espace réciproque $(\mathbf{q}, i\omega_\ell)$ nous trouvons

$$\begin{aligned}
& \mathcal{S}_{2,B} \tag{14.4} \\
= & - (b_0)^2 \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{i\omega_\ell} \left\{ 2i [\delta\lambda_{\mathbf{q}}(i\omega_\ell) \cdot \delta b_{-\mathbf{q}}(-i\omega_\ell) + \delta\lambda_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_\ell) \cdot \delta b_{-\mathbf{q}-\mathbf{Q}}(-i\omega_\ell)] \right. \\
& \quad \left. + \lambda_0 [\delta b_{\mathbf{q}}(i\omega_\ell) \cdot \delta b_{-\mathbf{q}}(-i\omega_\ell) + \delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_\ell) \cdot \delta b_{-\mathbf{q}-\mathbf{Q}}(-i\omega_\ell)] \right\} \\
& - \alpha \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{i\omega_\ell} \tilde{J}_{\mathbf{q}} \sum_{s_m=x,y,z} [\delta m_{\mathbf{q}}^{s_m}(i\omega_\ell) \cdot \delta m_{-\mathbf{q}}^{s_m}(-i\omega_\ell) - \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_m}(i\omega_\ell) \cdot \delta m_{-\mathbf{q}-\mathbf{Q}}^{s_m}(-i\omega_\ell)] \\
& + \frac{(1-\alpha)}{2} J \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{i\omega_\ell} \sum_{s_x=x,y} [\delta' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_\ell) \cdot \delta' \chi_{-\mathbf{q}}^{s_x}(-i\omega_\ell) + \delta'' \chi_{\mathbf{q}}^{s_x}(i\omega_\ell) \cdot \delta'' \chi_{-\mathbf{q}}^{s_x}(-i\omega_\ell) \\
& \quad + \delta' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_\ell) \cdot \delta' \chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{Q}}^{s_x}(-i\omega_\ell) \\
& \quad + \delta'' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^{s_x}(i\omega_\ell) \cdot \delta'' \chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{Q}}^{s_x}(-i\omega_\ell)] \\
& - 4(b_0)^2 \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{i\omega_\ell} \left[\left\{ t \cdot l_1^x [\cos(q_x) + \cos(q_y)] + 2t' \cdot l_2^{x,y} \cdot \cos(q_x) \cdot \cos(q_y) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + t'' \cdot l_2^{x,x} [\cos(2q_x) + \cos(2q_y)] \right\} \delta b_{\mathbf{q}}(i\omega_\ell) \cdot \delta b_{-\mathbf{q}}(-i\omega_\ell) \right. \\
& \quad \left. + \left\{ -t \cdot l_1^x [\cos(q_x) + \cos(q_y)] + 2t' \cdot l_2^{x,y} \cdot \cos(q_x) \cdot \cos(q_y) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + t'' \cdot l_2^{x,x} [\cos(2q_x) + \cos(2q_y)] \right\} \delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_\ell) \cdot \delta b_{-\mathbf{q}-\mathbf{Q}}(-i\omega_\ell) \right],
\end{aligned}$$

où $\tilde{J}_{\mathbf{q}}$ est donné par (13.14) et nous avons défini les valeurs moyennes sur les variables de Grassmann évaluées grâce à la matrice des fonctions de Green libres (12.24)

$$\begin{aligned}
l_1^{s_t} &= \langle \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{i+s_t,\sigma} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} ' \frac{(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \cos(k_{s_t}), \\
l_2^{s_t, s_{t'}} &= \langle \bar{\Psi}_{i,\sigma} \Psi_{i+s_t+s_{t'},\sigma} \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} ' \frac{(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \xi_{\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \cos(k_{s_t} + k_{s_{t'}}),
\end{aligned}$$

avec $s_t, s_{t'} = x, y$.

Afin de formuler $\mathcal{S}_{2,B}$ (et $\mathcal{S}_{2,F}$ qui sera définie dans la section 14.1.2 suivante) sous une forme compacte nous introduisons le vecteur $\delta\vec{X}$ à neuf composantes contenant les

fluctuations au premier ordre des différents champs bosoniques

$$\delta\vec{X}(\mathbf{q}, i\omega_\ell) = [\delta X_i(\mathbf{q}, i\omega_\ell)]_{1 \leq i \leq 9} = \begin{bmatrix} \delta' \chi_{\mathbf{q}}^x(i\omega_\ell) \\ \delta' \chi_{\mathbf{q}}^y(i\omega_\ell) \\ \delta'' \chi_{\mathbf{q}}^x(i\omega_\ell) \\ \delta'' \chi_{\mathbf{q}}^y(i\omega_\ell) \\ \delta m_{\mathbf{q}}^x(i\omega_\ell) \\ \delta m_{\mathbf{q}}^y(i\omega_\ell) \\ \delta m_{\mathbf{q}}^z(i\omega_\ell) \\ \delta \lambda_{\mathbf{q}}(i\omega_\ell) \\ \delta b_{\mathbf{q}}(i\omega_\ell) \end{bmatrix}, \quad (14.5)$$

$$\delta\vec{X}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega_\ell) = [\delta X_i(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega_\ell)]_{1 \leq i \leq 9} = \begin{bmatrix} \delta' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^x(i\omega_\ell) \\ \delta' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^y(i\omega_\ell) \\ \delta'' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^x(i\omega_\ell) \\ \delta'' \chi_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^y(i\omega_\ell) \\ \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^x(i\omega_\ell) \\ \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^y(i\omega_\ell) \\ \delta m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^z(i\omega_\ell) \\ \delta \lambda_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_\ell) \\ \delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}(i\omega_\ell) \end{bmatrix}. \quad (14.6)$$

$\mathcal{S}_{2,B}$ peut être écrite sous forme matricielle dans la base des $\delta\vec{X}$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{2,B} = \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}, \mathbf{q}+\mathbf{Q}} \sum_{i\omega_\ell} \sum_{i,j=1}^9 \delta X_i(\mathbf{q}_1, i\omega_\ell) \\ \times \mathcal{M}_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \\ \times \delta X_j(-\mathbf{q}_2, -i\omega_\ell), \end{aligned} \quad (14.7)$$

et nous notons $\mathcal{M}_{i,j}$ les éléments de matrice associés

$$\tilde{\mathcal{M}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) = \left[\mathcal{M}_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \right]_{1 \leq i,j \leq 9}.$$

14.1.2 Evaluation de la contribution fermionique

$\mathcal{S}_{2,F}$ provient de la contribution des boucles fermioniques, comme dans une approximation de type RPA. Elle correspond à la trace du membre de droite de l'équation (14.1)

$$\mathcal{S}_{2,F} = \frac{1}{2} \text{Tr} [\tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1 \tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1], \quad (14.8)$$

avec

$$\begin{aligned} & \text{Tr} [\tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1 \tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1] \\ = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} ' \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{i\omega_n, i\omega_\ell} \text{tr} \left[\tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_n + i\omega_\ell) \tilde{\mathcal{V}}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_n + i\omega_\ell; \mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \right. \\ & \left. \times \tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \tilde{\mathcal{V}}_1(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n; \mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_n + i\omega_\ell) \right], \end{aligned} \quad (14.9)$$

où les matrices des fonctions de Green libres $\tilde{\mathcal{G}}_0$ et d'interaction $\tilde{\mathcal{V}}_1$ sont données par les équations (12.24) et (13.16), respectivement. La trace tr est prise suivant la base de spineurs (12.13).

Nous définissons le vecteur $\vec{c}^{\sigma',\sigma}$ contenant les coefficients apportés par les fluctuations au premier ordre dans la matrice $\tilde{\mathcal{V}}_1$. Comme on peut le voir à partir de l'expression (13.16), $\delta b_{\mathbf{q}}$ (tout comme $\delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}$) donne deux contributions séparées et non pas une seule comme les autres champs auxiliaires bosoniques. Par suite $\vec{c}^{\sigma',\sigma}$ possède 10 composantes et non pas 9, ce qu'indique l'indice a' égal à 1 pour tous les champs à l'exception de $\delta b_{\mathbf{q}}$ (et $\delta b_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}$) pour lequel il prend les valeurs 1 et 2. Le vecteur $\vec{c}^{\sigma',\sigma}$ est donné par

$$\vec{c}^{\sigma',\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = [c_{i,a'}^{\sigma',\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q})]_{1 \leq i \leq 9} = \begin{bmatrix} -(1-\alpha)J\cos(k_x + q_x/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -(1-\alpha)J\cos(k_y + q_y/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -(1-\alpha)J\sin(k_x + q_x/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -(1-\alpha)J\sin(k_y + q_y/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ \alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^x \\ \alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^y \\ \alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^z \\ -i\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \end{bmatrix}, \quad (14.10)$$

$$\vec{c}^{\sigma',\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}) = [c_{i,a'}^{\sigma',\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q} + \mathbf{Q})]_{1 \leq i \leq 9} = \begin{bmatrix} -i(1-\alpha)J\sin(k_x + q_x/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -i(1-\alpha)J\sin(k_y + q_y/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ i(1-\alpha)J\cos(k_x + q_x/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ i(1-\alpha)J\cos(k_y + q_y/2)\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -\alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^x \\ -\alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^y \\ -\alpha\tilde{J}_{\mathbf{q}}\sigma_{\sigma',\sigma}^z \\ -i\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ -2(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}'' + \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}'')\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \\ 2i(b_0)^2(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})\sigma_{\sigma',\sigma}^0 \end{bmatrix}, \quad (14.11)$$

où $\tilde{t}_{\mathbf{k}}$, $\tilde{t}_{\mathbf{k}}''$, $\tilde{t}_{\mathbf{k}}'''$ et $\tilde{J}_{\mathbf{q}}$ sont donnés par les expressions (13.11), (13.12), (13.13) et (13.14), respectivement.

De la même façon on définit le vecteur \vec{s} associant chacun des éléments de fluctuations δX_i (14.5), (14.6) à la matrice de Pauli correspondante apparaissant dans la matrice d'in-

teraction $\tilde{\mathcal{V}}_1$ (13.16)

$$\vec{s}(\mathbf{q}) = [\tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q})]_{1 \leq i \leq 9} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}^z \\ \tilde{\sigma}^z \\ \tilde{\sigma}^z \\ \tilde{\sigma}^z \\ \tilde{\sigma}^0 \\ \tilde{\sigma}^0 \\ \tilde{\sigma}^0 \\ \tilde{\sigma}^0 \\ \tilde{\sigma}^0 \\ \tilde{\sigma}^z \end{bmatrix}, \quad (14.12)$$

$$\vec{s}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) = [\tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q} + \mathbf{Q})]_{1 \leq i \leq 9} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}^y \\ \tilde{\sigma}^y \\ \tilde{\sigma}^y \\ \tilde{\sigma}^y \\ \tilde{\sigma}^x \\ \tilde{\sigma}^x \\ \tilde{\sigma}^x \\ \tilde{\sigma}^x \\ \tilde{\sigma}^x \\ \tilde{\sigma}^y \end{bmatrix}. \quad (14.13)$$

Nous notons F les intégrales en énergie définies par

$$F_{\tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1), \tilde{s}_{j,a''}(\mathbf{q}_2)}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \text{tr} \left[\tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_n + i\omega_\ell) \tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1) \right. \\ \left. \times \tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \tilde{s}_{j,a''}(\mathbf{q}_2) \right], \quad (14.14)$$

avec $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}$. En considérant la matrice identité et les trois matrices de Pauli de SU(2) nous obtenons de (14.14) 16 intégrales thermiques, dont le calcul est détaillé dans l'appendice E. On remarquera que la sommation sur les fréquences de Matsubara fermioniques ($i\omega_n$) est incorporée dans ces intégrales.

Nous définissons la matrice $\tilde{\Pi}$ qui contient explicitement, à un niveau RPA, les contributions des champs bosoniques fluctuants aux fonctions de corrélation

$$\tilde{\Pi}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) = \left[\Pi_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \right]_{1 \leq i,j \leq 9}, \quad (14.15)$$

avec les éléments matriciels donnés par

$$\Pi_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma', \sigma} \sum_{a', a''=1}^2 c_{i,a'}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) F_{\tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1), \tilde{s}_{j,a''}(\mathbf{q}_2)}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\ \times c_{j,a''}^{\sigma, \sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_2).$$

Nous obtenons alors de (14.9), (14.14) et (14.15)

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1 \tilde{\mathcal{G}}_0 \tilde{\mathcal{V}}_1] &= \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}} \sum_{i\omega_\ell} \sum_{i,j=1}^9 \delta X_i(\mathbf{q}_1, i\omega_\ell) \\ &\times \Pi_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \\ &\times \delta X_j(-\mathbf{q}_2, -i\omega_\ell). \end{aligned} \quad (14.16)$$

14.1.3 Développement de l'action au second ordre des fluctuations

Le terme quadratique de l'action est donné par

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_2 &= \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}} \sum_{i\omega_\ell} \sum_{i,j=1}^9 \delta X_i(\mathbf{q}_1, i\omega_\ell) \\ &\times \left(\mathcal{M}_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) + \frac{1}{2} \Pi_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \right) \\ &\times \delta X_j(-\mathbf{q}_2, -i\omega_\ell), \end{aligned} \quad (14.17)$$

où les fluctuations du premier ordre des champs bosoniques sont incluses dans le vecteur $\vec{\delta X}$ (14.5), (14.6), et les éléments de matrices sont données par (14.7) et (14.15), respectivement.

Dans le cadre d'un formalisme d'intégrale de chemin, le développement de l'action au second ordre des fluctuations permet de dériver l'expression des différentes fonctions de corrélation

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2, i\omega_\ell) &= \left[\mathcal{C}_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \right]_{1 \leq i,j \leq 9} \quad (14.18) \\ &= \left[\langle X_i(\mathbf{q}_1, i\omega_\ell) X_j(-\mathbf{q}_2, -i\omega_\ell) \rangle_{RPA} \right]_{1 \leq i,j \leq 9}, \\ \left[\langle X_i(\mathbf{q}_1, i\omega_\ell) X_j(-\mathbf{q}_2, -i\omega_\ell) \rangle_{RPA} \right]_{1 \leq i,j \leq 9} &= \left(\tilde{\mathcal{M}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) + \frac{1}{2} \tilde{\Pi}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, i\omega_\ell) \right)^{-1} \end{aligned}$$

Le comportement de la fonction de corrélation spin spin transverse χ^\pm est en accord avec les résultats obtenus précédemment concernant les systèmes antiferromagnétiques de Heisenberg (cf. appendice F).

14.2 Définition de l'action effective

Nous disposons maintenant de tous les éléments requis afin de calculer le potentiel d'appariement «à la B.C.S.», à savoir l'interaction effective entre quasiparticules de la bande de Hubbard inférieure. Ce potentiel est médié par les fluctuations des champs bosoniques. Il va nous permettre d'examiner les effets de la coexistence entre antiferromagnétisme et état RVB sur la supraconductivité des cuprates sous-dopés.

Pour cela nous suivons de près l'approche développée par Schrieffer *et al.* [65], en l'adaptant au contexte du modèle $t - J$ que nous étudions. Les effets de retard spécifiques à la théorie d'Eliashberg [54, 180] sont négligés: nous dérivons le potentiel d'appariement en nous plaçant à la limite statique ($i\omega_\ell = 0$). Par conséquent la dépendance en fréquence des champs sera négligée à partir de maintenant. Cette approximation est valable dans la limite du couplage faible, où en raison du théorème de Migdal [181] l'approximation adiabatique est satisfaite à savoir

$$k_B T_c, \Delta_{SC} \ll \hbar\omega_D,$$

où T_c est la température de transition supraconductrice, Δ_{SC} le paramètre d'ordre supraconducteur et ω_D la fréquence caractéristique de l'échange des bosons (analogue à la fréquence de Debye, définie dans le cadre d'un couplage électron-phonon).

14.2.1 Action au premier ordre des fluctuations en terme de quasiparticules

Nous considérons en premier l'interaction linéaire entre champs fermioniques et bosoniques (13.15)

$$\mathcal{S}_{1,F} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma', \sigma} [\bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'} \bar{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}, \sigma'}] \tilde{\mathcal{V}}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma'; \mathbf{k}, \sigma) \begin{bmatrix} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma} \\ \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \end{bmatrix}. \quad (14.19)$$

En utilisant les résultats établis dans la section précédente 14.1, la matrice d'interaction $\tilde{\mathcal{V}}_1$ (13.16) s'écrit

$$\tilde{\mathcal{V}}_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma'; \mathbf{k}, \sigma) = \sum_{\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}, \mathbf{q}+\mathbf{Q}} \sum_{i=1}^9 \left(\sum_{a'=1,2} c_{i,a'}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) \tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1) \right) \delta X_i(\mathbf{q}_1), \quad (14.20)$$

où δX_i , $c_{i,a'}$ et $\tilde{s}_{i,a'}$ sont donnés par (14.5) et (14.6), (14.10) et (14.11), (14.12) et (14.13), respectivement.

Rappelons que $\bar{\Psi}$, Ψ sont les variables de Grassmann associées aux opérateurs de spinons f^\dagger , f . Comme nous sommes intéressés par l'interaction entre deux quasiparticules de la bande de Hubbard inférieure, nous introduisons les variables de Grassmann $\bar{\Phi}$, Φ associées aux opérateurs γ_2^\dagger , γ_2 . En négligeant la contribution de la bande de Hubbard supérieure vide à très basses températures, nous obtenons à partir de la forme diagonalisée (12.18) de l'hamiltonien de champ moyen

$$\Psi_{\mathbf{k}, \sigma} = \sin(\theta_{\mathbf{k}}) \Phi_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} = e^{-i\phi_{\mathbf{k}, \sigma}} \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \Phi_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (14.21)$$

Nous obtenons ainsi l'expression de l'action au premier ordre des fluctuations en terme

d'opérateurs de quasiparticules

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{1,F} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} ' \sum_{\sigma',\sigma} & \bar{\Phi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \quad e^{i\phi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}} \cos(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \right] \\ & \times \left\{ \sum_{\mathbf{q}_1=\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{Q}} \sum_{i=1}^9 \left(\sum_{a'=1,2} c_{i,a'}^{\sigma',\sigma}(\mathbf{k},\mathbf{q}_1) \tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1) \right) \delta X_i(\mathbf{q}_1) \right\} \\ & \times \left[\frac{\sin(\theta_{\mathbf{k}})}{e^{-i\phi_{\mathbf{k},\sigma}} \cos(\theta_{\mathbf{k}})} \right] \Phi_{\mathbf{k},\sigma}. \end{aligned} \quad (14.22)$$

14.2.2 Dérivation de l'action effective

Afin d'incorporer les effets d'interaction à un niveau RPA, nous dérivons l'action effective de la manière suivante: l'action au premier ordre des fluctuations exprimée en terme d'opérateurs de quasiparticules (14.22) est ajoutée au terme S_2^{eff} au deuxième ordre des fluctuations

$$\mathcal{S}_2 = \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2=\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{Q}} \sum_{i,j=1}^9 \delta X_i(\mathbf{q}_1) \mathcal{C}_{i,j}^{-1}(\mathbf{q},\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_2) \delta X_j(-\mathbf{q}_2), \quad (14.23)$$

où les δX_i sont les fluctuations au premier ordre des champs bosoniques (14.5), (14.6), et $\mathcal{C}_{i,j}^{-1}$ les éléments de la matrice inverse des fonctions de corrélation (14.18).

L'action effective \mathcal{S}^{eff} est donnée par

$$\mathcal{S}^{eff} = \mathcal{S}_{1,F} + \mathcal{S}_2. \quad (14.24)$$

Afin de dériver le potentiel d'appariement entre quasiparticules, nous effectuons l'intégration sur les fluctuations bosoniques δX_i dans \mathcal{S}^{eff} . Pour obtenir des notations plus concises, nous définissons le vecteur $\vec{\phi}(\mathbf{q}_1)$ par

$$\begin{aligned} \vec{\phi}(\mathbf{q}_1) &= [\phi_i(\mathbf{q}_1)]_{1 \leq i \leq 9}, \\ \phi_i(\mathbf{q}_1) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1} ' \sum_{\sigma'_1,\sigma_1} \bar{\Phi}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma'_1} \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}) \quad e^{i\phi_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma'_1}} \cos(\theta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}) \right] \\ & \times \left(\sum_{a'_1=1,2} c_{i,a'_1}^{\sigma'_1,\sigma_1}(\mathbf{k}_1,\mathbf{q}_1) \tilde{s}_{i,a'_1}(\mathbf{q}_1) \right) \\ & \times \left[\frac{\sin(\theta_{\mathbf{k}_1})}{e^{-i\phi_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}} \cos(\theta_{\mathbf{k}_1})} \right] \Phi_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}, \end{aligned} \quad (14.25)$$

pour $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}$.

Nous avons

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{eff} &= \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2=\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{Q}} \delta \vec{X}(\mathbf{q}_1) \tilde{\mathcal{C}}^{-1}(\mathbf{q},\mathbf{q}_1,-\mathbf{q}_2) \delta \vec{X}(-\mathbf{q}_2) \\ & + \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1=\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{Q}} \vec{\phi}(\mathbf{q}_1) \delta \vec{X}(\mathbf{q}_1) + \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_2=\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{Q}} \vec{\phi}(-\mathbf{q}_2) \delta \vec{X}(-\mathbf{q}_2), \end{aligned} \quad (14.26)$$

et après intégration sur les champs de bosons

$$\mathcal{S}^{eff} = - \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}} \vec{\phi}(-\mathbf{q}_2) \tilde{\mathcal{C}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2) \vec{\phi}(\mathbf{q}_1),$$

ou de façon équivalente en utilisant l'expression (14.25) du vecteur $\vec{\phi}$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{eff} & \tag{14.27} \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{q}} ' \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}} \sum_{i,j=1}^9 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} ' \sum_{\sigma'_1, \sigma_1, \sigma'_2, \sigma_2} \bar{\Phi}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma'_2} \Phi_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \bar{\Phi}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma'_1} \Phi_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \\ & \times \left\{ \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}}) e^{i\phi_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma'_2} \cos(\theta_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}})} \right] \left(\sum_{a'_2=1,2} c_{i, a'_2}^{\sigma'_2, \sigma_2}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q}_2) \tilde{s}_{i, a'_2}(-\mathbf{q}_2) \right) \right. \\ & \times \left[\begin{array}{c} \sin(\theta_{\mathbf{k}_2}) \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \cos(\theta_{\mathbf{k}_2})} \end{array} \right] \\ & \times \mathcal{C}_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2) \\ & \times \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}) e^{i\phi_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma'_1} \cos(\theta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}})} \right] \left(\sum_{a'_1=1,2} c_{j, a'_1}^{\sigma'_1, \sigma_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1) \tilde{s}_{j, a'_1}(\mathbf{q}_1) \right) \\ & \left. \times \left[\begin{array}{c} \sin(\theta_{\mathbf{k}_1}) \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} \cos(\theta_{\mathbf{k}_1})} \end{array} \right] \right\}. \end{aligned}$$

14.3 Evaluation du potentiel d'appariement BCS

14.3.1 Expression analytique du potentiel d'appariement

Pour retrouver la forme BCS, nous imposons les relations suivantes entre les impulsions et les spins intervenant dans l'action effective

$$\begin{aligned} * \quad & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}, \mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}, \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \\ & \sigma'_1 = \uparrow, \sigma'_2 = \downarrow, \sigma_2 = \downarrow, \sigma_1 = \uparrow. \end{aligned} \tag{14.28}$$

$$\begin{aligned} * \quad & \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}, \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}, \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \\ & \sigma'_1 = \downarrow, \sigma'_2 = \uparrow, \sigma_2 = \uparrow, \sigma_1 = \downarrow. \end{aligned} \tag{14.29}$$

$$\begin{aligned} * \quad & \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}, \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}, \mathbf{q} = \mathbf{k}' + \mathbf{k}, \\ & \sigma'_1 = \uparrow, \sigma'_2 = \downarrow, \sigma_2 = \uparrow, \sigma_1 = \downarrow. \end{aligned} \tag{14.30}$$

$$\begin{aligned} * \quad & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}, \mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}, \mathbf{q} = -\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \\ & \sigma'_1 = \downarrow, \sigma'_2 = \uparrow, \sigma_2 = \downarrow, \sigma_1 = \uparrow. \end{aligned} \tag{14.31}$$

Les configurations (14.28) et (14.29) sont associées à la contribution de l'aimantation alternée (zz), tandis que les expressions (14.30) et (14.31) correspondent à la contribution de la phase de flux (\pm). Nous en déduisons l'action effective BCS

$$\mathcal{S}_{BCS}^{eff} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} ' \{V_{BCS}^{zz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + V_{BCS}^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\} \bar{\Phi}_{\mathbf{k}', \uparrow} \bar{\Phi}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \Phi_{-\mathbf{k}, \downarrow} \Phi_{\mathbf{k}, \uparrow}. \quad (14.32)$$

Le potentiel d'appariement provenant de la contribution zz est obtenu à partir des configurations (14.28) et (14.29) prises en compte dans l'action effective BCS, il en résulte

$$\begin{aligned} V_{BCS}^{zz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{Q}} \sum_{i, j=1}^9 \left(-\frac{1}{4} \right) \quad (14.33) \\ &\times \left\{ \left[\sin(\theta_{-\mathbf{k}'}) \ e^{i\phi_{-\mathbf{k}', \downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a_2=1,2} c_{i, a_2}^{\downarrow, \downarrow}(-\mathbf{k}, -\mathbf{q}_2) \tilde{s}_{i, a_2}(-\mathbf{q}_2) \right) \left[\begin{array}{c} \sin(\theta_{-\mathbf{k}}) \\ e^{-i\phi_{-\mathbf{k}, \downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}}) \end{array} \right] \right. \\ &\quad \times \mathcal{C}_{i, j}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2) \\ &\quad \times \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}'}) \ e^{i\phi_{\mathbf{k}', \uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a_1=1,2} c_{j, a_1}^{\uparrow, \uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) \tilde{s}_{j, a_1}(\mathbf{q}_1) \right) \\ &\quad \times \left[\begin{array}{c} \sin(\theta_{\mathbf{k}}) \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}, \uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \end{array} \right] \\ &\quad + \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}'}) \ e^{i\phi_{\mathbf{k}', \uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a_2=1,2} c_{i, a_2}^{\uparrow, \uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{q}_2) \tilde{s}_{i, a_2}(\mathbf{q}_2) \right) \left[\begin{array}{c} \sin(\theta_{\mathbf{k}}) \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}, \uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \end{array} \right] \\ &\quad \times \mathcal{C}_{i, j}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\ &\quad \times \left[\sin(\theta_{-\mathbf{k}'}) \ e^{i\phi_{-\mathbf{k}', \downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a_1=1,2} c_{j, a_1}^{\downarrow, \downarrow}(-\mathbf{k}, -\mathbf{q}_1) \tilde{s}_{j, a_1}(-\mathbf{q}_1) \right) \\ &\quad \times \left. \left[\begin{array}{c} \sin(\theta_{-\mathbf{k}}) \\ e^{-i\phi_{-\mathbf{k}, \downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}}) \end{array} \right] \right\}. \end{aligned}$$

De la même façon, les configurations (14.30) et (14.31) prises en compte dans l'action effective BCS conduisent à la contribution \pm au potentiel d'appariement

$$\begin{aligned}
V_{BCS}^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 = \mathbf{k}' + \mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{k} + \mathbf{Q}} \sum_{i,j=1}^9 \left(+\frac{1}{4} \right) \quad (14.34) \\
&\times \left\{ \left[\sin(\theta_{-\mathbf{k}'}) e^{i\phi_{-\mathbf{k}',\downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a'_2=1,2} c_{i,a'_2}^{\downarrow,\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}_2) \tilde{s}_{i,a'_2}(-\mathbf{q}_2) \right) \left[\frac{\sin(\theta_{\mathbf{k}})}{e^{-i\phi_{-\mathbf{k},\uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}})} \right] \right. \\
&\quad \times \mathcal{C}_{i,j}(\mathbf{k}' + \mathbf{k}, \mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2) \\
&\quad \times \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}'}) e^{i\phi_{\mathbf{k}',\uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a'_1=1,2} c_{j,a'_1}^{\uparrow,\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{q}_1) \tilde{s}_{j,a'_1}(\mathbf{q}_1) \right) \left[\frac{\sin(\theta_{-\mathbf{k}})}{e^{-i\phi_{-\mathbf{k},\downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}})} \right] \\
&\quad + \left[\sin(\theta_{\mathbf{k}'}) e^{i\phi_{\mathbf{k}',\uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a'_2=1,2} c_{i,a'_2}^{\uparrow,\downarrow}(-\mathbf{k}, \mathbf{q}_2) \tilde{s}_{i,a'_2}(\mathbf{q}_2) \right) \left[\frac{\sin(\theta_{-\mathbf{k}})}{e^{-i\phi_{-\mathbf{k},\downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}})} \right] \\
&\quad \times \mathcal{C}_{i,j}(-\mathbf{k} - \mathbf{k}', -\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\
&\quad \times \left. \left[\sin(\theta_{-\mathbf{k}'}) e^{i\phi_{-\mathbf{k}',\downarrow}} \cos(\theta_{-\mathbf{k}'}) \right] \left(\sum_{a'_1=1,2} c_{j,a'_1}^{\downarrow,\uparrow}(\mathbf{k}, -\mathbf{q}_1) \tilde{s}_{j,a'_1}(-\mathbf{q}_1) \right) \left[\frac{\sin(\theta_{\mathbf{k}})}{e^{-i\phi_{\mathbf{k},\uparrow}} \cos(\theta_{\mathbf{k}})} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Le potentiel d'appariement total incluant les deux contributions précédentes s'écrit

$$V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_{BCS}^{zz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + V_{BCS}^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (14.35)$$

De même qu'en (14.32), l'action effective BCS est donc

$$\mathcal{S}_{BCS}^{eff} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \bar{\Phi}_{\mathbf{k}',\uparrow} \bar{\Phi}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \Phi_{-\mathbf{k},\downarrow} \Phi_{\mathbf{k},\uparrow}. \quad (14.36)$$

14.3.2 Résultats numériques obtenus pour le potentiel d'appariement

Les fonctions de corrélation et les interactions effectives ont été calculées numériquement, par une méthode analogue à celle utilisée pour la résolution des équations de champ moyen (voir la section 13.3). La précision sur les valeurs numériques est supérieure à 10^{-5} .

Les résultats obtenus pour le potentiel RPA «à la B.C.S.» sont présentés sur la Figure 14.1. Cette figure montre l'interaction effective entre deux quasiparticules de la bande de Hubbard inférieure. L'une est située au point $\mathbf{k} = (-\pi/2, -\pi/2)$, et l'autre en un point quelconque \mathbf{k}' placé dans la zone de Brillouin magnétique. Les intensités des interactions effectives sont représentées en fonction de \mathbf{k}' , ainsi les valeurs données pour $\mathbf{k}' = (\pi/2, \pi/2)$ correspondent à un vecteur de diffusion $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = (\pi, \pi)$.

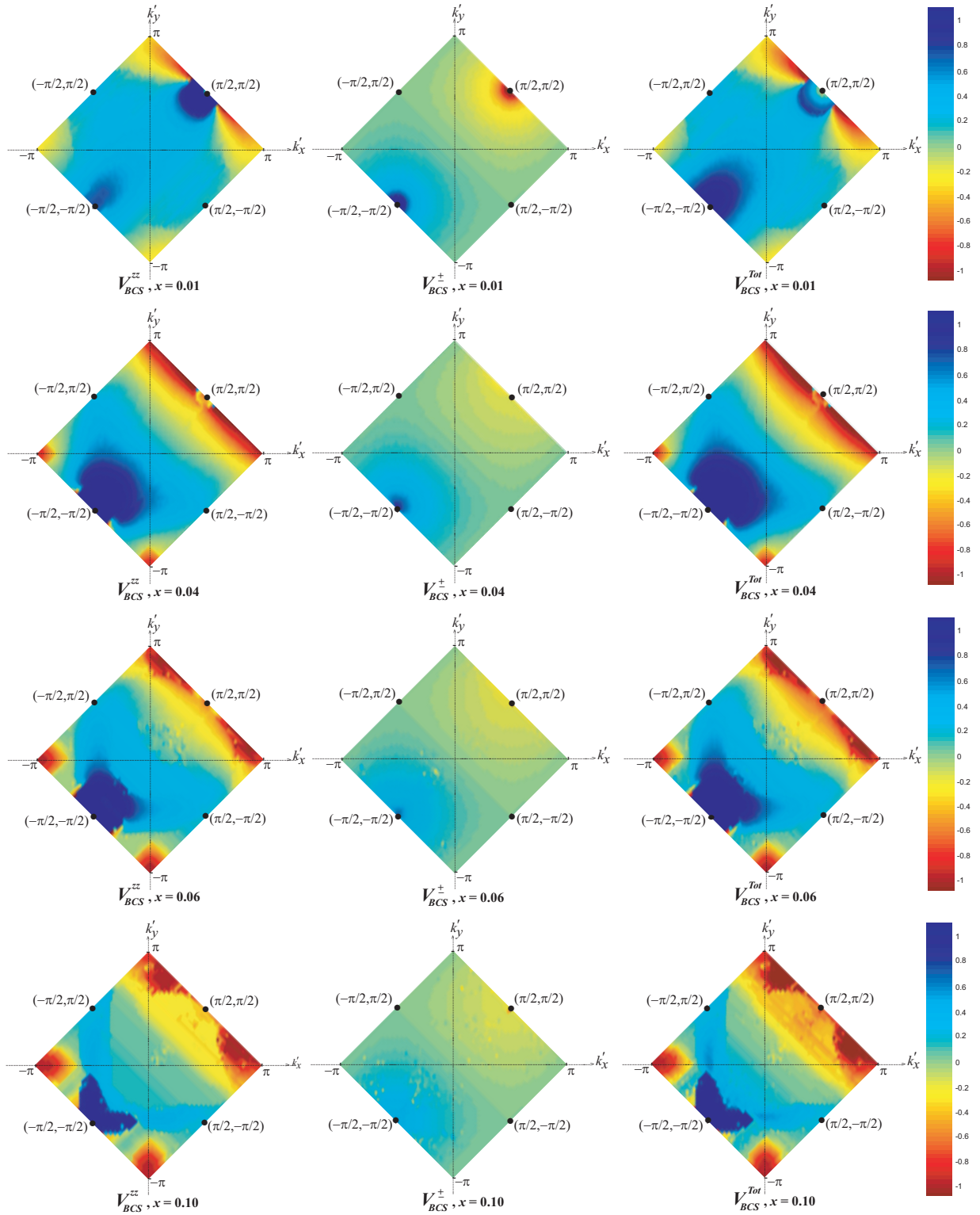


FIG. 14.1 – Potentiels d'appariement $V_{BCS}^{zz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.33), $V_{BCS}^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.34) et $V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.35) en fonction de \mathbf{k}' , avec $\mathbf{k} = (-\pi/2, -\pi/2)$ fixé, pour différentes valeurs du dopage x . Les potentiels d'appariement sont donnés en unité de t .

Comme nous avons considéré la limite statique ($i\omega_\ell = 0$), les valeurs prises par les interactions effectives sont réelles. En accord avec la théorie BCS [53, 54], une valeur négative du potentiel d'appariement correspond à une attraction entre quasiparticules donnant lieu à la formation de paires de Cooper (on parle d'interaction attractive), tandis qu'une valeur positive correspond à une répulsion entre quasiparticules ne permettant pas la création de paires de Cooper (on dit que le potentiel est répulsif).

Une caractéristique intéressante qu'on observe sur la Figure 14.1 est que le potentiel d'appariement total V_{BCS}^{Tot} est presque complètement dominé par la composante zz (longitudinale) de la susceptibilité de spin, sans modification majeure introduite par les corrélations RVB via la contribution \pm (transverse).

Une des prédictions principales de la théorie de spin-bag est que la supraconductivité des cuprates sous-dopés apparaît grâce à un appariement entre les trous situés dans les petites poches qui sont délimitées par la surface de Fermi aux quatre points nodaux ($\pm\pi/2, \pm\pi/2$) (voir la Figure 13.4). Nous obtenons une interaction effective totale $V_{BCS}^\pm(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ clairement répulsive pour un vecteur de diffusion \mathbf{q} égal à $(0, 0)$, $(\pi, 0)$ et $(0, \pi)$ dans la zone de Brillouin magnétique. Bien qu'il existe un comportement répulsif lorsque \mathbf{q} est voisin de (π, π) , il est raisonnable de penser que cet effet créateur de paires n'est pas suffisant pour s'opposer aux précédents. Par conséquent nous en concluons que la coexistence d'un ordre antiferromagnétique à longue distance avec un état RVB, qui semble être un aspect très pertinent de la physique des cuprates comme l'ont montré plusieurs études numériques, ne mène pas à l'apparition d'une phase supraconductrice.

14.4 Symétrie du gap supraconducteur

En plus de la nature répulsive ou attractive du potentiel d'appariement, un autre problème important concerne la symétrie du gap supraconducteur Δ_{SC} (appelé aussi paramètre d'ordre BCS). Une description complète de Δ_{SC} nécessiterait de résoudre l'équation de gap

$$\Delta_{SC}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta_{SC}(\mathbf{k}')}{2E_{\mathbf{k}'}^{low}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}^{low}}{2}\right), \quad (14.37)$$

où $E_{\mathbf{k}'}^{low}$ et V_{BCS}^{Tot} sont donnés par les expressions (12.20) et (14.35), respectivement. Ce travail ne sera pas mené ici. En effet compte-tenu du grand nombre de degrés de liberté collectifs présents, le développement numérique à accomplir serait très lourd. Par ailleurs nous pouvons obtenir des informations très précises concernant Δ_{SC} en utilisant des considérations de symétrie relativement simples.

D'un point de vue théorique, deux symétries distinctes sont pertinentes pour caractériser un état supraconducteur provoqué par les fortes corrélations entre électrons: la symétrie d et la symétrie p . Il a souvent été affirmé que la symétrie de type d est la plus appropriée [182, 183, 184]. Comme les cuprates possèdent une symétrie du cristal soit orthorhombique soit tétragonale et qu'il est clair que la supraconductivité à haute température critique est un phénomène essentiellement provoqué par la structure de plans de CuO_2 , des arguments

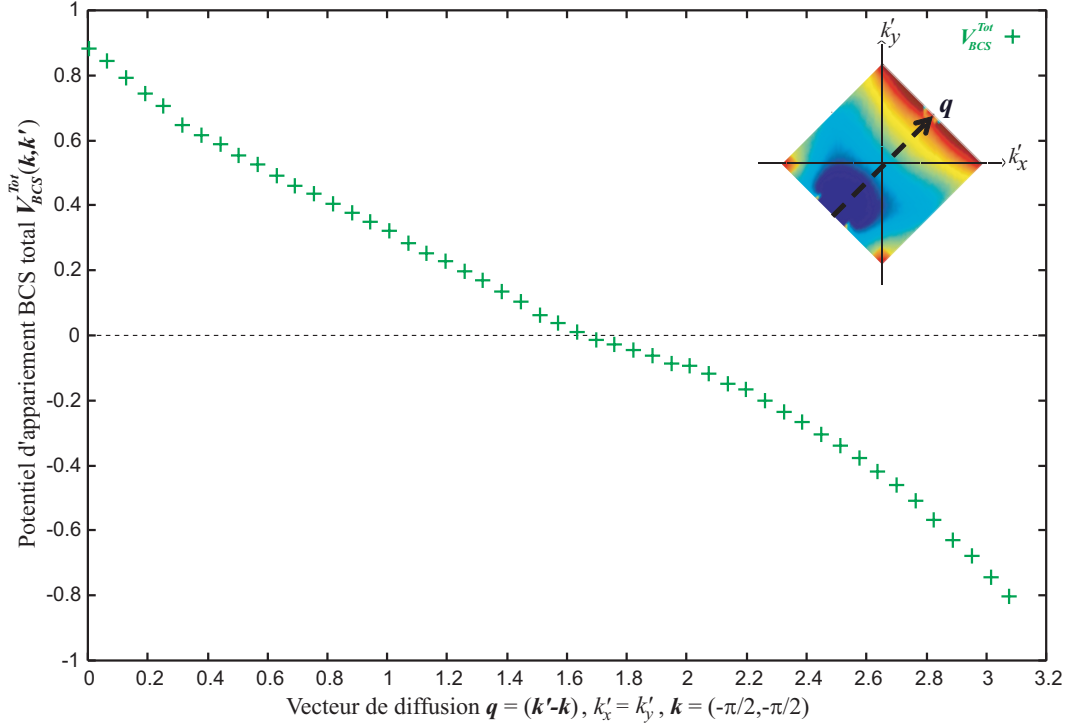


FIG. 14.2 – Potentiel d'appariement total $V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.35) pour une valeur donnée du dopage $x = 0.05$, en fonction de $\mathbf{q} = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, avec $\mathbf{k} = (-\pi/2, -\pi/2)$ fixé. Le potentiel d'appariement est donné en unité de t .

de symétrie imposent que seules deux fonctions d'onde de symétrie d sont adaptées à la caractérisation du paramètre d'ordre BCS, à savoir d_{xy} et $d_{x^2-y^2}$ [154]. Les fonctions de gap Δ peuvent être développées en terme des composantes du vecteur d'onde [185]

$$\Delta(\mathbf{k}) \propto (\sin k_x \sin k_y), \quad \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = \Delta(\mathbf{k}) \text{ pour la symétrie } d_{xy}, \quad (14.38)$$

$$\Delta(\mathbf{k}) \propto (\cos k_x - \cos k_y), \quad \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\Delta(\mathbf{k}) \text{ pour la symétrie } d_{x^2-y^2}. \quad (14.39)$$

On représente sur la Figure 14.2 les résultats du calcul numérique du potentiel d'appariement total V_{BCS}^{Tot} , pour un dopage de valeur fixée $x = 0.05$ et un vecteur de diffusion situé le long de la diagonale $(0, 0) - (\pi, \pi)$ de la zone de Brillouin. Nous voyons que

$$V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \simeq -V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (14.40)$$

pour $\mathbf{k} \simeq \mathbf{k}' \simeq (-\pi/2, -\pi/2)$. L'expression précédente peut être incorporée à l'équation de gap (14.37) et en considérant le vecteur de diffusion voisin de (π, π) on peut raisonnablement en conclure que le gap supraconducteur associé à l'interaction effective totale V_{BCS}^{Tot} satisfait à la propriété suivante

$$\Delta_{SC}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \simeq -\Delta_{SC}(\mathbf{k}) \text{ for } \mathbf{k} \simeq (-\pi/2, -\pi/2). \quad (14.41)$$

Nous en concluons que Δ_{SC} possède des ligne nodales et en utilisant la relation (14.39) qu'il est caractérisé par la symétrie $d_{x^2-y^2}$. En d'autres termes, l'anomalie des fermions de Dirac résultant de la coexistence entre antiferromagnétisme et état RVB favorise la symétrie $d_{x^2-y^2}$ caractérisée par la présence de nœuds au voisinage de la surface de Fermi, par rapport à la symétrie d_{xy} . Cet aspect des résultats est très encourageant, dans la mesure où plusieurs expériences récentes [153, 154] ont mesuré dans de nombreux cuprates un gap de symétrie $d_{x^2-y^2}$.

La prédiction d'un paramètre d'ordre BCS de symétrie $d_{x^2-y^2}$ est en rupture avec de nombreuses théories précédentes. En effet il a souvent été affirmé qu'un état d'appariement de symétrie d_{xy} est préférable, car la symétrie $d_{x^2-y^2}$ est caractérisée par la présence de nœuds dans les petites poches de trous, autrement dit à l'intérieur de la surface de Fermi, ce qui est énergétiquement défavorable car l'énergie de condensation supraconductrice est alors réduite. La présence des nœuds est provoquée par la chiralité des fonctions de Bloch au voisinage des points $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ du réseau réciproque, résultant du facteur de phase présent dans les coefficients de Bogoliubov (12.18). Ce facteur de phase est typique de l'anomalie de parité introduite par la phase de flux (voir la section 12.2.4).

Chapitre 15

Discussion et conclusion

Dans cette troisième partie, nous avons discuté la stabilité vis à vis de la transition supraconductrice d'un état présentant un ordre antiferromagnétique à longue distance co-existant avec des corrélations RVB résultant d'une phase de flux, pour une faible valeur du dopage en trous. Les poches de trous situées autour des points $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ de la zone de Brillouin magnétique ne sont pas identiques à celles décrites par la théorie de spin-bag [65]. En effet l'état antiferromagnétique que nous avons considéré comporte également la formation d'un singulet de spin provoquée par les corrélations RVB, qui se superposent à l'état de Néel. La fonction d'onde décrivant les trous est donc distincte de celle obtenue pour un état caractérisé uniquement par une onde de densité de spin.

Dans le cadre des théories de fluctuations de spin de la supraconductivité à haute température critique [186], l'appariement se produit avec une symétrie $d_{x^2-y^2}$ lorsque les gaps au voisinage des points $\mathbf{k} = (\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$ sont dominants, car le paramètre d'ordre BCS change de signe entre les points $\mathbf{k} = (\pm\pi, 0)$ et $\mathbf{k} = (0, \pm\pi)$. Cependant dans le cas que nous considérons, l'appariement supraconducteur entre ces points anti-nodaux n'est pas pertinent en raison de la présence de la phase de flux. Seuls les états situés au voisinage des points nodaux $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$ pourraient contribuer à l'apparition d'une phase supraconductrice, mais l'interaction effective BCS correspondante est essentiellement répulsive (voir la figure 14.1). Nous en concluons que si l'on considère uniquement les mécanismes magnétiques, aucune phase supraconductrice n'est prédite pour le modèle $t - J$. Ce résultat est en accord avec des études numériques récentes utilisant les méthodes de diagonalisation exacte [149]. Il suggère que dans le régime de faible dopage au moins, d'autres mécanismes doivent être pris en compte. Un candidat prometteur est l'interaction électron-phonon [187, 188], dont les effets ont été observés récemment dans des expériences d'ARPES [189].

Un autre aspect des résultats de ce travail concerne la symétrie du paramètre d'ordre. Nous montrons que l'appariement se produit dans une symétrie $d_{x^2-y^2}$, malgré le fait que les nœuds associés au voisinage de la surface de Fermi abaissent l'énergie de condensation supraconductrice, ce qui est énergétiquement défavorable. La présence de points nodaux dans les petites poches de trous est une conséquence directe de l'anomalie de parité introduite par la phase de flux. Cet aspect est absent de la théorie de spin-bag, puisque l'état considéré ne prend pas en compte les corrélations RVB. Une dernière remarque est que la forme du potentiel d'appariement que nous avons obtenue est compatible également avec une symétrie

p [190, 191]. Toutefois nous avons choisi de ne considérer que la symétrie d , qui a été identifiée expérimentalement dans de nombreux cuprates [153, 154], contrairement à la symétrie p .

Appendices - Partie I

Annexe A

Composition de représentations fondamentales dans le groupe $SU(3)$

L'un des problèmes auquel nous sommes confrontés concerne la construction des états de spin de l'impureté décrit par une représentation «en L» de symétrie mixte (cf. Figure 2.1), dans le cadre d'un groupe de Lie $SU(N)$. Ce problème sera traité dans l'appendice B qui suit.

Afin de nous familiariser avec les méthodes qui seront nécessaires pour résoudre ce problème, nous proposons dans cet appendice d'examiner un problème similaire, concernant la composition de représentations fondamentales dans le groupe $SU(3)$ [101]. Ce groupe a une importance particulière dans le domaine de la physique des particules, car il constitue le cadre de la théorie des quarks [192]. Plus précisément, nous écrivons en détail tous les états à deux et trois particules de ce groupe, générés par la composition de représentations fondamentales. Cela va nous permettre de mettre en évidence comment des états construits à partir d'un nombre différent de bosons et de fermions peuvent former les bases pour des représentations correspondant au même tableau de Young. Nous verrons également le rôle joué par les opérateurs des groupes supersymétriques $SU(3|3)$ et $SU(1|1)$, compte tenu de l'écriture mixte des états en terme d'opérateurs bosoniques et fermioniques.

La représentation fondamentale est associée à un tableau de Young à une seule boîte. Dans le groupe $SU(3)$ considéré ici, nous la noterons $\mathbf{3}$ à savoir

$$\mathbf{3} = \square$$

Parallèlement aux tableaux de Young, un outil très utile afin de décrire les états de la représentation est fourni par les diagrammes de poids. Dans $SU(3)$, la représentation fondamentale est de dimension 3 et nous lui associons un triangle, comme schématisé sur la Figure A.1. Chacun des sommets du triangle correspond à un état du multiplet, et les états sont reliés entre eux par les opérateurs descendants T^- , U^- et V^- . Nous notons les couleurs de spin dans $SU(3)$ a , b , et c , qui sont les analogues de \uparrow et \downarrow rencontrées dans le groupe $SU(2)$.

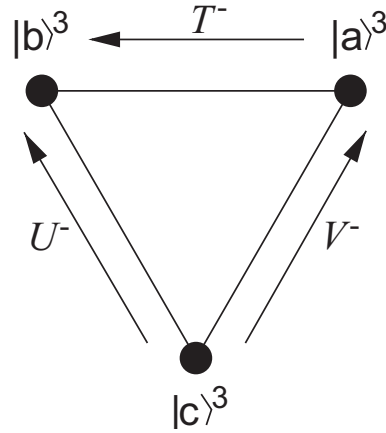


FIG. A.1 – Diagramme de poids pour la représentation fondamentale de $SU(3)$, faisant apparaître les 3 états aux sommets du triangle et les opérateurs descendants associés.

A.1 Composition de deux représentations fondamentales de $SU(3)$

Le produit direct de deux représentations fondamentales donne

$$\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = \mathbf{6} \oplus \bar{\mathbf{3}}. \quad (\text{A.1})$$

Chaque représentation est identifiée par sa dimension. De manière équivalente, nous avons en termes de tableaux de Young

$$\square \otimes \square = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}.$$

On veillera à ne pas confondre $\mathbf{3}$, la représentation fondamentale de $SU(3)$, avec $\bar{\mathbf{3}}$ qui est la représentation totalement antisymétrique associée à un tableau de Young avec deux boîtes dans la première colonne. Ces deux représentations ont la même dimension 3.

Les différents états formés dans le produit direct à deux particules $\mathbf{3} \otimes \mathbf{3}$ sont représentés sur la Figure A.2.

La représentation $\mathbf{6}$ est complètement symétrique, ses états s'écrivent donc en terme de bosons de Schwinger. Par exemple l'état de plus haut poids est

$$|aa\rangle_b^{\mathbf{6}} = \frac{1}{\sqrt{2!}} (b_a^\dagger)^2 |0\rangle.$$

La représentation $\bar{\mathbf{3}}$ est quant à elle complètement antisymétrique, et il est plus commode d'exprimer ses états en terme de pseudofermions d'Abrikosov. Pour l'état de plus haut poids, nous avons

$$|ab\rangle_f^{\bar{\mathbf{3}}} = f_a^\dagger f_b^\dagger |0\rangle.$$

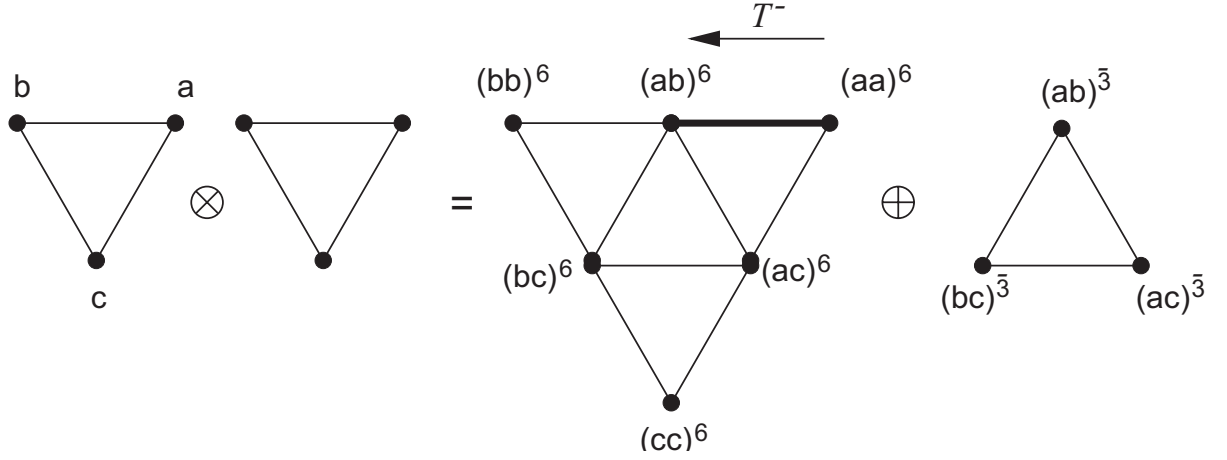


FIG. A.2 – Diagramme de poids pour les séries de Clebsch-Gordan du produit direct de deux représentations fondamentales dans le groupe $SU(3)$.

Les opérateurs descendants T^- , U^- et V^- qui relient les états entre eux peuvent être décrits par des combinaisons d'opérateurs bosoniques et fermioniques

$$T^- = (f_b^\dagger f_a + b_b^\dagger b_a) , \quad (\text{A.2})$$

$$U^- = (f_b^\dagger f_c + b_b^\dagger b_c) , \quad (\text{A.3})$$

$$V^- = (f_a^\dagger f_c + b_a^\dagger b_c) , \quad (\text{A.4})$$

On peut également formuler les états des multiplets $\mathbf{6}$ et $\bar{\mathbf{3}}$ en utilisant un boson et un fermion. L'état de plus haut poids de $\mathbf{6}$ est symétrique, et s'écrit donc

$$|aa\rangle_f^{\mathbf{6}} = f_a^\dagger b_a^\dagger |0\rangle .$$

Pour obtenir l'état de plus haut poids de $\bar{\mathbf{3}}$, nous devons d'abord trouver dans le multiplet $\mathbf{6}$ un état présentant les mêmes nombres quantiques. En faisant agir l'opérateur descendant T_{ab}^- (A.2) sur $|aa\rangle_f^{\mathbf{6}}$, nous obtenons

$$|ab\rangle_f^{\mathbf{6}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (f_b^\dagger b_a^\dagger + f_a^\dagger b_b^\dagger) |0\rangle ,$$

puis nous en déduisons l'état orthogonal à $|ab\rangle_f^{\mathbf{6}}$ ci-dessus

$$|ab\rangle_b^{\bar{\mathbf{3}}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (f_b^\dagger b_a^\dagger - f_a^\dagger b_b^\dagger) |0\rangle .$$

Cette construction est schématisée sur la figure A.2. On peut vérifier que les états de sous-indices b sont liés à ceux de sous-indice f par l'opérateur θ du groupe supersymétrique $SU(1|1)$

$$\theta = \sum_a b_a^\dagger f_a ,$$

ainsi

$$\theta |(\dots)\rangle_f = \sqrt{2} |(\dots)\rangle_b .$$

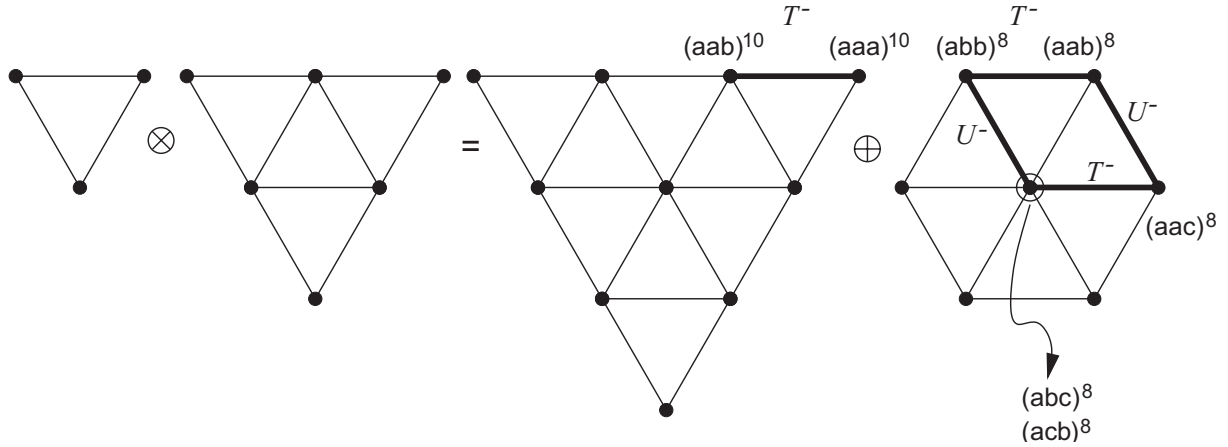


FIG. A.3 – Diagramme de poids pour les séries de Clebsch-Gordan du produit direct $\mathbf{3} \otimes \mathbf{6}$. Nous montrons certains des états et soulignons le processus d'obtention des coefficients de Clebsch-Gordan.

A.2 Composition de trois représentations fondamentales de $SU(3)$

Nous considérons maintenant les états à trois particules, formés dans la composition de trois représentations fondamentales de $SU(3)$. Le produit direct de ces trois représentations donne les séries de Clebsch-Gordan suivantes

$$\mathbf{3} \otimes \mathbf{3} \otimes \mathbf{3} = (\mathbf{3} \otimes \mathbf{6}) \oplus (\mathbf{3} \otimes \bar{\mathbf{3}}) = \mathbf{10} \oplus \mathbf{8}^1 \oplus \mathbf{8}^2 \oplus \mathbf{1} , \tag{A.5}$$

soit en terme de tableaux de Young

$$\begin{aligned} \square \otimes \square \otimes \square &= (\square \otimes \square \square) \oplus \left(\square \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right) \\ &= \square \square \square \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} . \end{aligned}$$

Les diagrammes de poids associés aux produits directs $\mathbf{3} \otimes \mathbf{6}$ et $\mathbf{3} \otimes \bar{\mathbf{3}}$ sont reportés sur les Figures A.3 et A.4, respectivement.

L'état le plus facile à écrire est celui de plus haut poids dans la représentation la plus symétrique, $\mathbf{10}$ (cf. Figure A.3)

$$|aaa\rangle^{\mathbf{10}} = |a\rangle^{\mathbf{3}} |aa\rangle^{\mathbf{6}} .$$

Il s'écrit facilement en terme de bosons

$$|aaa\rangle_b^{\mathbf{10}} = \frac{1}{\sqrt{3!}} (b_a^\dagger)^3 |0\rangle .$$

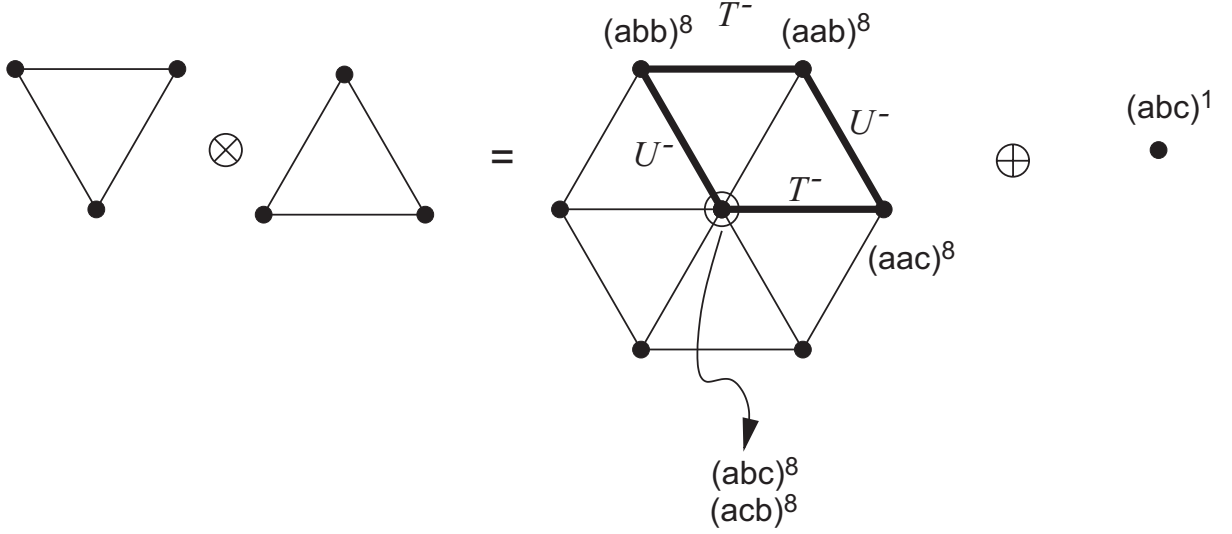


FIG. A.4 – Diagramme de poids pour les séries de Clebsch-Gordan du produit direct $\mathbf{3} \otimes \bar{\mathbf{3}}$.

Alternativement nous pouvons utiliser une combinaison d'un fermion (à partir de la représentation $\mathbf{3}$) et de deux bosons (à partir de $\mathbf{6}$)

$$|aaa\rangle_f^{10} = \frac{1}{\sqrt{2!}} f_a^\dagger (b_a^\dagger)^2 |0\rangle .$$

Les autres états de la représentation $\mathbf{10}$ s'obtiennent en répétant l'action des opérateurs descendants sur l'état précédent. Par exemple comme montré sur la figure A.3

$$|aab\rangle^{10} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2}|a\rangle^{\mathbf{3}}|ab\rangle^{\mathbf{6}} + |b\rangle^{\mathbf{3}}|aa\rangle^{\mathbf{6}}) , \quad (\text{A.6})$$

d'où nous avons

$$|aab\rangle_b^{10} = \frac{1}{\sqrt{2!}} (b_a^\dagger)^2 b_b^\dagger |0\rangle ,$$

$$|aab\rangle_f^{10} = \frac{1}{\sqrt{6}} (2f_a^\dagger b_a^\dagger b_b^\dagger + f_b^\dagger (b_a^\dagger)^2) .$$

Les deux octets $\mathbf{8}$ sont de symétrie mixte : ils doivent être construits en combinant bosons et fermions. Les séries de Clebsch-Gordan (A.5) indiquent que les états de $\mathbf{8}^1$, formés dans le produit direct $\mathbf{3} \otimes \mathbf{6}$ (cf. Figure A.3), sont naturellement construits en utilisant un fermion et deux bosons. Au contraire les états de $\mathbf{8}^2$ formés dans le produit direct $\mathbf{3} \otimes \bar{\mathbf{3}}$ (cf. Figure A.4) s'écrivent par combinaison d'un boson et deux fermions.

L'état de plus haut poids de l'octet $\mathbf{8}^1$, $|aab\rangle^{\mathbf{8}^1}$, est orthogonal à $|aab\rangle^{10}$ défini par l'équation (A.6)

$$|aab\rangle_b^{\mathbf{8}^1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (|a\rangle^{\mathbf{3}}|ab\rangle^{\mathbf{6}} - \sqrt{2}|b\rangle^{\mathbf{3}}|aa\rangle^{\mathbf{6}}) = \frac{1}{\sqrt{3}} b_a^\dagger (f_a^\dagger b_b^\dagger - f_a^\dagger b_b^\dagger) |0\rangle ,$$

en accord avec l'expression générale de l'état ψ_b (B.10) donnée dans l'appendice B. Les autres états de l'octet $\mathbf{8}^1$ sont construits en répétant l'action des opérateurs descendants T^- (A.2), U^- (A.3) et V^- (A.4) sur l'état précédemment introduit. Ainsi

$$\begin{aligned} |abc\rangle_b^{\mathbf{8}^1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} T^- |aac\rangle^{\mathbf{8}^1} \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|a\rangle^{\mathbf{3}} |bc\rangle^{\mathbf{6}} + |b\rangle^{\mathbf{3}} |ac\rangle^{\mathbf{6}} - 2|c\rangle^{\mathbf{3}} |ab\rangle^{\mathbf{6}}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} (f_a^\dagger b_b^\dagger b_c^\dagger + f_b^\dagger b_a^\dagger b_c^\dagger - 2f_c^\dagger b_a^\dagger b_b^\dagger) |0\rangle . \end{aligned}$$

L'état $|abc\rangle_b^{\mathbf{8}^1}$ est dégénéré, puisqu'il existe un autre état dans le même multiplet caractérisé par des nombres quantiques identiques. On trouve ce dernier état, $|acb\rangle^{\mathbf{8}^1}$, en combinant l'action des opérateurs descendants et la propriété d'orthogonalité avec l'état $|abc\rangle^{\mathbf{8}^1}$. L'action de U^- sur $|abb\rangle^{\mathbf{8}^1}$ donne un état qui n'est pas orthogonal à $|abc\rangle^{\mathbf{8}^1}$. Par conséquent, nous écrivons

$$U^- |abb\rangle^{\mathbf{8}^1} = \sqrt{2} (\alpha |abc\rangle^{\mathbf{8}^1} + \beta |acb\rangle^{\mathbf{8}^1}) .$$

Il existe deux façons d'atteindre les états de nombres quantiques $\{abc\}$ en partant de $|aab\rangle^{\mathbf{8}^1}$. En utilisant de plus

$$[T^+, U^-] = 0 ,$$

avec $T^+ = (T^-)^\dagger$, nous en déduisons α

$$\begin{aligned} 2\alpha &= \sqrt{2} \mathbf{8}^1 \langle abc | U^- | abb \rangle^{\mathbf{8}^1} = \mathbf{8}^1 \langle aac | T^+ U^- T^- | aab \rangle^{\mathbf{8}^1} \\ &= \mathbf{8}^1 \langle aab | U^+ T^+ U^- T^- | aab \rangle^{\mathbf{8}^1} \\ &= \mathbf{8}^1 \langle aab | T^+ T^- U^+ U^- | aab \rangle^{\mathbf{8}^1} \\ &= 1 . \end{aligned}$$

Il en résulte $\alpha = 1/2$ et $\beta = \sqrt{3}/2$. L'expression du dernier état $|acb\rangle_b^{\mathbf{8}^1}$ de l'octet est donnée par

$$\begin{aligned} |acb\rangle_b^{\mathbf{8}^1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|a\rangle^{\mathbf{3}} |bc\rangle^{\mathbf{6}} - |b\rangle^{\mathbf{3}} |ac\rangle^{\mathbf{6}}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (f_a^\dagger b_b^\dagger b_c^\dagger - f_b^\dagger b_a^\dagger b_c^\dagger) |0\rangle . \end{aligned}$$

Pour résumer, la méthode utilisée pour construire les états consiste à partir de l'état de plus haut poids $|aab\rangle_b$ formulé dans la représentation bosonique Ψ_b , puis à dériver les autres états de l'octet suivant la construction précédente, permettant de dériver les coefficients de Clebsch-Gordan impliqués dans le produit direct $\mathbf{3} \otimes \mathbf{6}$.

Nous considérons maintenant le deuxième multiplet $\mathbf{8}^2$ formé dans le produit direct $\mathbf{3} \otimes \bar{\mathbf{3}}$, représenté sur la Figure A.4. L'état de plus haut poids est

$$|aab\rangle_f^{\mathbf{8}^2} = |a\rangle^{\mathbf{3}} |ab\rangle^{\bar{\mathbf{3}}} = b_a^\dagger f_a^\dagger f_b^\dagger |0\rangle ,$$

$$\begin{array}{ccc}
n_b = 3, n_f = 0 & 10 & \begin{array}{|c|c|c|} \hline b & b & b \\ \hline \end{array} \\
& & \begin{array}{c} Z_{ab}^- \downarrow \quad \searrow \theta^\dagger \end{array} \\
n_b = 2, n_f = 1 & 8^1 & \begin{array}{|c|c|} \hline b & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array} & 10' & \begin{array}{|c|c|c|} \hline f & b & b \\ \hline \end{array} \\
& & \begin{array}{c} Z_{ac}^- \downarrow \quad \searrow \theta^\dagger \end{array} \\
n_b = 1, n_f = 2 & 1' & \begin{array}{|c|} \hline b \\ \hline f \\ \hline f \\ \hline \end{array} & 8^2 & \begin{array}{|c|c|} \hline f & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array} \\
& & \searrow \theta^\dagger \\
n_b = 0, n_f = 3 & & & 1 & \begin{array}{|c|} \hline f \\ \hline f \\ \hline f \\ \hline \end{array}
\end{array}$$

FIG. A.5 – Etats vérifiant $Q = (n_b + n_f)$, regroupés suivant les représentations de $SU(3)$.

en accord avec l'expression générale de ψ_f (B.11) donnée dans l'appendice B. La construction des autres états de ce multiplet est analogue à celle utilisée pour l'octet précédent $\mathbf{8}^1$. Par exemple

$$\begin{aligned}
|abc\rangle_f^{\mathbf{8}^2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle^{\mathbf{3}}|bc\rangle^{\bar{\mathbf{3}}} - |b\rangle^{\mathbf{3}}|ca\rangle^{\bar{\mathbf{3}}}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(b_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger - b_b^\dagger f_c^\dagger f_a^\dagger)|0\rangle,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|acb\rangle_f^{\mathbf{8}^2} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|a\rangle^{\mathbf{3}}|bc\rangle^{\bar{\mathbf{3}}} + |b\rangle^{\mathbf{3}}|ca\rangle^{\bar{\mathbf{3}}} - 2|c\rangle^{\mathbf{3}}|ab\rangle^{\bar{\mathbf{3}}}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}(b_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger + b_b^\dagger f_c^\dagger f_a^\dagger - 2b_c^\dagger f_a^\dagger f_b^\dagger)|0\rangle.
\end{aligned}$$

L'état singulet $|abc\rangle^{\mathbf{1}}$ est construit par orthogonalité avec les états $|abc\rangle^{\mathbf{8}^2}$ et $|acb\rangle^{\mathbf{8}^2}$

$$|abc\rangle^{\mathbf{1}} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|a\rangle^{\mathbf{3}}|bc\rangle^{\bar{\mathbf{3}}} + |b\rangle^{\mathbf{3}}|ca\rangle^{\bar{\mathbf{3}}} + |c\rangle^{\mathbf{3}}|ab\rangle^{\bar{\mathbf{3}}}), \quad (\text{A.7})$$

en accord avec l'expression générale (B.2) des états dans la représentation complètement antisymétrique, obtenue dans l'appendice B. La façon la plus simple de réaliser cet état est d'utiliser trois fermions

$$|abc\rangle_f^{\mathbf{1}} = f_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger |0\rangle. \quad (\text{A.8})$$

Toutefois cet état peut aussi s'écrire à l'aide d'un boson et de deux fermions

$$|abc\rangle_b^{\mathbf{1}} = \frac{1}{\sqrt{3}}(b_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger + b_b^\dagger f_c^\dagger f_a^\dagger + b_c^\dagger f_a^\dagger f_b^\dagger) .$$

Comme pour le produit direct de deux représentations dans la section A.1 précédente, les deux bases d'états correspondant au même tableau de Young, de sous-indices b et f , sont reliés par les opérateurs supersymétriques θ^\dagger et θ du groupe $SU(1|1)$.

Nous avons ainsi montré comment construire les états à trois particules pour les différentes représentations de $SU(3)$. Cela revient à calculer les coefficients de Clebsch-Gordan, dont les valeurs sont récapitulées dans les Tableaux 3.1-3.4 de l'appendice B dans le cas général du groupe $SU(N)$, pour N quelconque.

Faisons maintenant quelques commentaires concernant le nombre d'états. Le produit direct de trois représentation fondamentales de $SU(3)$ génère un espace de dimension 27, qui se décompose en une somme directe de représentations irréductibles suivant les séries de Clebsch-Gordan données par l'équation (A.5). En considérant toutes les réalisations possibles de ces états en terme de fermions et bosons soumis à la contrainte sur le nombre total de particules $Q = n_f + n_b = 3$, nous sommes amenés à travailler dans un sous-espace du groupe $SU(3|3)$, de dimension supérieure puisqu'il inclut 38 états linéairement indépendants (voir la figure A.5). Cette figure reporte également les relations entre ces états avec l'introduction d'un opérateur supersymétrique supplémentaire $Z_{ar_q}^-$ agissant sur les états de plus haut poids

$$Z_{ar_q}^- = f_{r_q}^\dagger b_a$$

Les états des multiplets $\mathbf{10}$ et $\mathbf{10}'$ (comme $\mathbf{1}$ et $\mathbf{1}'$) sont identiques pour ce qui concerne la symétrie $SU(3)$. Il n'en est pas de même pour les états des octets $\mathbf{8}^1$ et $\mathbf{8}^2$, qui correspondent à des représentations de spin différentes même si les tableaux de Young associés sont les mêmes. Finalement, nous retrouvons bien le total des 27 états linéairement indépendants auquel on s'attend.

Annexe B

Etats de spin de l'impureté

Dans cet appendice, nous dérivons les expressions des états de spin de l'impureté. Afin de rendre compte de la symétrie mixte caractérisant la représentation en L (cf. Figure 2.1), ces états seront formulés en terme de combinaisons de bosons de Schwinger [104, 105] et de pseudofermions d'Abrikosov [106].

Comme dans l'appendice A, nous utiliserons largement le formalisme des tableaux de Young. Cela nous donnera un cadre simple pour à la fois décrire les propriétés de symétrie des différents états, et étudier la généralisation au groupe $SU(N)$ des règles de composition des différentes représentations de spin.

Avant d'envisager le cas général d'une représentation de spin «en L » en termes de tableaux de Young, caractérisée par une symétrie mixte, nous considérons d'abord les deux limites correspondant à des représentations complètement symétrique et antisymétrique, respectivement.

B.1 Représentation complètement symétrique

Nous considérons d'abord un spin du groupe $SU(N)$, dont la représentation est purement symétrique.

Le cas d'une représentation complètement symétrique est équivalent à un système de $2S$ particules identiques, symétrique par permutation de deux d'entre elles. Le tableau de Young associé à une telle représentation est constitué d'une ligne horizontale de $2S$ boîtes

$$\overbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}^{2S} \longleftrightarrow \sum_{P \in S_{2S}} P ,$$

qu'on notera $[2S]$. Au tableau de Young précédent est associé un opérateur de symétrisation, constitué par la somme de toutes les permutations sur les $2S$ particules.

Les opérateurs de spin correspondants peuvent s'écrire en termes de N types de bosons de Schwinger [104, 105] b_α ($\alpha = a, b, \dots, r_N$) soumis à la contrainte sur le nombre total de

particules

$$\hat{n}_b = \sum_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} = 2S .$$

Les $(N^2 - 1)$ composantes de l'opérateur de spin sont données par

$$\mathbf{S}_b^A = \sum_{\alpha\beta} b_{\alpha}^{\dagger} \tau_{\alpha\beta}^A b_{\beta},$$

où $\{\tilde{\tau}^A\}$ sont les matrices des générateurs de $SU(N)$ dans la représentation fondamentale.

L'état de plus haut poids, analogue à l'état de plus grande valeur de projection \hat{S}^z dans $SU(2)$, s'écrit comme

$$|(a)^{2S}\rangle^{[2S]} = \frac{1}{\sqrt{(2S)!}} (b_a^{\dagger})^{2S} |0\rangle , \quad (\text{B.1})$$

où $|0\rangle$ est l'état vide de bosons. Les autres états de la représentation symétrique se déduisent de $|(a)^{2S}\rangle^{[2S]}$ par l'action répétée des opérateurs descendants du groupe $SU(2)$ sous-jacent à $SU(N)$, pour $N \geq 2$. En considérant par exemple dans $SU(N)$ les $(2S + 1)$ états définis par $\{|(a)^x(b)^y\rangle^{[2S]}\}$ avec $x + y = 2S$, ces états se transforment par action des opérateurs de $SU(N)$ suivants

$$T_{ab}^{-} = b_b^{\dagger} b_a , \quad T_{ab}^{+} = b_a^{\dagger} b_b , \quad T_{ab}^z = \frac{b_a^{\dagger} b_a - b_b^{\dagger} b_b}{2} ,$$

comme un multiplet de $SU(2)$ de spin S . En particulier nous avons

$$T_{ab}^{-} |(a)^{2S}\rangle^{[2S]} = \sqrt{2S} |(a)^{2S-1}b\rangle ,$$

soit en termes de bosons

$$|(a)^{2S-1}b\rangle^{[2S]} = \frac{1}{\sqrt{(2S-1)!}} (b_a^{\dagger})^{(2S-1)} b_b^{\dagger} |0\rangle .$$

Nous donnons maintenant quelques précisions concernant la notation des états de la représentation. Chacun des états est identifié sans ambiguïté par un jeu de nombre quantiques $\{\alpha, \beta, \dots, \rho_{2S}\}$: à chaque jeu correspond un seul état. Chacun des nombres quantiques peut prendre indépendamment n'importe quelle valeur entière entre 1 et N , généralisant ainsi les deux couleurs de spin \uparrow et \downarrow de $SU(2)$. La dimension de la représentation est donc donnée par C_{N+2S-1}^{2S} , correspondant au nombre de façons de choisir $2S$ éléments parmi $(N + 2S - 1)$.

B.2 Représentation complètement antisymétrique

L'autre cas limite considéré correspond à une représentation purement antisymétrique du spin dans le groupe $SU(N)$.

Ce cas est équivalent à un système de q particules identiques, antisymétrique par permutation de deux d'entre elles. Le tableau de Young associé est constitué d'une seule colonne

comprenant q boîtes

$$q \left\{ \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right\} \longleftrightarrow \sum_{P \in S_q} \delta_P P ,$$

notée $[1^q]$, avec $q < N$. Un opérateur d'antisymétrisation est associé au tableau de Young ci-dessus. Il est constitué de la somme de toutes les permutations possibles de q éléments parmi N , chaque permutation étant pondérée par sa signature $\delta_P = \pm 1$ comme pour des particules identiques antisymétriques.

Le moyen le plus approprié pour décrire les états de spin correspondants est d'avoir recours à N types de pseudofermions d'Abrikosov [106] f_α ($\alpha = a, b, \dots, r_N$) soumis à la contrainte sur le nombre total de particules

$$\hat{n}_f = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{\dagger} f_{\alpha} = q .$$

Les $(N^2 - 1)$ composantes de l'opérateur de spin sont alors

$$\mathbf{S}_f^A = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha}^{\dagger} \boldsymbol{\tau}_{\alpha\beta}^A f_{\beta}$$

Similairement à (B.1), l'état de plus haut poids de la représentation fermionique est donné par

$$|ab\dots r_q\rangle^{[1^q]} = f_a^{\dagger} f_b^{\dagger} \dots f_{r_q}^{\dagger} |0\rangle \quad (\text{B.2})$$

identifié par un jeu de q nombres quantiques $\{a, b, \dots, r_q\}$. Les autres états de la représentation se déduisent de l'état de plus haut poids (B.2) par l'action répétée des opérateurs descendants de $SU(N)$ comme

$$T_{ab}^{-} = f_b^{\dagger} f_a ,$$

tirant parti du groupe $SU(2)$ sous-jacent. La dimension de la représentation fermionique est C_N^q .

B.3 Représentation de symétrie mixte

Nous considérons maintenant la représentation de symétrie mixte décrite par un tableau de Young «en L», s'interpolant entre les deux représentations limites précédentes (cf. Figure (2.1)).

Une différence essentielle entre d'une part les deux représentations purement symétrique et antisymétrique considérées précédemment et d'autre part la représentation de symétrie mixte que nous traitons ici concerne la dégénérescence des états. En effet les états correspondant aux représentations bosonique et fermionique sont non dégénérés. Cela signifie que chaque jeu de nombres quantiques détermine un état de manière univoque. Nous allons voir que cette propriété n'est plus valable dans le cas de la représentation mixte.

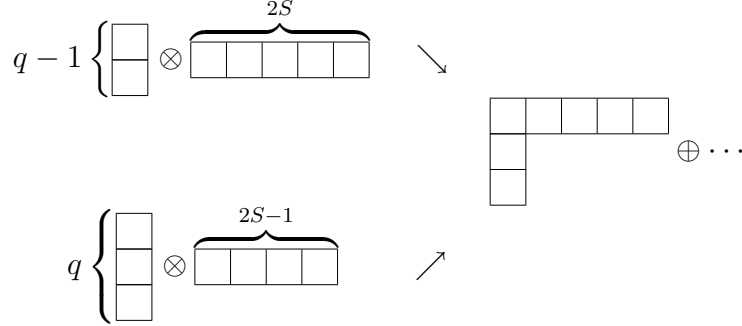


FIG. B.1 – Deux façons d’obtenir la représentation en $L [2S, 1^{q-1}]$ du groupe $SU(N)$, à partir du produit direct de deux représentations respectivement fermionique et bosonique.

La dimension de la représentation mixte s’obtient au moyen de la formule de Robinson [193]

$$d_{\{\Gamma\}} = \frac{2S}{2S + q - 1} C_{N+2S-1}^{2S} C_{N-1}^{q-1}.$$

B.3.1 Description des états de plus haut poids

La représentation «en L» résulte du produit direct de deux représentations, respectivement symétrique et antisymétrique

$$[1^{q-1}] \otimes [2S] \rightarrow [2S, 1^{q-1}] \oplus \dots \quad (\text{B.3})$$

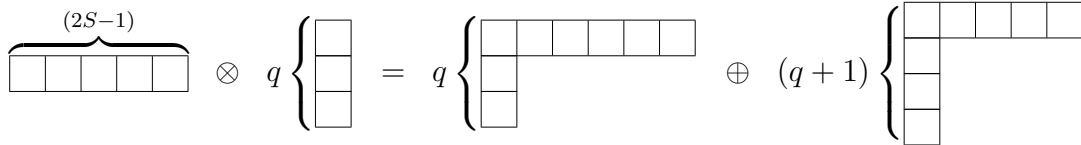
$$\text{ou } [1^q] \otimes [2S - 1] \rightarrow [2S, 1^{q-1}] \oplus \dots \quad (\text{B.4})$$

comme illustré sur la figure B.1.

En effet, le produit direct de deux représentations irréductibles du groupe $SU(N)$ se décompose en une somme directe de représentations irréductibles. Il s’agit de la série de Clebsch-Gordan. Un exemple bien connu est fourni par la composition de moments angulaires dans le groupe $SU(2)$ [194]. Nous suivons une méthode calquée sur celle de l’appendice A afin de construire les états de la représentation mixte faisant apparaître les coefficients de Clebsch-Gordan.

Plus précisément, nous identifions l’état de plus haut poids (non dégénéré) résultant du produit direct de deux représentations respectivement fermionique et bosonique, avec l’état de plus haut poids de la représentation la plus symétrique. Les autres états de la représentation s’obtiennent par actions répétées des opérateurs descendants de $SU(N)$ sur l’état de plus haut poids. Une difficulté supplémentaire vient du fait que pour N arbitraire, plusieurs états peuvent être identifiés par le même jeu de nombres quantiques, problème que l’on a déjà rencontré dans l’appendice A avec l’existence des deux l’octets $\mathbf{8}^1$ et $\mathbf{8}^2$ de $SU(3)$. Finalement, nous dérivons les états de poids inférieur en recherchant les états orthogonaux identifiés par le même jeu de nombres quantiques, puis en faisant agir de façon répétée les opérateurs descendants.

Le produit direct des deux représentations respectivement symétrique et antisymétrique dans le groupe $SU(N)$ peut s'écrire comme la somme directe de deux représentations «en L», selon les séries de Clebsch-Gordan suivantes

$$[2S-1] \otimes [1^q] = [2S, 1^{q-1}] \oplus [2S-1, 1^q]$$


avec la relation suivante entre leurs dimensions

$$C_{N+2S-2}^{2S-1} C_N^q = \frac{2S}{2S+q-1} C_{N+2S-1}^{2S} C_{N-1}^{q-1} + \frac{2S-1}{2S+q-1} C_{N+2S-2}^{2S-1} C_{N-1}^q .$$

Nous écrivons maintenant explicitement les états de spin composant les représentations «en L» précédentes.

L'état le plus symétrique (de plus haut poids) du produit direct $[2S-1] \otimes [1^q]$ est

$$|(a)^{2S-1}\rangle^{[2S-1]} |abc \dots r_q\rangle^{[1^q]} ,$$

formé de $2S$ particules portant le même nombre quantique a . Cet état (non dégénéré) est aussi l'état de plus haut poids de la représentation la plus symétrique, à savoir $[2S, 1^{q-1}]$,

$$|(a)^{2S}bc \dots r_q\rangle^{[2S, 1^{q-1}]} = |(a)^{2S-1}\rangle^{[2S-1]} |abc \dots r_q\rangle^{[1^q]} . \quad (\text{B.5})$$

Notons que les opérateurs descendants qui transforment le nombre quantique a en $\delta \in [b, r_q]$ n'affectent que l'état de $[2S-1]$, puisque le terme $[1^q]$ est complètement antisymétrique. Ainsi les états suivants sont également non dégénérés

$$|(a)^{2S-1}bc \dots (\delta)^2 \dots r_q\rangle^{[2S, 1^{q-1}]} = |(a)^{2S-2}\delta\rangle^{[2S-1]} |abc \dots r_q\rangle^{[1^q]} . \quad (\text{B.6})$$

Les autres états caractérisés par $2S$ nombres quantiques α_j égaux à a s'obtiennent à partir de l'équation (B.5). Ils sont également non dégénérés. Par exemple l'état où r_{q+1} remplace la valeur r' est

$$|(a)^{2S}bcd \dots r_q r_{q+1}(\text{no } r')\rangle^{[2S, 1^{q-1}]} = |(a)^{2S-1}\rangle^{[2S-1]} |abcd \dots r_q r_{q+1}(\text{no } r')\rangle^{[1^q]} . \quad (\text{B.7})$$

En restreignant les valeurs des α_j à l'intervalle $[a, r_{q+1}]$, on trouve q états du type (B.7) précédent.

Nous construisons ensuite les états composant la représentation $[2S, 1^{q-1}]$ où $(2S-1)$ nombres quantiques α_j prennent maintenant la valeur a , les autres prenant des valeurs distinctes situées dans l'intervalle $[b, r_{q+1}]$. Il existe q états linéairement indépendants de ce type. Nous définissons pour cela l'opérateur T_{ac}^-

$$T_{ac}^- = f_c^\dagger f_a + b_c^\dagger b_a$$

par analogie avec le générateur de $SU(3)$ considéré dans l'appendice A. En faisant agir T_{ac}^- sur l'état (B.7) nous obtenons

$$\begin{aligned} T_{ac}^- |(a)^{2S} bcd \dots r_q r_{q+1} (no r') \rangle^{[2S, 1^{q-1}]} &= \sqrt{2S} |(a)^{2S-1} bcd \dots r_q r_{q+1} \rangle^{[2S, 1^{q-1}]} \\ &= \sqrt{2S-1} |(a)^{2S-2} r' \rangle^{[2S-1]} |abc \dots r_q r_{q+1} (no r') \rangle^{[1^q]} \\ &\quad + |(a)^{2S-1} \rangle^{[2S-1]} |bcd \dots r_q r_{q+1} \rangle^{[1^q]} . \end{aligned} \quad (B.8)$$

L'orthogonalisation des q états (B.8) permet de dériver les q premières lignes du Tableau 3.4 des coefficients de Clebsch-Gordan (voir le Chapitre 3). La dernière ligne de ce tableau correspond à un état caractérisé par les mêmes nombre quantiques $((a)^{2S-1} bcd \dots r_q r_{q+1})$, et orthogonal à tous les états de la représentation $[2S, 1^q]$. Cet état est l'état de plus haut poids de $[2S-1, 1^q]$. Son expression est donc la suivante

$$\begin{aligned} &|(a)^{2S-1} bcd \dots r_q r_{q+1} \rangle^{[2S-1, 1^q]} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2S+q-1}} \left[\sqrt{2S-1} |(a)^{2S-1} \rangle^{[2S-1]} |bcd \dots r_q \rangle^{[1^q]} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\beta=b}^{r_q} (-1)^{\delta_{a,\beta}} |(a)^{2S-2} \beta \rangle^{[2S-1]} |bc \dots r_q (no \beta) \rangle^{[1^q]} \right] . \end{aligned} \quad (B.9)$$

Finalement, nous pouvons exprimer les états de plus haut poids (B.6) et (B.9) apparaissant dans les séries de Clebsch-Gordan (B.3) et (B.4) en terme de bosons de Schwinger et de pseudofermions d'Abrikosov

$$\begin{aligned} \psi_b &= |(a)^{2S} b \dots r_q \rangle^{[2S, 1^{q-1}]} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2S+q-1}} \frac{(b_a^\dagger)^{2S-1}}{\sqrt{(2S-1)!}} \mathcal{A}(b_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger \dots f_{r_q}^\dagger) |0\rangle , \end{aligned} \quad (B.10)$$

$$\begin{aligned} \psi_f &= |(a)^{2S} b \dots r_q \rangle^{[2S, 1^{q-1}]} \\ &= \frac{(b_a^\dagger)^{2S-1}}{\sqrt{(2S-1)!}} (f_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger \dots f_{r_q}^\dagger) |0\rangle , \end{aligned} \quad (B.11)$$

où ψ_b (ψ_f) correspond à l'état caractérisé par un boson (fermion) au coin du tableau de Young, et $\mathcal{A}(\dots)$ est l'opérateur d'antisymétrisation. Comme les équations (B.10) et (B.11) le montrent, les états ψ_b s'écrivent à l'aide de $2S$ bosons et $(q-1)$ fermions, tandis que les états ψ_f sont réalisés par combinaison de $(2S-1)$ bosons et de q fermions.

B.3.2 Dérivation des deux contraintes caractérisant la représentation de symétrie mixte

L'opérateur de spin d'une impureté de symétrie mixte est donné par

$$S = \sum_{A=1}^{N^2-1} \sum_{\alpha\beta=1}^N (b_\alpha^\dagger \tau_{\alpha\beta}^A b_\beta + f_\alpha^\dagger \tau_{\alpha\beta}^A f_\beta)$$

et est indépendant de $2S$ et de q . Deux contraintes sont nécessaires afin de déterminer parfaitement la représentation $[2S, 1^{q-1}]$ que l'on considère.

La première contrainte concerne le nombre total de particules utilisées pour écrire les états de la représentation

$$\hat{Q} = (\hat{n}_f + \hat{n}_b) = (2S + q - 1) . \quad (\text{B.12})$$

où $Q = (2S + q - 1)$ est le nombre total de boîtes constituant le tableau de Young associé à la représentation «en L». Dans les cas limites bosonique et fermionique discutés dans les sections B.1 et B.2, respectivement, cette contrainte est la seule nécessaire. Dès lors que le valeur de Q est fixée, la représentation est complètement déterminée.

Il n'en est plus de même lorsque la représentation est généralisée à une symétrie mixte. Il est alors nécessaire d'introduire une seconde contrainte afin d'identifier les états possédant la symétrie envisagée. Notons que l'ensembles d'états ψ_b et ψ_f forment une base pour les représentations d'un groupe élargi $SU(N|N)$, appelée groupe supersymétrique. Les générateurs de ce groupe supersymétrique s'obtiennent par combinaison linéaire des opérateurs $b_\alpha^\dagger b_\beta$, $f_\alpha^\dagger f_\beta$, $b_\alpha^\dagger f_\beta$, $f_\alpha^\dagger b_\beta$. Ainsi toutes les représentations de symétrie mixte, qui s'interpolent entre les cas purement symétrique et antisymétrique, sont reliées entre elles par les opérateurs du groupe supersymétrique. Les contraintes fixant la représentation «en L» dans le groupe $SU(N)$ sont obtenues à partir des opérateurs de $SU(N|N)$ diagonaux en spin, tels que

$$\hat{n}_b = \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha^\dagger b_\alpha , \quad \hat{n}_f = \sum_{\alpha=1}^N f_\alpha^\dagger f_\alpha , \quad (\text{B.13})$$

$$\theta = \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha^\dagger f_\alpha , \quad \theta^\dagger = \sum_{\alpha=1}^N f_\alpha^\dagger b_\alpha . \quad (\text{B.14})$$

Considérons par exemple l'action de l'opérateur θ^\dagger sur l'état ψ_b

$$\theta^\dagger (b_a^\dagger)^{2S-1} \mathcal{A}(b_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger \dots f_{r_q}^\dagger) |0\rangle = (2S + q - 1) (b_a^\dagger)^{2S-1} (f_a^\dagger f_b^\dagger f_c^\dagger \dots f_{r_q}^\dagger) |0\rangle .$$

où le membre de droite correspond à ψ_f . Cela conduit aux relations suivantes

$$\begin{aligned} \theta^\dagger \psi_b &= \sqrt{2S + q - 1} \psi_f , \\ \theta \psi_f &= \sqrt{2S + q - 1} \psi_b . \end{aligned}$$

Les opérateurs θ et θ^\dagger relient les différents états se transformant dans une représentation de $SU(N)$ donnée. Notons aussi que

$$\theta^\dagger \psi_f = \theta \psi_b = 0 .$$

Les opérateurs \hat{Q} , θ et θ^\dagger vérifient la relation

$$\{\theta, \theta^\dagger\} = \hat{Q} ,$$

et forment le groupe supersymétrique $SU(1|1)$ [92]. On peut alors définir les opérateurs de projection

$$P_b = \frac{1}{Q}\theta\theta^\dagger, \quad P_f = \frac{1}{Q}\theta^\dagger\theta$$

sur les états bosoniques ψ_f et fermioniques ψ_b , respectivement. Ces états ψ_b (B.10) et ψ_f (B.11) sont les analogues des états formant les deux octets $\mathbf{8}^1$ et $\mathbf{8}^2$, résultant de la composition de trois représentations fondamentales dans $SU(3)$ (voir l'Appendice A).

Nous pouvons maintenant dériver la seconde contrainte caractérisant la représentation symétrie mixte. Cette contrainte résulte de l'invariance de l'opérateur quadratique de Casimir $\hat{\mathcal{C}}_2$ (cf. Section 2.2.1.a), généralisant au groupe $SU(N)$ l'opérateur $\mathbf{S}^2 = S(S+1)$ utilisé dans $SU(2)$. Cet opérateur $\hat{\mathcal{C}}_2$ prend la forme suivante

$$\mathcal{C}_2(\hat{R}) = \sum_{A=1}^{N^2-1} \mathbf{S}^A \mathbf{S}^A = \frac{1}{2} \left[\hat{Q} \left(N - \frac{\hat{Q}}{N} \right) - \hat{\mathcal{Y}} \right], \quad (\text{B.15})$$

où $\hat{\mathcal{Y}} = \hat{Q}(\hat{n}_f - \hat{n}_b) + [\theta, \theta^\dagger]$ est une combinaison linéaire de \hat{n}_f , \hat{n}_b , θ et θ^\dagger . Dès lors que la première contrainte (B.12) est satisfaite, l'invariance de l'opérateur quadratique de Casimir est garantie si et seulement si l'opérateur $\hat{\mathcal{Y}}$ est aussi invariant. Nous en déduisons la deuxième contrainte

$$\hat{\mathcal{Y}} = Q(q - 2S). \quad (\text{B.16})$$

La valeur propre de l'opérateur $\hat{\mathcal{Y}}$ sera notée Y . On vérifie aisément que chacun des opérateurs θ et θ^\dagger commutent avec \hat{Q} et $\hat{\mathcal{Y}}$, assurant que les deux contraintes sont bien compatibles avec l'algèbre supersymétrique $SU(1|1)$. Il existe un autre moyen de décrire la deuxième contrainte [92], à l'aide de l'opérateur $\hat{\mathcal{Y}}'$

$$\hat{\mathcal{Y}}' = \hat{n}_f - \hat{n}_b + \frac{1}{Q}[\theta, \theta^\dagger]. \quad (\text{B.17})$$

Toutefois ce dernier opérateur ne vérifie pas les relations de commutation mentionnées auparavant, et donc n'assure pas la compatibilité des deux contraintes avec le groupe $SU(1|1)$.

Ainsi les deux contraintes, données par les expressions (B.12) et (B.16), déterminent complètement la représentation. Cependant elles ne permettent pas de différencier les états ψ_b des états ψ_f , caractérisés respectivement par un boson et un fermion au coin du tableau de Young. Cela ne constitue pas un problème, dans la mesure où les propriétés physiques du système ne dépendent que de la représentation (à savoir de la forme du tableau de Young) considérée, et non pas de la base que l'on choisit pour en décrire les états.

Dans la section 2.2.1.b où nous écrivons explicitement l'état fondamental de couplage fort, nous avons choisi par commodité de travailler avec des états de type ψ_b , décrits comme une combinaison linéaire de $2S$ opérateurs bosoniques et de $(q-1)$ opérateurs fermioniques.

Appendices - Partie II

Annexe C

Propriétés des générateurs du groupe $SU(N)$

Pour notre étude nous devons considérer deux représentations du groupe $SU(N)$: une associée au spin des électrons de conduction, et une autre beaucoup plus générale associée au spin de l'impureté. Dans cet appendice nous donnons quelques propriétés utiles aux calculs suivies par les générateurs placés dans ces deux représentations.

C.1 Représentation des électrons de conduction

La première représentation correspond au spin des électrons de conduction, il s'agit de la représentation fondamentale (à une seule boîte en terme de tableau de Young) $\{\sigma\}$ représentée sur la figure 7.2. Sa dimension est

$$d_{\{\sigma\}} = N, \quad (\text{C.1})$$

et la valeur propre de l'opérateur quadratique de Casimir associé à $\{\sigma\}$ est

$$C_2(\{\sigma\}) = \frac{N^2 - 1}{2N}, \quad (\text{C.2})$$

qui dans le cas d'un spin 1/2 de $SU(2)$ prend la valeur bien connue: $1/2(1/2+1)$.

Les matrices hermitiennes de trace nulle $\{\tilde{\sigma}^A\}_{1 \leq A \leq N^2-1}$ associées aux générateurs de $SU(N)$ dans la représentation $\{\sigma\}$ obéissent aux propriétés suivantes

$$- \text{ loi de multiplication: } \tilde{\sigma}^A \tilde{\sigma}^B = \frac{1}{2N} \delta_{AB} \tilde{I}_{\{\sigma\}} + \frac{1}{2} \sum_{C=1}^{N^2-1} (\mathbf{d}^{ABC} + i\mathbf{f}^{ABC}) \tilde{\sigma}^C, \quad (\text{C.3})$$

$$- \text{ normalisation: } \text{Tr}[\tilde{\sigma}^A \tilde{\sigma}^B] = \frac{1}{2} \delta_{AB}, \quad (\text{C.4})$$

$$- \text{ relation de fermeture: } \sum_{A=1}^{N^2-1} \sigma_{\alpha,\beta}^A \sigma_{\gamma,\delta}^A = \frac{1}{2} \left(\delta_{\alpha,\delta} \delta_{\beta,\gamma} - \frac{1}{N} \delta_{\alpha,\beta} \delta_{\gamma,\delta} \right), \quad (\text{C.5})$$

où A, B and C sont les indices des matrices de générateurs de $SU(N)$ ($1 \leq A, B, C \leq N^2 - 1$), $\tilde{\mathbf{I}}_{\{\sigma\}}$ est la matrice identité ($N \times N$), α, β, γ et δ sont les couleurs de spin électronique ($1 \leq \alpha, \beta, \gamma, \delta \leq N$), et \mathbf{d}^{ABC} et \mathbf{f}^{ABC} sont les constantes de structure composant les tenseurs de Gell-Mann $\tilde{\mathbf{d}}$ et $\tilde{\mathbf{f}}$ [195], respectivement. Ces tenseurs suivent les propriétés

- $\tilde{\mathbf{d}}$ est totalement symétrique: $\mathbf{d}^{ABC} = \mathbf{d}^{BAC}$,
- $\tilde{\mathbf{f}}$ est totalement antisymétrique: $\mathbf{f}^{ABC} = -\mathbf{f}^{BAC}$,
- $\tilde{\mathbf{d}}$ and $\tilde{\mathbf{f}}$ sont des tenseurs de trace nulle: $\sum_{A,B} \mathbf{d}^{ABB} = \sum_{A,B} \mathbf{f}^{ABB} = 0$.

Dans le groupe $SU(2)$, $\tilde{\mathbf{d}} = 0$ and $\tilde{\mathbf{f}} = \tilde{\epsilon}$, où $\tilde{\epsilon}$ est le tenseur totalement antisymétrique de rang 3, appelé aussi tenseur de Levi-Civita. Nous utiliserons pour nos calculs les identités [196, 197]

$$\sum_{B,C} \mathbf{d}^{ACB} \mathbf{d}^{GBC} = \frac{N^2 - 4}{N} \delta_{AG}, \quad \sum_{B,C} \mathbf{f}^{ACB} \mathbf{f}^{GBC} = -N \delta_{AG}, \quad (\text{C.6})$$

$$\sum_{B,C} \mathbf{d}^{ACB} \mathbf{f}^{GBC} = 0. \quad (\text{C.7})$$

C.2 Représentation associée au spin de l'impureté

La seconde représentation qui nous intéresse est reliée au spin de l'impureté. Elle est représentée en terme de tableau de Young par un L , nous la notons $\{\Gamma\}$. Elle est caractérisée sur $2S$ boîtes dans la première ligne (ligne horizontale), et q boîtes sur la première colonne (ligne verticale), comme montré sur la figure 7.1. Sa dimension est donnée par la formule de Robinson [193]

$$d_{\{\Gamma\}} = \frac{2S}{2S + q - 1} C_{N+2S-1}^{2S} C_{N-1}^{q-1}, \quad (\text{C.8})$$

et la valeur propre de l'opérateur quadratique de Casimir associé à $\{\Gamma\}$ est [108]

$$\mathcal{C}_2(\{\Gamma\}) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{(2S + q - 1)[N^2 - (2S + q - 1)]}{N} + \sum_{j=1}^N g_j(g_j + 1 - 2j) \right\}, \quad (\text{C.9})$$

où g_j (8.8) est le nombre de boîtes dans la $j^{\text{ème}}$ ligne ($1 \leq j \leq N$) du tableau de Young décrivant $\{\Gamma\}$, ce qui donne

$$\mathcal{C}_2(\{\Gamma\}) = \frac{2S + q - 1}{2} \left(2S - q + N - \frac{2S + q - 1}{N} \right). \quad (\text{C.10})$$

Nous mentionnons maintenant quelques identités satisfaites par les matrices $\{\tilde{\Gamma}^A\}$, possédant $(d_{\{\Gamma\}} \times d_{\{\Gamma\}})$ composantes. La première relation concerne la normalisation [198]

$$\text{Tr}[\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^B] = \frac{d_{\{\Gamma\}} \mathcal{C}_2(\{\Gamma\})}{d_{\{\sigma\}} \mathcal{C}_2(\{\sigma\})} \text{Tr}[\tilde{\sigma}^A \tilde{\sigma}^B] = \frac{d_{\{\Gamma\}} \mathcal{C}_2(\{\Gamma\})}{d_{\{\sigma\}} \mathcal{C}_2(\{\sigma\})} \frac{\delta_{AB}}{2}. \quad (\text{C.11})$$

Les générateurs de $SU(N)$ dans la représentation $\{\Gamma\}$ suivent des lois de multiplication particulières, lorsque deux indices contractés sont proches l'un de l'autre [135]

$$\sum_B \tilde{\Gamma}^B \tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^B = \left\{ \mathcal{C}_2(\{\Gamma\}) - \frac{\mathcal{C}_2(\{\text{Adj}\})}{2} \right\} \tilde{\Gamma}^A, \quad (\text{C.12})$$

$$\sum_B \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B \tilde{\Gamma}^B \tilde{\Gamma}^A = \mathcal{C}_2(\{\Gamma\}) \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^A, \quad (\text{C.13})$$

avec $\mathcal{C}_2(\{\text{Adj}\})$ la valeur propre de l'opérateur quadratique de Casimir associé à la représentation adjointe de $SU(N)$. De par notre choix de normalisation (C.4) nous avons

$$\mathcal{C}_2(\{\text{Adj}\}) = N.$$

Annexe D

Terme du troisième ordre en J_K de la self-energy électronique

Dans cet appendice nous présentons le calcul de la contribution du troisième ordre en perturbation représentée par le diagramme $\Sigma_{(3,0)}$ sur la Figure 8.1. Tous les autres diagrammes peuvent être traités de la même façon. La contribution de spin due aux matrices $\{\hat{\Gamma}^A\}$ et $\{\tilde{\sigma}^A\}$ est calculée dans la section 8.2.1, le résultat est donné par la formule (8.13). Nous montrons juste ici comment le point de départ (8.6) est (facilement) obtenu. Ensuite nous nous concentrons sur la partie incluant les impulsions et fréquences. Le diagramme $\Sigma_{(3,0)}$ est représenté sur la figure D.1, en explicitant tous les degrés de liberté internes.

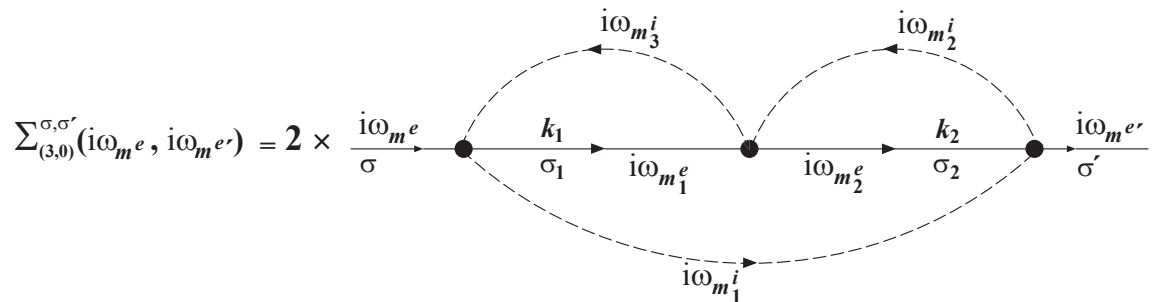


FIG. D.1 – Diagramme de Feynman correspondant à la contribution de troisième ordre en J_K à la self-energy des électrons de conduction, dans une théorie de perturbation. Nous adoptons les notations définies dans la section 8.1.

D.1 Contribution de la partie de spin

Nous commençons par la contribution de spin. En appliquant les règles de la section 8.1, nous obtenons en développant le précédent diagramme de la figure D.1

$$\begin{aligned}
\text{Spin} \left[\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'} \right] &= \sum_{\sigma_1, \sigma_2=1}^N \sum_{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3=1}^{d_{\{\Gamma\}}} \left(\sum_{A=1}^{N^2-1} \sigma_{\sigma_1, \sigma}^A \Gamma_{\gamma_1, \gamma_3}^A \right) \times \left(\sum_{B=1}^{N^2-1} \sigma_{\sigma', \sigma_2}^B \Gamma_{\gamma_2, \gamma_1}^B \right) \\
&\quad \times \left(\sum_{B=1}^{N^2-1} \sigma_{\sigma_2, \sigma_1}^C \Gamma_{\gamma_3, \gamma_2}^C \right) \\
&= \sum_{A, B, C} \left(\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sigma_{\sigma', \sigma_2}^B \sigma_{\sigma_2, \sigma_1}^C \sigma_{\sigma_1, \sigma}^A \right) \left(\sum_{\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3} \Gamma_{\gamma_1, \gamma_3}^A \Gamma_{\gamma_3, \gamma_2}^C \Gamma_{\gamma_2, \gamma_1}^B \right) \\
&= \sum_{A, B, C} [\tilde{\sigma}^B \tilde{\sigma}^C \tilde{\sigma}^A]_{\sigma' \sigma} \cdot \text{Tr} [\tilde{\Gamma}^A \tilde{\Gamma}^C \tilde{\Gamma}^B], \tag{D.1}
\end{aligned}$$

ce qui est exactement l'expression (8.6).

Nous rappelons le résultat final provenant de la partie de spin (8.13)

$$\begin{aligned}
\text{Spin} \left[\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'} \right] &= \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \cdot \frac{2S}{8N^3} \\
&\times \left[(2S)^2(2 - 3N + N^2) + q^2(2 + 3N + N^2) + 2S \cdot q(4 - N^2) \right. \\
&\quad \left. + 2S(-4 + 3N - 4N^2 + 2N^3) + q(-4 - 3N - 4N^2 - 2N^3) \right. \\
&\quad \left. + (2 + 4N^2 + N^4) \right] \delta_{\sigma, \sigma'}. \tag{D.2}
\end{aligned}$$

D.2 Contribution apportée par les propagateurs

Nous passons maintenant à la partie en impulsions et fréquences, nous l'appellerons $F_{(3,0)}$. Bien que nous développerons notre analyse en nous focalisant sur le cas à $T = 0$, nous travaillons pour l'instant dans l'espace des fréquences de Matsubara (fermioniques), pour des raisons de simplicité technique. Nous utiliserons les propriétés des propagateurs libres obtenues en section 8.2.2. Les règles définies dans la section 8.1 combinées avec les

expressions (8.28) et (8.35) donnent:

$$\begin{aligned}
& F_{(3,0)} \\
&= \left(-\frac{J_K}{\mathcal{N}_s}\right)^3 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(\frac{1}{\beta}\right)^3 \sum_{m_1^e, m_2^e} \sum_{m_1^i, m_2^i, m_3^i} \delta_{m^e+m_3^i, m_1^e+m_1^i} \delta_{m_1^e+m_2^i, m_2^e+m_3^i} \delta_{m_2^e+m_1^i, m^{e'}+m_2^i} \\
&\times \frac{(-1)}{(i\omega_{m_1^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1})} \cdot \frac{(-1)}{(i\omega_{m_2^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2})} \\
&\times \left(-\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_1} \frac{e^{i\beta\mu_{n_1}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_1}}]^{d_{\{\Gamma\}}}}{i\omega_{m_1^i} - i\mu_{n_1}}\right) \\
&\times \left(-\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_2} \frac{e^{i\beta\mu_{n_2}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_2}}]^{d_{\{\Gamma\}}}}{i\omega_{m_2^i} - i\mu_{n_2}}\right) \\
&\times \left(-\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_3} \frac{e^{i\beta\mu_{n_3}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_3}}]^{d_{\{\Gamma\}}}}{i\omega_{m_3^i} - i\mu_{n_3}}\right). \tag{D.3}
\end{aligned}$$

Les symboles de Kronecker sur les indices de fréquences imaginaires impliquent

$$\begin{cases} m^{e'} = m^e \\ m_2^i = m_1^i + m_2^e - m^e \\ m_3^i = m_1^i + m_1^e - m^e. \end{cases}$$

Après sommation sur les fréquences imaginaires libres restantes nous obtenons

$$\begin{aligned}
& F_{(3,0)} \\
&= \left(-\frac{J_K}{\mathcal{N}_s}\right)^3 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{m^e, m^{e'}} \left(\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_1} e^{i\beta\mu_{n_1}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_1}}]^{d_{\{\Gamma\}}}\right) \\
&\times \left(\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_2} e^{i\beta\mu_{n_2}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_2}}]^{d_{\{\Gamma\}}}\right) \cdot \left(\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_3} e^{i\beta\mu_{n_3}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_3}}]^{d_{\{\Gamma\}}}\right) \\
&\times [n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_1}) - n_f(i\mu_{n_3})] \cdot [n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_2}) - n_f(i\mu_{n_2})] \\
&\times \left[\frac{n_f(i\omega_{m^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + i\mu_{n_3}) - n_f(i\mu_{n_1})}{(i\omega_{m^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - i\mu_{n_1} + i\mu_{n_3})(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} + i\mu_{n_2} - i\mu_{n_3})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{n_f(i\omega_{m^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} + i\mu_{n_2}) - n_f(i\mu_{n_1})}{(i\omega_{m^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - i\mu_{n_1} + i\mu_{n_2})(-\varepsilon_{\mathbf{k}_1} + \varepsilon_{\mathbf{k}_2} - i\mu_{n_2} + i\mu_{n_3})} \right], \tag{D.4}
\end{aligned}$$

où n_f est la statistique de Fermi-Dirac. Nous remarquons avec la formule (D.4) que les pôles associés aux propagateurs libres ne sont pas sur l'axe réel, comme à l'habitude. En raison du traitement de la contrainte fermionique (7.15) que nous avons choisi, ces pôles subissent un «shift» par les potentiels chimiques imaginaires ($i\mu_n$). En utilisant la relation de contraction

$$\begin{aligned}
& [n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_1}) - n_f(i\mu_{n_3})] \cdot [n_f(i\omega_{m^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + i\mu_{n_3}) - n_f(i\mu_{n_1})] \\
&= -n_f(-\varepsilon_{\mathbf{k}_1})n_f(-i\mu_{n_1})n_f(i\mu_{n_3}) - n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_1})n_f(i\mu_{n_1})n_f(-i\mu_{n_3}), \tag{D.5}
\end{aligned}$$

nous avons

$$\begin{aligned}
& F_{(3,0)} \\
&= 2 \left(\frac{J_K}{\mathcal{N}_s} \right)^3 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{m^e, m^{e'}} \left(\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_1} e^{i\beta\mu_{n_1}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_1}}]^{d_{\{\Gamma\}}} \right) \\
&\times \left(\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_2} e^{i\beta\mu_{n_2}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_2}}]^{d_{\{\Gamma\}}} \right) \cdot \left(\frac{1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \sum_{n_3} e^{i\beta\mu_{n_3}} [1 + e^{-i\beta\mu_{n_3}}]^{d_{\{\Gamma\}}} \right) \\
&\times [n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_2}) - n_f(i\mu_{n_2})] \\
&\times \left[\frac{n_f(-\varepsilon_{\mathbf{k}_1})n_f(-i\mu_{n_1})n_f(i\mu_{n_3}) + n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_1})n_f(i\mu_{n_1})n_f(-i\mu_{n_3})}{(i\omega_{m^e} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} - i\mu_{n_1} + i\mu_{n_3})(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} + i\mu_{n_2} - i\mu_{n_3})} \right]. \tag{D.6}
\end{aligned}$$

En examinant l'expression précédente (D.6) nous pouvons suspecter une difficulté technique pour calculer les sommations sur les potentiels chimiques imaginaires (indexés par n_1 , n_2 et n_3), compte tenu de leur présence dans les dénominateurs fractionnaires. Heureusement une simplification est possible, vu que notre analyse se limite au cas $T = 0$. En effet grâce à (7.15), nous voyons que les potentiels chimiques auxiliaires sont proportionnels à la température. Par conséquent leurs contributions aux dénominateurs fractionnaires de l'expression (D.6) disparaissent à température nulle. Evidemment, une telle simplification serait un non-sens si elle était appliquée avant d'effectuer les sommations sur les fréquences de Matsubara internes : cela signifierait simplement que la contrainte fermionique (7.5) est négligée, à savoir que l'espace de Hilbert considéré contiendrait des états clairement non-physiques. Cependant une fois que les sommations sur les fréquences de Matsubara internes ont été faites, tous les pôles des propagateurs libres ont été pris en compte. Autrement dit l'élimination des potentiels chimiques imaginaires des dénominateurs fractionnaires à ce stade ne supprime aucune propriété «cachée» et est parfaitement justifiée. Nous devons noter aussi dans l'expression (D.6) que la contribution des potentiels chimiques imaginaires est toujours présente à température nulle par l'intermédiaire des facteurs exponentiels. En effet les termes $e^{i\beta\mu_n}$ sont de purs facteurs trigonométriques, indépendants de la température.

Il doit être possible de poursuivre l'étude à température finie, par exemple en calculant les sommations sur les potentiels chimiques imaginaires de façon numérique. Cette approche étendue est laissée pour de futurs travaux.

Afin d'accéder à la self-energy physique, nous appliquons la continuation analytique le long de l'axe réel: $i\omega_{m^e} \rightarrow \omega + i0^+$. En utilisant les identités (8.32), (8.33) and (8.34) pour calculer les sommations sur les potentiels chimiques auxiliaires, nous obtenons à $T = 0$

$$\begin{aligned}
F_{(3,0)} &= 2 \left(\frac{J_K}{\mathcal{N}_s} \right)^3 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta(\omega - \omega') \frac{1}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + i0^+)(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2})} \\
&\times \left[n_f(\varepsilon_{\mathbf{k}_2}) \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) - \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^3} \right) \right], \tag{D.7}
\end{aligned}$$

avec ω' remplaçant $i\omega_{m^{e'}}$ après continuation analytique.

D.3 Contribution d'ordre 3 à la self-energy

Nous disposons maintenant de tous les éléments nécessaires pour dériver à température nulle la contribution au troisième ordre en théorie de perturbation en J_K à la self-energy électronique. Nous regroupons le facteur de spin (D.2) et la partie en impulsions et fréquences (D.7). L'ensemble doit être multiplié par trois facteurs additionnels: (-1) dû à la boucle de pseudofermion, (2) provenant du facteur combinatoire de symétrie, et (N_i) le nombre de sites du réseau. Nous avons

$$\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') = (-1) \times (2) \times (N_i) \times \text{Spin} \left[\Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'} \right] \times F_{(3,0)}. \quad (\text{D.8})$$

A la limite thermodynamique, nous adoptons l'approche standard du cut-off en énergie pour la bande des électrons de conduction: $-D \leq \varepsilon_{\mathbf{k}} \leq D$, et effectuons le remplacement

$$\frac{1}{\mathcal{N}_s} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \rho \int_{-D}^{+D} d\varepsilon,$$

où ρ est la densité d'état par spin et par canal, supposée constante. Nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} & \Sigma_{(3,0)}^{\sigma,\sigma'}(\omega, \omega') \quad (\text{D.9}) \\ = & - \left(\left[(2S)^2(2 - 3N + N^2) + q^2(2 + 3N + N^2) + 2S \cdot q(4 - N^2) \right. \right. \\ & \left. \left. + 2S(-4 + 3N - 4N^2 + 2N^3) + q(-4 - 3N - 4N^2 - 2N^3) \right. \right. \\ & \left. \left. + (2 + 4N^2 + N^4) \right] \frac{(N + 2S - 1)!}{(2S)!(q - 1)!(N - q)!} \cdot \frac{2S}{2N^3} \right) \\ & \times (J_K)^3 \cdot n_i \cdot \delta_{\sigma,\sigma'} \cdot \delta(\omega - \omega') \\ & \times \rho^2 \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_1 \int_{-D}^{+D} d\varepsilon_2 \frac{1}{(\omega - \varepsilon_1 + i0^+)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \\ & \quad \times \left[n_f(\varepsilon_2) \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^2} \right) - \left(\frac{d_{\{\Gamma\}} - 1}{[d_{\{\Gamma\}}]^3} \right) \right], \end{aligned}$$

avec $n_i = (N_i)/\mathcal{N}_s$ la densité d'impuretés.

Appendices - Partie III

Annexe E

Expression des intégrales thermiques

Nous donnons dans cet appendice les expressions analytiques des intégrales thermiques F (14.14) permettant de calculer à un niveau RPA les fonctions de corrélation (14.18) à deux champs bosoniques.

E.1 Expression générale

Les intégrales F sont données par l'expression générale

$$F_{\tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1), \tilde{s}_{j,a''}(\mathbf{q}_2)}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \text{tr} \left[\tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma', i\omega_n + i\omega_\ell) \tilde{s}_{i,a'}(\mathbf{q}_1) \right. \\ \left. \times \tilde{\mathcal{G}}_0(\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n) \tilde{s}_{j,a''}(\mathbf{q}_2) \right],$$

avec tr la trace prise sur la base de spineurs (12.13), $\tilde{\mathcal{G}}_0$ la matrice des fonctions de Green libres (12.24), \tilde{s} les matrices définies par le vecteur \vec{s} (14.12), (14.13), $i\omega_n$ les fréquences de Matsubara fermioniques et $i\omega_\ell$ une fréquence de Matsubara bosonique.

E.2 Calcul des intégrales F

Nous présentons maintenant les 16 expressions associées aux intégrales F

$$F_{\tilde{\sigma}^0, \tilde{\sigma}^0}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\ = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\ \times \left\{ 2(i\omega_n)^2 - i\omega_\ell(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + i\omega_n [2i\omega_\ell - (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}})] \right. \\ \left. + (\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + 2(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) \right\},$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}^0, \bar{\sigma}^x}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ -2i\omega_n(\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^m) - 2i\omega_\ell \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m \right. \\
& \quad + \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^x (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^m (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^x (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}^0, \bar{\sigma}^y}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ -2i\omega_n(i\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^x + i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^x) - 2i\omega_\ell i\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^x \right. \\
& \quad - i\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + i\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^x (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. + i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^m (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^x (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}^0, \bar{\sigma}^z}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ i\omega_n (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + i\omega_\ell (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right. \\
& \quad \left. - (\xi_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + 2(\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^x - \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^m) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}^x, \bar{\sigma}^0}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ -2i\omega_n(\Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^m) - 2i\omega_\ell \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m \right. \\
& \quad + \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^m (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + \Delta_{\mathbf{k}, \sigma}^x (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^m (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^x (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\tilde{\sigma}^x, \tilde{\sigma}^x}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ 2(i\omega_n)^2 - i\omega_\ell(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + i\omega_n [2i\omega_\ell - (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}})] \right. \\
& \left. + (\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + 2(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\tilde{\sigma}^x, \tilde{\sigma}^y}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ i\omega_n(-i\xi_{\mathbf{k}} + i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - i\omega_\ell(i\xi_{\mathbf{k}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right. \\
& \left. + (i\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + 2i(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\tilde{\sigma}^x, \tilde{\sigma}^z}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ 2i\omega_n(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) + 2i\omega_\ell \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \right. \\
& \quad - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\tilde{\sigma}^y, \tilde{\sigma}^0}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ -2i\omega_n(i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x + i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) - 2i\omega_\ell i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \right. \\
& \quad + i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. - i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}y, \bar{\sigma}x}^{\sigma, \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ i\omega_n (i\xi_{\mathbf{k}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + i\omega_\ell (i\xi_{\mathbf{k}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right. \\
& \quad \left. - (i\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}} - i\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + 2i(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}y, \bar{\sigma}y}^{\sigma, \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ 2(i\omega_n)^2 - i\omega_\ell (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + i\omega_n [2i\omega_\ell - (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}})] \right. \\
& \quad \left. + (\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - 2(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}y, \bar{\sigma}z}^{\sigma, \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ 2i\omega_n (i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m - i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m) + 2i\omega_\ell i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \right. \\
& \quad - i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x (\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. + i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\bar{\sigma}z, \bar{\sigma}0}^{\sigma, \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ i\omega_n (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + i\omega_\ell (\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right. \\
& \quad \left. - (\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - 2(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m) \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_{\tilde{\sigma}z, \tilde{\sigma}x}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ -2i\omega_n(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) - 2i\omega_\ell \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x \right. \\
& \quad - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\}, \\
& F_{\tilde{\sigma}z, \tilde{\sigma}y}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ -2i\omega_n(i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m - i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m) - 2i\omega_\ell i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m \right. \\
& \quad + i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - i\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) \\
& \quad \left. - i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) - i\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x(\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) \right\}, \\
& F_{\tilde{\sigma}z, \tilde{\sigma}z}^{\sigma', \sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) \\
= & \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - (i\omega_n + i\omega_\ell)] [(i\omega_n + i\omega_\ell) - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low}] [E_{\mathbf{k}}^{up} - i\omega_n] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]} \\
& \times \left\{ 2(i\omega_n)^2 - i\omega_\ell(\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}) + i\omega_n[2i\omega_\ell - (\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}})] \right. \\
& \quad \left. + (\xi_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{Q}}) - 2(\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^m\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^m - \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^x\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^x) \right\}.
\end{aligned}$$

E.3 Sommations sur les fréquences de Matsubara

Les sommations sur les fréquences de Matsubara fermioniques $i\omega_n$ intervenant dans l'évaluation des intégrales F précédentes sont données par

$$\begin{aligned}
I_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{[i\omega_n - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - i\omega_\ell)] [i\omega_n - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - i\omega_\ell)] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{up}] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]}, \\
I_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{(i\omega_n)}{[i\omega_n - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - i\omega_\ell)] [i\omega_n - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - i\omega_\ell)] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{up}] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]}, \\
I_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{(i\omega_n)^2}{[i\omega_n - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - i\omega_\ell)] [i\omega_n - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - i\omega_\ell)] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{up}] [i\omega_n - E_{\mathbf{k}}^{low}]},
\end{aligned}$$

qui à très basses températures pour une bande de Hubbard supérieure vide deviennent

$$\begin{aligned}
I_0(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) &= \frac{1}{(E_{\mathbf{k}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{up}) [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low})] [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{low})]} \\
&+ \frac{1}{(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up}) [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{up})] [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{low})]}, \\
I_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) &= \frac{(E_{\mathbf{k}}^{low})}{(E_{\mathbf{k}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{up}) [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low})] [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{low})]} \\
&+ \frac{(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - i\omega_\ell)}{(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up}) [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{up})] [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{low})]}, \\
I_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}, i\omega_\ell) &= \frac{(E_{\mathbf{k}}^{low})^2}{(E_{\mathbf{k}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{up}) [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low})] [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{low})]} \\
&+ \frac{(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - i\omega_\ell)^2}{(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{up}) [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{up})] [i\omega_\ell - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{low} - E_{\mathbf{k}}^{low})]}.
\end{aligned}$$

Annexe F

Existence d'un mode de Goldstone

Dans cet appendice, nous examinons la contribution à l'action au deuxième ordre en fluctuations \mathcal{S}_2 apportée par les composantes de l'aimantation alternée $m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^x$ et $m_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^y$ pour le cas du demi-remplissage, dans la limite uniforme et statique

$$\mathbf{x} = 0, \quad \mathbf{q} = \mathbf{0}, \quad i\omega_\ell = 0. \quad (\text{F.1})$$

F.1 Action d'ordre 2 dans le plan du réseau

Nous écrivons comme une partie de \mathcal{S}_2 (14.17)

$$\begin{aligned} & \mathcal{S}_2^{AF_{x,y}} \\ &= \left(\mathcal{M}_{5,5}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}, \mathbf{Q}, i\omega_\ell = 0) + \frac{1}{2} \Pi_{5,5}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}, \mathbf{Q}, i\omega_\ell = 0) \right) [\delta m_{\mathbf{Q}}^x(i\omega_\ell = 0)]^2 \\ &+ \left(\mathcal{M}_{6,6}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}, \mathbf{Q}, i\omega_\ell = 0) + \frac{1}{2} \Pi_{6,6}(\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{Q}, \mathbf{Q}, i\omega_\ell = 0) \right) [\delta m_{\mathbf{Q}}^y(i\omega_\ell = 0)]^2 \\ &= \alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} (\delta m_{\mathbf{Q}}^x)^2 + \alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} (\delta m_{\mathbf{Q}}^y)^2 \\ &+ \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} ' \sum_{\sigma, \sigma'} \left[-\alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \sigma_{\sigma', \sigma}^x \right] F_{\tilde{\sigma}^x, \tilde{\sigma}^x}^{\sigma', \sigma} \left[-\alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \sigma_{\sigma, \sigma'}^x \right] (\delta m_{\mathbf{Q}}^x)^2 \\ &+ \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} ' \sum_{\sigma, \sigma'} \left[-\alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \sigma_{\sigma', \sigma}^y \right] F_{\tilde{\sigma}^y, \tilde{\sigma}^y}^{\sigma', \sigma} \left[-\alpha \tilde{J}_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \sigma_{\sigma, \sigma'}^y \right] (\delta m_{\mathbf{Q}}^y)^2. \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

En utilisant (14.7) et (14.15) nous avons dans notre limite simplifiée (F.1):

$$\mathcal{S}_2^{AF_{x,y}} = \left(2\alpha J - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} ' \frac{8\alpha^2 J^2}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} \right) [(\delta m_{\mathbf{Q}}^x)^2 + (\delta m_{\mathbf{Q}}^y)^2]. \quad (\text{F.3})$$

Grâce à l'équation de champ moyen (13.17) relative à l'aimantation, nous savons que

$$\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} ' \frac{8\alpha^2 J^2}{E_{\mathbf{k}}^{up} - E_{\mathbf{k}}^{low}} = 2\alpha J,$$

donc avec l'expression (F.3) nous obtenons finalement

$$\mathcal{S}_2^{AF_{x,y}} = 0. \quad (\text{F.4})$$

F.2 Susceptibilité statique transverse

Le comportement caractérisé par l'équation (F.4) de l'action au second ordre concernant les directions x et y de l'aimantation implique que la fonction de corrélation spin spin transverse χ^\pm contient un pôle sans gap. Il s'agit d'une conséquence du théorème de Goldstone [199], qui doit être appliqué dans ce contexte à cause de la brisure de symétrie par rotation dans l'espace des spins due à l'ordre antiferromagnétique imposé.

Ce comportement est en accord avec la théorie effective des systèmes quantiques AF de Heisenberg, qui a été bâtie par Haldane pour les chaînes unidimensionnelles [200] puis étendue au réseau carré [201]. L'existence d'un mode de Goldstone a déjà été observée dans l'approche initiale de la théorie de Spin Bag [65].

Table des figures

1	Variation de la résistivité électrique ρ en fonction de la température, pour le cuivre (triangles) et un alliage dilué de fer dans du cuivre (cercles), d'après la référence [5].	12
2	Comparaison pour la variation de la résistivité en fonction de la température entre données expérimentales (points) et résultats théoriques (lignes) donnés par le calcul perturbatif de Kondo, pour un alliage de fer dilué à plusieurs concentrations dans de l'or (d'après la référence [9]).	14
3	Formation d'un singulet local sur le site de l'impureté, dans le cadre du modèle $s-d$ décrivant l'interaction d'une impureté de spin $1/2$ avec un gaz d'électrons de conduction.	15
4	(a) Contribution de l'impureté à la résistivité dans différents types d'alliages dilués de fer dans de l'aluminium et du cuivre, d'après la référence [36]. (b) Identique à (a), avec l'échelle de température renormalisée par T_K . L'échelle de température est logarithmique dans les deux cas.	17
5	Variation de la susceptibilité magnétique en fonction de la température faisant apparaître les deux régimes physiques, de couplage faible et de couplage fort, séparés par la région de crossover ($T \sim T_K$). Les flèches indiquent la direction du flot de renormalisation.	18
6	Résistivité électrique ρ en fonction de la température, mesurée sur le composé monocristallin de fermions lourds $CeCu_{5.9}Au_{0.1}$ en présence d'un champ magnétique B appliqué suivant la direction perpendiculaire au plan principal. Les lignes pleines indiquent une dépendance linéaire ($B = 0$) et quadratique ($B = 3$ et 6 T) en température (d'après la référence [46]).	19
7	Susceptibilité magnétique $\chi = M/B$ (M est l'aimantation) en fonction de la température, mesurée sur le composé monocristallin $CeCu_{5.9}Au_{0.1}$ en présence d'un champ magnétique B appliqué perpendiculairement au plan principal. La ligne pleine indique un fit des données expérimentales par la fonction $\chi = \chi_0(1 - \alpha\sqrt{T})$ (d'après la référence [46]).	20
8	(a) Contribution linéaire C/T de la dépendance thermique de la chaleur spécifique C en fonction de la température, représentée en échelle semi-logarithmique. Les mesures ont été effectuées sur des polycristaux de $CeCu_{6-x}Au_x$, à trois valeurs différentes du dopage x , à champ magnétique nul. (b) Idem à (a), pour un monocristal de $CeCu_{5.9}Au_{0.1}$, soumis à un champ magnétique B appliqué suivant la direction perpendiculaire au plan principal (d'après la référence [46]).	21
9	Résistivité en fonction de la température, mesurée dans le composé $YBa_2Cu_3O_7$ (d'après la référence [60]).	23

10	Strucuture orthorhombique du composé La_2CuO_4 . Les grands cercles vides représentent les atomes de lanthane, tandis que les petits cercles, vides et pleins, indiquent les atomes d'oxygène. Un atome de cuivre, non représenté, se trouve au centre de chacun des octaèdres d'atomes d'oxygène (d'après la référence [60]).	25
11	Diagramme de phase des cuprates dopés positivement, en fonction de la température et du dopage chimique en trous x	26
1.1	Diagramme de phase du réseau Kondo, prédit par le scénario d'un point critique quantique (QCP) présentant des modes critiques locaux, en fonction de la température T et du paramètre δ correspondant au rapport de l'interaction de couplage RKKY entre impuretés Kondo à l'échelle d'énergie Kondo T_K . Les degrés de liberté locaux et étendus dans l'espace coexistent dans le régime du QCP. La caractéristique essentielle de cette approche est que T_K et la température de Néel T_N s'annulent au point critique quantique δ_c (d'après la référence [85]).	33
1.2	Flot de renormalisation associé au modèles Kondo à un canal. Les flèches indiquent la direction du flot. Le point fixe du système d'électrons libres ($J = 0$) est stable par rapport à une interaction de spin ferromagnétique. Dans le cas du modèle Kondo antiferromagnétique, le flot de renormalisation atteint le point fixe de couplage fort ($J = \infty$) et le système suit un comportement de type liquide de Fermi.	34
1.3	Les points fixes de couplage fort du modèle Kondo multicanal (a) écranté, (b) sous-écranté, (c) sur-écranté.	35
1.4	Flots de renormalisation associés au modèles Kondo multicanal sur-écranté. Le point fixe du système d'électrons libres ($J = 0$) est stable par rapport à une interaction de spin ferromagnétique. Dans le cas d'un couplage antiferromagnétique, le point fixe de couplage fort présente une instabilité : le système est décrit par un point fixe de couplage intermédiaire, caractéristique d'un comportement de type non-liquide de Fermi.	36
2.1	Description en terme de tableau de Young du spin de l'impureté, caractérisé par une symétrie mixte. Ce spin est réalisé par une combinaison de degrés de liberté fermioniques et bosoniques. La représentation indiquée ci-dessus est notée $[2S, 1^{q-1}]$	40
2.2	Description en tableau de Young du spin formé par les électrons de conduction situés sur le site de l'impureté.	40
2.3	Description en tableau de Young de l'état fondamental de couplage fort. Chacun des électrons de conduction placés sur le site 0 est noté \mathbf{c} . On notera que la première colonne, formant un singulet, peut être supprimée.	43
2.4	Etats excités $ GS + 1\rangle^S$ et $ GS + 1\rangle^A$ comportant un électron de conduction supplémentaire sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental, $n_c = (N - q + 1)$, dans les configurations symétrique et antisymétrique, respectivement.	45

2.5	Etat excité $ GS - 1\rangle$, comportant un électron de conduction en moins sur le site 0 par rapport à l'état fondamental, $n_c = (N - q - 1)$	45
3.1	Etat fondamental de couplage fort en présence de n_d électrons de conduction sur le site 1, couplés de façon symétrique et antisymétrique avec l'impureté écrantée située à l'origine.	50
3.2	Décalage en énergie de l'état fondamental de couplage fort dans une théorie de perturbation au second ordre en t pour le cas d'un couplage effectif (a) ferromagnétique et (b) antiferromagnétique.	51
3.3	Lorsque n_d électrons de conduction sont couplés symétriquement à l'impureté écrantée située à l'origine, l'opérateur de saut $c_\sigma^\dagger d_\sigma$ agissant sur l'état fondamental génère une combinaison linéaire de deux états excités caractérisés par un électron de conduction supplémentaire sur le site 0.	54
3.4	Lorsque n_d électrons sont couplés antisymétriquement à l'impureté écrantée située à l'origine, l'opérateur de saut $c_\sigma^\dagger d_\sigma$ agissant sur l'état fondamental génère des états proportionnels à un état excité donné, comportant un électron de conduction supplémentaire à l'origine.	58
3.5	L'opérateur $d_\sigma^\dagger c_\sigma$, agissant sur l'état fondamental comportant n_d électrons sur le site 1, couplés (a) symétriquement ou (b) antisymétriquement au spin de l'impureté écrantée située à l'origine. Il en résulte un état proportionnel à un état excité avec un électron en moins sur le site de l'impureté par rapport à l'état fondamental, couplé (a) symétriquement ou (b) antisymétriquement aux $(n_d + 1)$ électrons de conduction.	61
4.1	Interaction effective de spin J_{eff} dans la limite de N grand, en fonction de q/N , à différentes valeurs de $2S$	67
4.2	Diagramme de phase du modèle Kondo généralisé à un canal de conduction dans la limite de N grand (avec $2S/N$ fini), en fonction des paramètres $2S/N$ et q/N de la représentation du spin de l'impureté. Dès que $q > N/2$, le point fixe de couplage fort devient instable quelle que soit la valeur de $2S$. Pour $q = N/2$, le point fixe de couplage fort reste stable jusqu'à des valeurs de $2S/N$ modérément grandes (voir ci-dessus le segment de droite situé en $q/N = 0.5$ se terminant par un point).	68
4.3	Diagramme de phase du modèle dans la limite de N grand en fonction des paramètres de l'impureté $2S$ et q , pour $2S$ arbitraire.	69
4.4	Interaction effective de charge U_{eff} en fonction de q/N , dans la limite de N grand.	70
4.5	Terme dominant du décalage en énergie $\Delta E_0^A \sim \Delta E_0^S$, en fonction de q/N , pour $1 < n_d < (N - 1)$ (région grisée), et dans les cas limites $n_d = 1$ (trait pointillé) et $n_d = (N - 1)$ (trait plein). On notera que pour $q/N < 0.5$, l'énergie est minimale pour $n_d = 1$ alors que pour $q/N > 0.5$, le minimum correspond à $n_d = (N - 1)$. On remarquera aussi qu'au point de changement de régime $q/N = 1/2$, le décalage en énergie est égal à $(-2t^2/J)$ quel que soit n_d	71

4.6	Les deux configurations pour l'état fondamental de couplage fort associé à un spin d'impureté purement fermionique, une fois le terme de saut au site plus proche voisin inclus. Lorsque $q > N/2$, l'impureté tend à y attirer le plus grand nombre d'électrons possible, $(N - 1)$	74
6.1	Etats d'électron et de trou dans la bande de conduction. Après renormalisation, seuls les états d'énergie $\epsilon_{\mathbf{k}}$, tels que $\epsilon_{\mathbf{k}} \in [-D + \delta D, D - \delta D]$, sont conservés.	82
6.2	Flot de renormalisation du modèle Kondo, dérivé à partir de l'Equation (6.2). Le point fixe du système d'électrons libres ($J_K = 0$) est instable par rapport à une interaction antiferromagnétique ($J_K > 0$). Le scaling de la bande de conduction génère progressivement une famille de modèles effectifs, caractérisés chacun par un couplage Kondo J'_K renormalisé. Le point fixe de couplage fort est décrit par l'hamiltonien \mathcal{H}^*	83
7.1	Représentation du spin de l'impureté de symétrie $SU(N)$ en terme de tableau de Young. Cette représentation, dite «en L», est notée $[2S, 1^{q-1}]$. Elle peut être décrite en utilisant une combinaison de degrés de liberté bosoniques et fermioniques.	87
7.2	Description en tableau de Young de la représentation fondamentale $\{\sigma\}$, associée à chaque électron de conduction.	90
8.1	Diagrammes de Feynman donnant les contributions aux différents ordres en J_K et K à la self-energy des électrons de conduction.	97
12.1	Réseau carré présentant simultanément une aimantation alternée et une phase de flux.	127
12.2	Première zone de Brillouin et zone de Brillouin réduite (magnétique) pour un réseau carré.	130
12.3	Bandes de Hubbard inférieure et supérieure correspondant aux valeurs propres $E_{\mathbf{k}}^{up}$ et $E_{\mathbf{k}}^{low}$ de \mathcal{H}_{MF}	131
12.4	Schéma des deux types de fermions de Dirac, caractérisés par des sens de rotation opposés. Ces fermions de Dirac sont localisés sur les noeuds situés aux points $\mathbf{k} = (\pm\pi/2, \pm\pi/2)$	132
13.1	Dépendance du module de l'aimantation alternée m obtenue au point-selle en fonction du dopage $x = 1 - n_f$	140
13.2	Dépendance des paramètres de flux ϕ (angle) et χ (module) obtenue au point-selle en fonction du dopage $x = 1 - n_f$	142
13.3	Dépendance du multiplicateur de Lagrange λ_0 et du potentiel chimique μ obtenue au point-selle en fonction du dopage $x = 1 - n_f$	143
13.4	Représentation de la surface de Fermi pour trois valeurs différentes du dopage: $x = 0.01, 0.05, 0.1$	144

14.1	Potentiels d'appariement $V_{BCS}^{zz}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.33), $V_{BCS}^{\pm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.34) et $V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.35) en fonction de \mathbf{k}' , avec $\mathbf{k} = (-\pi/2, -\pi/2)$ fixé, pour différentes valeurs du dopage x . Les potentiels d'appariement sont donnés en unité de t	157
14.2	Potentiel d'appariement total $V_{BCS}^{Tot}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (14.35) pour une valeur donnée du dopage $x = 0.05$, en fonction de $\mathbf{q} = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, avec $\mathbf{k} = (-\pi/2, -\pi/2)$ fixé. Le potentiel d'appariement est donné en unité de t	159
A.1	Diagramme de poids pour la représentation fondamentale de $SU(3)$, faisant apparaître les 3 états aux sommets du triangle et les opérateurs descendants associés.	166
A.2	Diagramme de poids pour les séries de Clebsch-Gordan du produit direct de deux représentations fondamentales dans le groupe $SU(3)$	167
A.3	Diagramme de poids pour les séries de Clebsch-Gordan du produit direct $\mathbf{3} \otimes \mathbf{6}$. Nous montrons certains des états et soulignons le processus d'obtention des coefficients de Clebsch-Gordan.	168
A.4	Diagramme de poids pour les séries de Clebsch-Gordan du produit direct $\mathbf{3} \otimes \bar{\mathbf{3}}$	169
A.5	Etats vérifiant $Q = (n_b + n_f)$, regroupés suivant les représentations de $SU(3)$	171
B.1	Deux façons d'obtenir la représentation en $L [2S, 1^{q-1}]$ du groupe $SU(N)$, à partir du produit direct de deux représentations respectivement fermionique et bosonique.	176
D.1	Diagramme de Feynman correspondant à la contribution de troisième ordre en J_K à la self-energy des électrons de conduction, dans une théorie de perturbation. Nous adoptons les notations définies dans la section 8.1.	187

Bibliographie

- [1] A. Jerez, "I Symétries et effet Kondo - II Le dichroïsme de rayons X dans des cristaux non centro-symétriques", *Thèse d'Habilitation à diriger des recherches*, Université Joseph Fourier, Grenoble, Décembre 2003.
- [2] L. D. Landau, *Soviet Phys. JETP* **3**, 920 (1957); *ibid.* **5**, 101 (1957); *ibid.* **8**, 70 (1958).
- [3] D. Pines, P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids, Volume I - Normal Fermi Liquids* (Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Massachusetts, 1989).
- [4] W. J. de Haas, J. H. de Boer, and G. J. van den Berg, *Physica* **1**, 1115 (1934).
- [5] W. B. Pearson, *Phil. Mag.* **46**, 911 (1955); *ibid.* **46**, 920 (1955).
- [6] J. Friedel, *Phil. Mag.* **43**, 153 (1952).
- [7] J. Friedel, *Can. J. Phys.* **34**, 1190 (1956).
- [8] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [9] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [10] C. Zener, *Phys. Rev.* **87**, 440 (1951).
- [11] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [12] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957); *ibid.* **107**, 396 (1957).
- [13] J. R. Schrieffer, and P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [14] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).
- [15] B. Coqblin, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **185**, 847 (1969).
- [16] P. Nozières, and A. Blandin, *J. Physique* **41**, 193 (1980).
- [17] P. Nozières, *Ann. Phys. Fr.* **10**, 19 (1985).
- [18] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **164**, 352 (1967).
- [19] P. W. Anderson, *J. Phys. C* **3**, 2439 (1970).
- [20] E. C. G. Stueckelberg, and A. Petermann, *Helv. Phys. Acta* **26**, 499 (1953).
- [21] M. Gell-Mann, and F. E. Low, *Phys. Rev.* **95**, 1300 (1954).
- [22] S. Weinberg, *Phys. Rev.* **118**, 838 (1960).
- [23] L. P. Kadanoff, W. Götzes, D. Hamblen, R. Hecht, E. A. S. Lewis, V. V. Palcauskas, M. Rayl, and J. Swift, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967).
- [24] K. G. Wilson, in *Nobel Symposia 1973 - Collective properties of physical systems* p. 68 (Academic Press, New York, 1974).
- [25] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).

- [26] S. K. Ma, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 589 (1973).
- [27] K. G. Wilson, and J. Kogut, *Phys. Rep.* **12**, 75 (1974).
- [28] P. Nozières, *J. Low Temp. Phys.* **17**, 31 (1974).
- [29] P. Nozières, in *Proc. 14th Int. Conf. on Low temperature Physics* p. 339, edited by M. Krusius and M. Vuorio (North-Holland, Amsterdam, 1975).
- [30] K. Yamada, *Prog. Theor. Phys.* **53**, 970 (1975); *ibid.* **54**, 316 (1975).
- [31] N. Andrei, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 379 (1980).
- [32] N. Andrei, K. Furuya, and J. H. Lowenstein, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 331 (1983).
- [33] A. M. Tsvelick, *Sov. Phys. JETP Lett.* **31**, 392 (1980).
- [34] A. M. Tsvelick, and P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983).
- [35] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [36] J. W. Loram, T. E. Whall, and P. J. Ford, *Phys. Rev. B* **2**, 857 (1970).
- [37] N. Andrei, in *Low-Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists: Lecture Notes of Ictp Summer Course Trieste, Italy September 1992*, edited by G. Morandi, Yu Lu, S. Lundqvist and G. Morandi (World Scientific, Singapore, 1996).
- [38] I. Affleck, *Nucl. Phys. B* **336**, 517 (1990).
- [39] I. Affleck, and A. W. W. Ludwig, *Nucl. Phys. B* **360**, 641 (1991).
- [40] A. W. W. Ludwig, and I. Affleck, *Nucl. Phys. B* **428**, 545 (1994).
- [41] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1996 (1989).
- [42] P.W. Anderson, *Science* **256**, 1526 (1992).
- [43] K. Andres, J. E. Graebner, and H. R. Ott, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1779 (1975).
- [44] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 797 (2001).
- [45] C.L. Seaman, M. B. Maple, B. W. Lee, S. Ghamaty, M. S. Torikachvili, J.-S. Kang, L. Z. Liu, J. Allen, and D. L. Cox *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2882 (1991).
- [46] H. v. Löhneysen, T. Pietrus, G. Portisch, H. G. Schlager, A. Schröder, M. Sieck, and T. Trappmann, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3262 (1994).
- [47] S. Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
- [48] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature* **391**, 156 (1998).
- [49] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **281**, 540 (1998).
- [50] P. Pustilnik, and L. Glazman, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, R513 (2004).
- [51] J. G. Bednorz, and K. A. Muller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [52] H. Kamerlingh Onnes, *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden* **119**, **120**, **122** (1911).
- [53] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956); J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [54] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity, revised printing* (Advanced Book Classics, Perseus Books, Reading, Massachusetts, 1999).

-
- [55] W. L. Mac Millan, Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
- [56] J. R. Gavaler, Appl. Phys. Lett. **23**, 480 (1973).
- [57] C. Michel, L. Er-Rakho, and B. Raveau, Mater. Res. Bull. **20**, 667 (1985).
- [58] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu Phys. Rev. Lett. **58**, 980 (1987).
- [59] Z. Z. Sheng, and A. M. Hermann, Nature **332**, 55 (1988).
- [60] J. G. Bednorz, and K. A. Muller, Rev. Mod. Phys. **60**, 585 (1988).
- [61] N. M. Plakida, *High-Temperature Superconductivity - Experiment and Theory* (Springer-Verlag, Berlin, 1995).
- [62] J. E. Hirsch, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **56**, 2732 (1986).
- [63] J. Friedel, J. Physique **48**, 1787 (1987).
- [64] J. Labbé, and J. Bok, Europhys. Lett. **3**, 1225 (1987).
- [65] J. R. Schrieffer, X. G. Wen, and S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **60**, 944 (1988); Phys. Rev. B **39**, 11663 (1989).
- [66] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [67] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [68] H. v. Löhneysen, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 9689 (1996).
- [69] S. Kambe, S. Raymond, L. P. Regnault, J. Flouquet, P. Lejay, and P. Haen, J. Phys. Soc. Jpn **65**, 3294 (1996).
- [70] O. Trovarelli, C. Geibel, S. Mederle, C. Langhammer, F. M. Grosche, P. Gegenwart, M. Lang, G. Sparn, and F. Steglich, Phys. Rev. Lett. **85**, 626 (2000).
- [71] F. Steglich, P. Gegenwart, R. Helfrich, C. Langhammer, P. Hellmann, L. Donnevert, C. Geibel, M. Lang, G. Sparn, W. Assmus, G.R. Stewart, and A. Ochiai, Z. Phys. B **103**, 235 (1997).
- [72] F. Steglich, B. Buschinger, P. Gegenwart, M. Lohmann, R. Helfrich, C. Langhammer, P. Hellmann, L. Donnevert, S. Thomas, A. Link, C. Geiber, M. Lang, G. Sparn, and W. Assmus, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 9909 (1996).
- [73] N. D. Mathur, F.M. Grosche, S. R. Julian, I. R. Walker, D. M. Freye, R. K. W. Haselwimmer, and G. G. Lonzarich, Nature **394**, 39 (1998).
- [74] J. A. Hertz, Phys. Rev. B **14**, 1165 (1976).
- [75] A. J. Millis, Phys. Rev. B **48**, 7183 (1993).
- [76] M. A. Continentino, Phys. Rev. B **47**, 11581 (1993).
- [77] T. Moriya, and T. Takimoto, J. Phys. Soc. Jpn **64**, 960 (1995).
- [78] M. Lavagna, and C. Pépin, Phys. Rev. B **62**, 6450 (2000).
- [79] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1989).
- [80] M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge* (InterEditions, Paris, 1988).
- [81] N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group* (Addison Wesley, Reading, Massachusetts, 1992).

- [82] A. Schröder, G. Aeppli, E. Bucher, R. Ramazashvili, and P. Coleman Phys. Rev. Lett. **80**, 5623 (1998).
- [83] A. Schröder, G. Aeppli, R. Coldea, M. Adams, O. Stockert, H. v. Löhneysen, E. Bucher, R. Ramazashvili, and P. Coleman, Nature **407**, 351 (2000).
- [84] P. Coleman, Physica B **259-261**, 353 (1999).
- [85] Q. Si, S. Rabello, K. Ingersent, and J.L. Smith, Nature **413**, 804 (2001).
- [86] R. Bulla, and M. Vojta, in *Concepts in Electron Correlation* p. 209, edited by A. C. Hewson and V. Zlatić (Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, 2003).
- [87] D. Withoff, and E. Fradkin, Phys. Rev. Lett. **64**, 1835 (1990).
- [88] K. Ingersent, and Q. Si, Phys. Rev. Lett. **89**, 076403 (2002).
- [89] M. Vojta, and R. Bulla, Phys. Rev. B **65**, 014511 (2002).
- [90] J. Gan, P. Coleman, and N. Andrei, Phys. Rev. Lett. **68**, 3476 (1992).
- [91] C. Pépin, and M. Lavagna, Phys. Rev. B **59**, 12180 (1999).
- [92] P. Coleman, C. Pépin, and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. B **62**, 3852 (2000).
- [93] P. Coleman, C. Pépin, and A. M. Tsvelik, Nucl. Phys. B **586**, 641 (2000).
- [94] P. Nozières, J. Physique **37**, C1-271 (1976).
- [95] N. Andrei, and C. Destri, Phys. Rev. Lett. **52**, 364 (1984).
- [96] P.B. Wiegmann, and A.M. Tsvelik, JETP Lett. **38**, 403 (1983).
- [97] D.L.Cox, and A.E.Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **71**, 1613 (1993).
- [98] N. Andrei, private communication.
- [99] P. Kulish, N. Y. Reshetikhin, and E. K. Sklyanin, Lett. Math. Phys. **5**, 393 (1981).
- [100] M. Hammermesh, *Group Theory and its application to Physical problems* (Addison Wesley, Reading, Massachusetts, 1962).
- [101] D.B. Lichtenberg, *Unitary Symmetry and Elementary Particles* (Academic Press, New York, 1970).
- [102] J. F. Cornwell, *Group Theory in Physics* (Academic, London, 1986).
- [103] H. F. Jones, *Group Representations and Physics* (Institute of Physics, University of Reading, Berkshire, 1990).
- [104] J. Schwinger, in *Quantum theory of angular momentum*, p. 229, edited by L. C. Biedenhorn and H. Van Dam (Academic Press, New York, 1965).
- [105] D. P. Arovas, and A. Auerbach, Phys. Rev. B **38**, 316 (1988).
- [106] A. A. Abrikosov, Physics **2**, 5 (1965); *ibid.* **2**, 61 (1965).
- [107] B. G. Wybourne, *Classical Groups for Physicists* (John Wiley & Sons, New York, 1974).
- [108] S. Okubo, J. Math. Phys. **18**, 2382 (1977).
- [109] O. Parcollet, A. Georges, G. Kotliar, and A. Sengupta Phys. Rev. B **58**, 3794 (1998).
- [110] J. Q. Chen, P. N. Wang, Z. M. Lü, and X.B. Wu, *Tables of the Clebsch-Gordan, Racah, and subduction coefficients of SU(n) Groups* (World Scientific, Singapore, 1987).

-
- [111] A. Jerez, N. Andrei, and G. Zaránd, Phys. Rev. B **58**, 3814 (1998).
- [112] I. Affleck, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **48**, 7297 (1993).
- [113] P. W. Anderson, and G. Yuval, Phys. Rev. Lett. **23**, 89 (1970).
- [114] P. W. Anderson, G. Yuval, and D. R. Hamann, Phys. Rev. B **1**, 4464 (1970).
- [115] P. W. Anderson, Comments in Solid State Physics **5**, 73 (1973).
- [116] P. Nozières, J. Physique **39**, 1117 (1978).
- [117] J. Solyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- [118] R. Shankar, Rev. Mod. Phys. **66**, 129 (1994).
- [119] W. Greiner, B. Müller, *Mécanique quantique. Symétries* (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [120] V. N. Popov, and S. A. Fedotov, Sov. Phys. JETP **67**, 535 (1988).
- [121] O. Veits, R. Oppermann, M. Binderberger, and J. Stein, J. Phys. I France **4**, 493 (1994).
- [122] M. N. Kiselev, H. Feldmann, and R. Oppermann, Eur. Phys. J. B **22**, 53 (2001).
- [123] S. Tejima, and A. Oguchi, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 4923 (1995).
- [124] F. Bouis, and M. N. Kiselev, Physica B **259-261**, 195 (1999).
- [125] M. N. Kiselev, and R. Oppermann, JETP Lett. **71**, 250 (2000).
- [126] M. N. Kiselev, and R. Oppermann, Phys. Rev. Lett. **85**, 5631 (2000).
- [127] J. W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Advanced Book Classics, Perseus Books, Reading, Massachusetts, 1998).
- [128] V. N. Popov, *Functional integrals and collective excitations* (Cambridge University Press, Cambridge, 1987).
- [129] J. Gan, N. Andrei, and P. Coleman, Phys. Rev. Lett. **70**, 686 (1993).
- [130] J. Gan, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4547 (1994); J. Gan, *Ph.D Thesis*, Rutgers University (1992).
- [131] G. Mahan, *Many-Particle Physics, second edition* (Plenum Press, New York, 1990).
- [132] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem, second edition* (Dover Publications, New York, 1992).
- [133] S. D. Silverstein, and C. B. Duke, Phys. Rev. **161**, 456 (1967).
- [134] C. Itzykson, J. B. Zuber, *Quantum Field Theory* (McGraw-Hill, New York, 1980).
- [135] T. van Ritbergen, A.N. Schellekens, and J.A.M. Vermaseren, Int. J. Mod. Phys. **A14**, 41 (1999).
- [136] S. Okubo, Phys. Rev. D **16**, 3528 (1977).
- [137] S. Okubo, and J. Patera, J. Math. Phys. **24**, 2722 (1983).
- [138] A. M. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, chap. 11 (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

- [139] C. G. Callan, Phys. Rev. D **2**, 1541 (1970).
- [140] K. Symanzik, Comm. Math. Phys. **18**, 227 (1970).
- [141] S. Coleman, *Aspects of symmetry: selected Erice Lectures*, chap. 3 (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
- [142] A. A. Abrikosov, and A. A. Migdal, J. Low Temp. Phys. **3**, 519 (1970).
- [143] T. C. Hsu, Phys. Rev. B **41**, 11379 (1990).
- [144] I. Affleck, and J. B. Marston, Phys. Rev. B **37**, 3774 (1988); J. B. Marston, and I. Affleck, *ibid.* **39**, 11538 (1989).
- [145] T. K. Lee, and S. P. Feng, Phys. Rev. B **38**, 11809 (1988).
- [146] G. J. Chen, R. Joynt, F. C. Zhang, and C. Gros, Phys. Rev. B **42**, 2662 (1990).
- [147] J. D. Reger, and A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5978 (1988).
- [148] A. Moreo, E. Dagotto, T. Jolicoeur, and J. Riera, Phys. Rev. B **42**, 6283 (1990).
- [149] P. W. Leung, and Y. F. Cheng, Phys. Rev. B **69**, 180403 (2004); T. K. Lee, C.-M. Ho, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **90**, 067001 (2003).
- [150] F. Ronning, T. Sasagawa, Y. Kohsaka, K. M. Shen, A. Damascelli, C. Kim, T. Yoshida, N. P. Armitage, D. H. Lu, D. L. Feng, L. L. Miller, H. Takagi, and Z.-X. Shen, Phys. Rev. B **67**, 165101 (2003).
- [151] Y. Kohsaka, T. Sasagawa, F. Ronning, T. Yoshida, C. Kim, T. Hanaguri, M. Azuma, M. Takano, Z.-X. Shen, and H. Takagi, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1018 (2003).
- [152] R. A. Bertlmann, *Anomalies in Quantum Field Theory* (Oxford University Press, Oxford, 2000).
- [153] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, Z. F. Ren, J. H. Wang, H. Raffy, and Z. Z. Li, Nature **387**, 481 (1997).
- [154] C. C. Tsuei, and J. R. Kirtley, Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000).
- [155] F. C. Zhang, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).
- [156] S. E. Barnes, J. Phys. F **6**, 1375 (1976); J. Phys. F **7**, 2637 (1977).
- [157] P. Coleman, Phys. Rev. B **29**, 3035 (1984).
- [158] Z. Zou, and P. W. Anderson, Phys. Rev. B **37**, 627 (1988).
- [159] Y. Suzumura, Y. Hasegawa, and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **57**, 2768 (1988).
- [160] G. Stemann, *Thèse de Doctorat*, Université Joseph Fourier, Grenoble, 1994; G. Stemann, C. Pépin, and M. Lavagna, Phys. Rev. B **50**, 4075 (1994).
- [161] S. A. Kivelson, D. S. Rokhsar, and J. A. Sethna, Phys. Rev. B **35**, 8865 (1987).
- [162] P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **64**, 1839 (1990).
- [163] R. L. Stratonovitch, Sov. Phys. Dokl. **2**, 416 (1958).
- [164] J. Hubbard, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1959).
- [165] Y. Hasegawa, P. Lederer, T. M. Rice, and P. B. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **63**, 907 (1989).

-
- [166] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958).
- [167] J. Valatin, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).
- [168] A. N. Redlich, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 18 (1984); A. N. Redlich, *Phys. Rev. D* **29**, 2366 (1984).
- [169] J. D. Bjorken, S. D. Drell. *Relativistic Quantum Mechanics*, chap. 3 (McGraw-Hill, 1964); M. E. Peskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, chap. 3, 19 (Addison-Wesley, 1995); K. Huang, *Quantum field theory*, chap. 6, 7 (John Wiley & Sons, 1998)
- [170] S. Deser, R. Jackiw, and S. Templeton, *Ann. Phys.* **140**, 372 (1982);
- [171] I. Affleck, J. Harvey, and E. Witten, *Nucl. Phys. B* **206**, 413 (1982)
- [172] R. Jackiw, *Phys. Rev. D* **29**, 2375 (1984)
- [173] H. B. Nielsen, and M. Ninomiya, *Phys. Lett.* **130B**, 389 (1983).
- [174] G. W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [175] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1987).
- [176] N. Nagaosa, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, chap. 5 (Springer-Verlag, Berlin, 1999); *Quantum Field Theory in Strongly Correlated Electronic Systems*, chap. 3 (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [177] H. Matsukawa, and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 1882 (1992).
- [178] T. C. Hsu, J. B. Marston, and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **43**, 2866 (1991).
- [179] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II - Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [180] G. M. Eliashberg, *Soviet Phys. JETP* **11**, 696 (1960).
- [181] A. B. Migdal, *Soviet Phys. JETP* **7**, 996 (1958).
- [182] G. Kotliar, and J. Liu, *Phys. Rev. B* **38**, 5142 (1988).
- [183] P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1887 (1993).
- [184] Y. Hatsugai, and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **48**, 4204 (1993).
- [185] F. Wenger, and S. Östlund, *Phys. Rev. B* **47**, 5977 (1993).
- [186] T. Moriya and K. Ueda, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 1299-1341 (2003).
- [187] R. Zeyher, and A. Greco, *Phys. Rev. B* **64**, 140510 (2001).
- [188] S. Ishihara, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* **69**, 144520 (2004).
- [189] A. Lanzara, , P. V. Bogdanov, X. J. Zhou, S. A. Kellar, D. L. Feng, E. D. Lu, T. Yoshida, H. Eisaki, A. Fujimori, K. Kishio, J.-I. Shimoyama, T. Noda, S. Uchida, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Nature (London)* **412**, 510 (2001); Z.-X. Shen, A. Lanzara, S. Ishihara, and N. Nagaosa, *Phil. Mag. B* **82**, 1349 (2002).
- [190] Voir la figure 18 de l'article long de Schrieffer *et al.*, référence [65].
- [191] Z. B. Su, L. Yu, J. M. Dong, and E. Tosatti, *Z. Phys. B* **70**, 131 (1988).
- [192] M. Gell-Mann, Y. Ne'eman, *The Eightfold Way* (Advanced Book Classics, Perseus Books, Reading, Massachusetts, 2000).
- [193] I. V. Schensted, *A course on the application of Group theory to Quantum Mechanics*, (NEO Press, Maine, 1976).

- [194] A. Messiah, *Mécanique quantique* (Dunod, Paris, 1995).
- [195] M. Gell-Mann, Phys. Rev. **125**, 1067 (1962).
- [196] L. M. Kaplan, and M. Resnikoff, J. Math. Phys. **8**, 2194 (1967).
- [197] J. A. de Azcárraga, A. J. Macfarlane, A. J. Mountain, and J. C. Pérez Bueno, Nucl. Phys. B **510**, 657 (1998).
- [198] S. Okubo, J. Math. Phys. **23**, 8 (1982).
- [199] J. Goldstone, Nuovo Cimento **19**, 154 (1961).
- [200] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. **93A**, 464 (1983); Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [201] S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, 1057 (1988); Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).