



HAL
open science

Contribution à l'étude des conducteurs quasi-unidimensionnels sous champ magnétique

Gilles Montambaux

► **To cite this version:**

Gilles Montambaux. Contribution à l'étude des conducteurs quasi-unidimensionnels sous champ magnétique. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paris Sud - Paris XI, 1985. Français. NNT : . tel-00600617

HAL Id: tel-00600617

<https://theses.hal.science/tel-00600617>

Submitted on 15 Jun 2011

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.

ORSAY
n° d'ordre :

UNIVERSITE DE PARIS-SUD
CENTRE D'ORSAY

THESE

présentée

Pour obtenir

Le GRADE de DOCTEUR D'ETAT
ès SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Gilles MONTAMBAUX

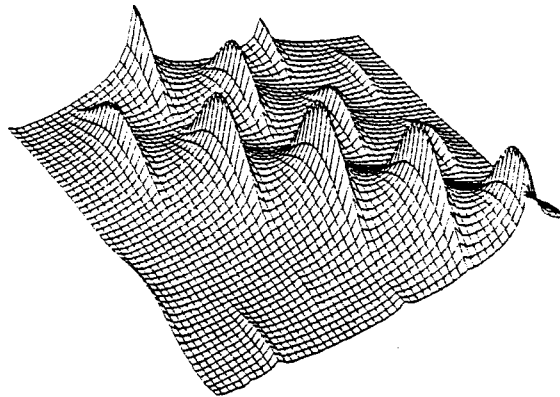
SUJET : Contribution à l'étude des conducteurs quasi-unidimensionnels
sous champ magnétique

soutenue le 16 décembre 1985

devant la Commission d'examen

MM.	J. FRIEDEL	Président
	V. J. EMERY	
	M. HERITIER	
	B. JANCOVICI	
	D. JEROME	
	P. LEDERER	
	G. TOULOUSE	

*In the progress of scientific investigation,
we must frequently travel by rugged paths,
and through vallies as well as over mountains...*



*Such is the imperfection of our faculties ,
that the descent from conviction to hesitation is not
uncommonly as salutary as the more agreeable elevation
from uncertainty to demonstration.*

T. Young

Je remercie Monsieur le Professeur J. Friedel de présider le jury de cette thèse. J'ai toujours été sensible aux conseils qu'il a pu me prodiguer depuis mon entrée au laboratoire.

Ce travail est né au sein d'une équipe. La discussion et la réflexion avec M. Héritier et P. Lederer ont toujours été très stimulantes.

P. Lederer m'a incité à m'orienter vers la physique des conducteurs quasi-unidimensionnels, sujet où la stimulation expérimentale du laboratoire est particulièrement enrichissante. Ses remarques et ses critiques ont été très motivantes. Je lui en suis reconnaissant.

Je remercie M. Héritier avec lequel la collaboration fut toujours très étroite. Les nombreuses discussions que nous avons eues furent très fertiles pour l'élaboration des idées présentées dans cette thèse.

La venue du Professeur L. P. Gor'kov au laboratoire a été très stimulante. Ses critiques ont motivé l'élaboration d'une partie importante de ce travail.

J'exprime ma reconnaissance à Messieurs B. Jancovici et D. Jérôme qui ont accepté de faire partie de ce jury ainsi qu'à Messieurs V. J. Emery et G. Toulouse qui ont accepté d'en être les rapporteurs.

La motivation expérimentale de ce travail est évidente : les discussions avec D. Jérôme, M. Ribault, L. Brossard, B. Piveteau, P. Garoche, F. Pesty, P. Auban et J.P. Ulmet ont été stimulantes. Je souhaiterais qu'elles se poursuivent et s'amplifient.

Je remercie tous ceux qui, à divers titres, m'ont aidé à construire cette thèse : H.J. Schulz, D. Poilblanc, C. Bourbonnais, F. Creuzet, G. Creuzet, J.P. Pouget, T. Giamarchi et les autres membres de la famille ID du laboratoire.

Ces dernières années n'ont pas été consacrées exclusivement à l'étude des conducteurs quasi-unidimensionnels. Je veux profiter de cette page pour souligner le plaisir que j'ai eu à collaborer avec J. P. Jamet. Sa gentillesse et sa chaleur humaine furent pour moi un enrichissement professionnel et personnel.

Je remercie la patience de Madame Kakou et de Madame Dufour. Je suis très reconnaissant à Madame Crappart qui, en plus d'embellir mes brouillons, me signalait les erreurs qui s'y trouvaient. Je remercie Monsieur Saint-Martin pour la réalisation photographique de ce mémoire et Madame Albouze, Monsieur Rasse et Madame Souffez pour le coup de main apporté dans les moments difficiles.

ABSTRACT

This work deals with the magnetic field effects on the phase diagram of quasi-one dimensional conductors. Its aim is to understand how a magnetic field can destroy a metallic phase and induce a Spin Density Wave (SDW) phase, as is experimentally observed in organic conductors such as the Bechgaard salts. It is divided in two main parts :

- The magnetic field Zeeman coupling to the *one-dimensional* (1D) electron gas freezes certain electronic interaction processes and thus alters the character of 1D fluctuations. The evolution of the various instabilities of the electron gas (Charge or Spin Density Wave, singlet or triplet superconductivity) is described when the field, as well as the chemical potential, are varied. The latter has been shown to have the same effect on the charge degrees of freedom in the vicinity of half-band filling as the magnetic field on the spin degrees of freedom.

- In the case of the *quasi-one dimensional* electron gas, SDW condensation is shown to depend both on the Fermi surface geometry (nesting properties and on a new mechanism due to the magnetic field orbital coupling : the quantization of electronic motion. This new aspect, baptized quantized nesting effect, has the following consequences :

. A series of first order transitions between SDW sub-phases appears as the magnetic field increases

. Each subphase is labelled by an integer quantum number n . It is characterized by n completely filled Landau levels.

. At zero temperature, one expects a Hall effect quantization.

This theory allows to understand practically all experimental results obtained so far in field induced SDW phases in the Bechgaard salts.

III.C.2.b. La méthode	50
α - Représentation bosonisée des champs de fermions	50
β - Représentation bosonisée de l'hamiltonien	52
γ - Découplage des degrés de liberté de spin et de charge	53
δ - Découplage "droite gauche"	54
ϵ - La solution de Tomonaga	54
ζ - La solution de Luther-Emery	55
III-C.2.c. Les résultats	56
III-D. Equivalence des problèmes de champ magnétique et de potentiel chimique	59
III-E. Les fonctions de réponse sous champ	65
a) La ligne de Tomonaga	67
b) La ligne de Luther-Emery	67
c) Cas général	68
III-F. Diagramme de phases du gaz d'électrons 1D sous champ magnétique et en fonction du potentiel chimique	71
a) $g_{1//} \geq g_{1\perp} , g_{1//} - 2g_2 \geq g_3 $	71
b) $g_{1//} < g_{1\perp} , g_{1//} - 2g_2 \geq g_3 $	73
c) $g_{1//} \geq g_{1\perp} , g_{1//} - 2g_2 < g_3 $	79
d) $g_{1//} < g_{1\perp} , g_{1//} - 2g_2 < g_3 $	79
III-G. Conclusion	81
III-H. Le gaz d'électrons quasi-unidimensionnel	83
<u>Chapitre IV</u> : EFFETS ORBITAUX DU CHAMP MAGNETIQUE SUR LE GAZ D'ELECTRONS QUASI-1D	87
IV-A. Introduction	89
IV-B. Choix d'une relation de dispersion	91
IV-C. Susceptibilité et instabilité du gaz d'électrons en champ nul	97
IV-C.1. Le nesting parfait, $t_b' = 0$	97
IV-C.2. Le nesting imparfait, $t_b' \neq 0$	101
IV-D. Instabilité de la phase métallique sous champ magnétique	107
IV-D.1. La théorie de Gor'kov et Lebed	107
IV-D.2. Le nesting quantifié	113
a) Démonstration du nesting quantifié	114
b) Interprétation physique	115

IV-D.3. Etude de la susceptibilité du gaz d'électrons 2D avec surface de Fermi ouverte, sous champ magnétique	118
a) un cas particulier : le nesting parfait, $t'_b = 0$	118
b) le nesting imparfait, $t'_b \neq 0$	124
c) Evolution du maximum de la susceptibilité en fonction du champ magnétique	135
d) Variation du vecteur de meilleur nesting sous champ	135
e) Description semiclassique de la susceptibilité	139
IV-D.4. Ligne d'instabilité de la phase métallique. Transitions vers des phases Onde de Densité de Spin	141
IV-D.5. Instabilité et nesting quantifié dans le gaz d'électrons 3D	143
IV-E. Description des phases condensées	147
IV-E.1. Heuristique. Cascade de transitions de phase induite par le champ magnétique	147
IV-E.2. Théories des phases condensées	149
a) Voisinage de la ligne d'instabilité	149
b) La théorie de Yamaji	153
IV-E.3. L'effet Hall	157
<u>Chapitre V</u> : APPLICATION AUX SELS DE BECHGAARD ET EXPERIENCES RECENTES	163
V-A. Introduction	165
V-B. Discussion des résultats expérimentaux	169
V-B.1. Chaleur spécifique	169
V-B.2. Les mesures de transport	171
a) Magnéto-résistance	171
b) Effet Hall	173
V-B.3. Aimantation	178
V-B.4. Diagramme de phases sous pression	178
V-C. Comparaison avec les diagrammes de phases théoriques	181
V-D. L'évolution du vecteur d'onde sous champ est-elle observable ?	184
V-E. Au delà de 10 Teslas....	185
V-F. Le vecteur de nesting dans les sels de Bechgaard	188

<u>CONCLUSION</u>	191
<u>APPENDICES</u>	197
A - Equation de Lie pour les fonctions de réponse	199
B - Renormalisation d'une fonction de réponse sous champ	200
C - Gaz d'électrons quasi-unidimensionnel	
Découplage des canaux Cooper et zero-son	
Effet du champ magnétique	202
D - Etude de la susceptibilité en champ nul et à température nulle	207
E - Susceptibilité sous champ magnétique	211
F - Ligne de transitions de phases du premier ordre au voisinage de deux lignes du second ordre	214
G - Développement microscopique des équations de Ginzburg-Landau	216
<u>REFERENCES</u>	223

CHAPITRE I

INTRODUCTION

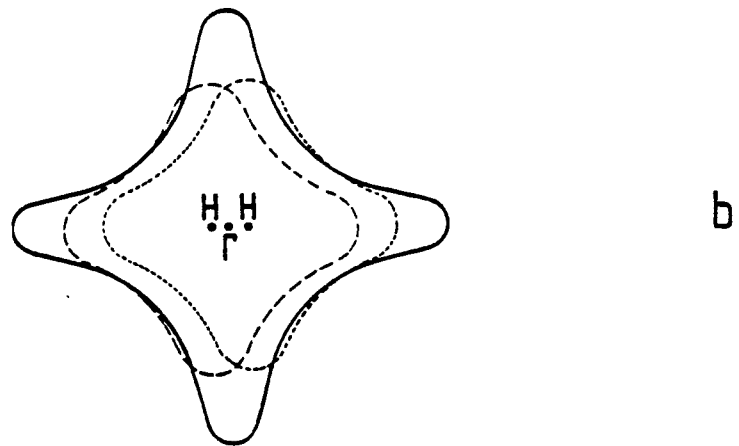
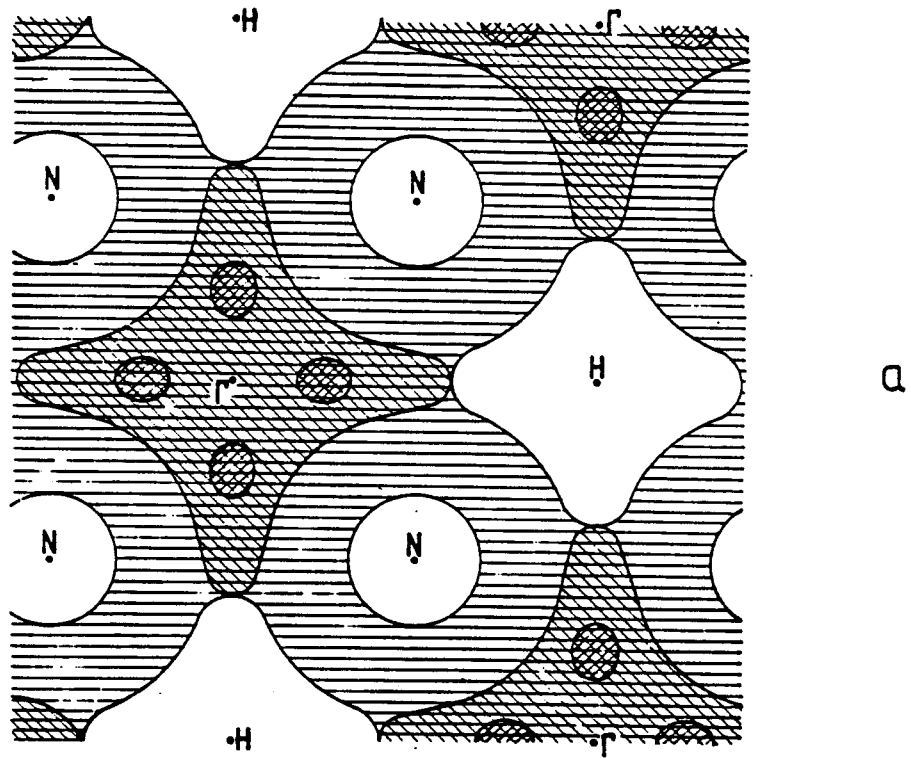


Figure 1

- a) Section étendue du plan (100) de l'espace réciproque dans le chrome. Chaque région indique des zones d'occupation électronique différentes.
- b) Surface de Fermi d'électrons centrée sur Γ (trait plein). La surface de Fermi de trous centrés sur H est superposée sur la surface de Fermi d'électrons pour un vecteur de nesting $(1.04, 0, 0)$ ou $(0.96, 0, 0)$ (tirets).

I - A. INTRODUCTION

La réduction de la dimensionnalité d'un système physique, c'est-à-dire le fait que les processus physiques mis en jeu aient lieu dans des plans ou des chaînes faiblement couplés, entraîne parfois des comportements de ce système qualitativement différents de ce qu'ils seraient à trois dimensions. Les conducteurs quasi-unidimensionnels (quasi-1D) sont un lieu privilégié pour cette nouvelle physique : leur structure consiste en des empilements de molécules avec un recouvrement des orbitales électroniques dans une direction de l'espace, formant ainsi des chaînes faiblement couplées, ce qui induit une forte anisotropie des propriétés électroniques. Cette anisotropie se traduit par une surface de Fermi ouverte dont les nappes constitutives sont presque planes. Elles le seraient parfaitement dans un composé strictement 1D.

La conséquence de cette structure électronique est l'instabilité presque inévitable de la phase métallique vis-à-vis d'un état fondamental caractérisé par un ordre Onde de Densité de Spin (ODS) ou Onde de Densité de Charge (ODC) dans lesquels la densité de spin ou la densité électronique sont modulées spatialement. Ces états ne sont pas caractéristiques uniquement des composés quasi-1D ; on les retrouve aussi dans certains composés tridimensionnels comme le chrome dans lequel la surface de Fermi présente des propriétés géométriques particulières (figure 1) [1-3]. L'origine en est l'instabilité de la phase métallique induite par un potentiel $V_{\vec{q}}$ qui couple des états de vecteur d'onde \vec{k} et $\vec{k} + \vec{q}$, conduisant ainsi à un abaissement d'énergie

$$\Delta E = - x_0(\vec{q}) V_{\vec{q}}^2 \quad \text{avec} \quad x_0(\vec{q}) = \frac{2}{L} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}} \quad (\text{I.1})$$

où $f(\epsilon)$ est la distribution de Fermi. La réponse du gaz électronique à une perturbation $V_{\vec{q}}$ est donc d'autant plus forte que se trouvent ainsi couplés le plus grand nombre d'états de vecteurs d'onde \vec{k} et $\vec{k} + \vec{q}$ (petits dénominateurs dans eq. I.1) avec un nombre d'occupation différent (grand numérateur), c'est-à-dire au voisinage de la surface de Fermi. En termes géométriques, la susceptibilité

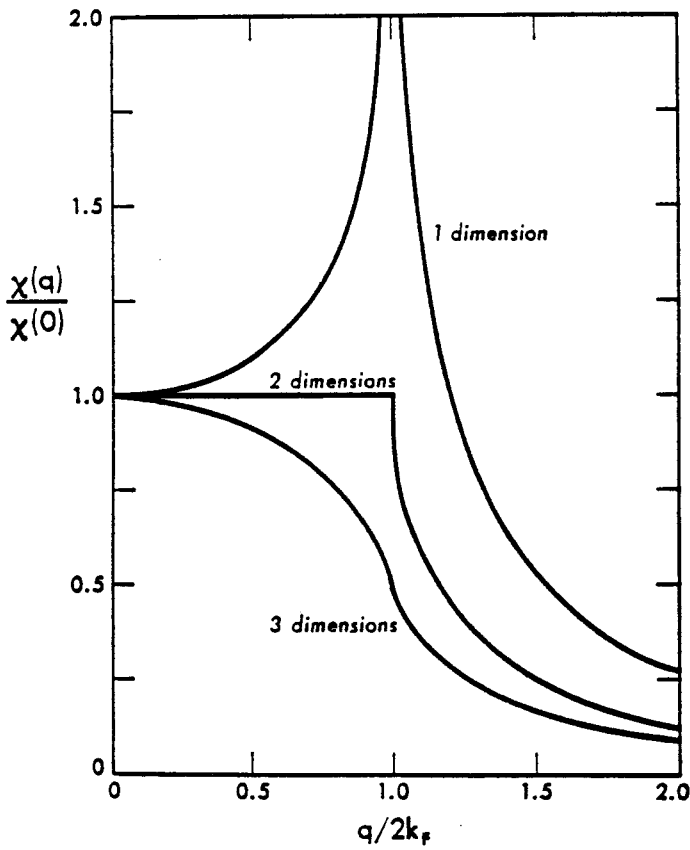


Figure 2

Susceptibilité, à température nulle, du gaz d'électrons libres à une, deux et trois dimensions, pour lequel on a rappelé l'emboîtement (nesting) de la surface de Fermi correspondante. A une dimension une translation de vecteur d'onde $2k_F$ superpose exactement l'une sur l'autre les deux nappes de la surface: l'emboîtement est parfait.

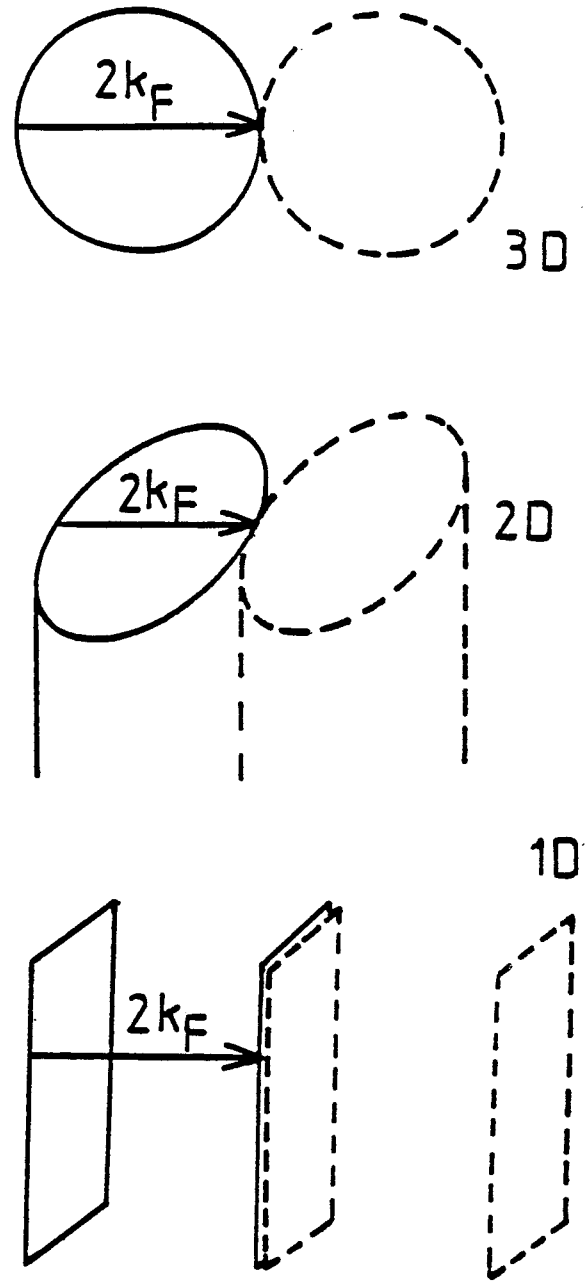
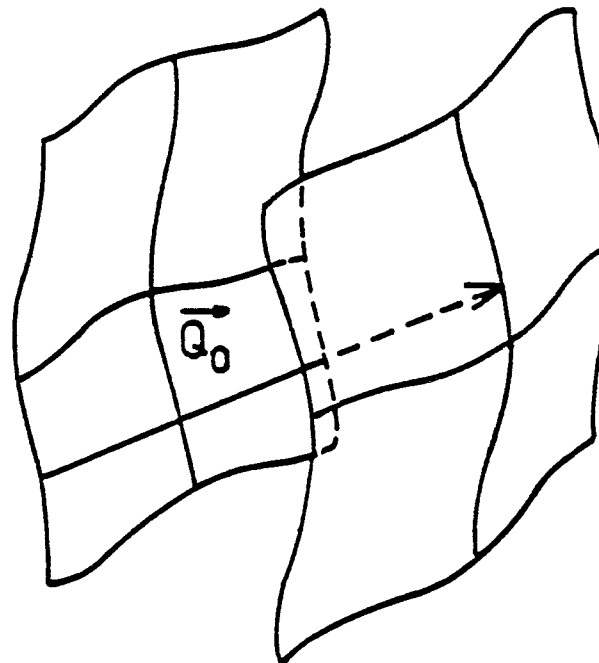


Figure 3

Dans le cas plus réaliste d'un conducteur quasi-1D, la surface de Fermi est ouverte, constituée de deux nappes gondolées dont la géométrie exacte dépend du couplage interchaîne. L'instabilité de la phase métallique vis-à-vis de la formation d'une Onde de Densité dépend alors des détails de cette géométrie. L'Onde de Densité se condense au vecteur de meilleur nesting \vec{Q}_0 .



$\chi_0(\vec{q})$ est d'autant plus forte que la surface de Fermi et la surface de Fermi translatée du vecteur \vec{q} ont des parties communes importantes, c'est à dire qu'elles "s'emboîtent" mieux l'une sur l'autre. Cette propriété est décrite par le mot anglais "nesting" (nichage, emboîtement) si largement utilisé que nous l'emploierons tout au long de ce travail (figure 2).

La modulation spatiale de l'état fondamental ODC ou ODS est caractérisée par le vecteur d'onde \vec{Q}_0 , dit de meilleur nesting, qui maximise la susceptibilité $\chi_0(\vec{q})$ de la phase métallique. C'est par exemple le cas dans le chrome où une surface de Fermi d'électrons et une autre de trous s'emboîtent l'une dans l'autre (figure 1).

Un nesting important et un état fondamental Onde de Densité sont exceptionnels dans les composés tridimensionnels. Mais ils sont caractéristiques des composés quasi-1D à surface de Fermi ouverte dont les nappes, presque planes, s'emboîtent quasiment l'une sur l'autre (figure 3). De tels composés ont été largement étudiés depuis une dizaine d'années, au début pour une raison très pratique : la recherche de la supraconductivité. Cependant, dans la plupart des cas, se forme d'abord une phase Onde de Densité qui, elle, est caractérisée par un état isolant ou très peu conducteur. L'étude de l'état Onde de Densité a été à l'origine d'un large spectre de résultats physiques et de concepts nouveaux. Citons en particulier: la conduction par le glissement des Ondes de Densité de Charge [4], mécanisme non linéaire observé au-delà d'un champ électrique seuil ; la dynamique de ces Ondes de Densité de Charge [5] ; leur sensibilité aux défauts fixes [6] ou mobiles [7], etc...

La compétition entre les différentes instabilités - de type supraconductrice ou Onde de Densité - du gaz d'électrons est caractéristique des conducteurs quasi-1D. Elle peut se traduire, suivant le caractère plus ou moins 1D du composé, par l'existence de fortes fluctuations, donc par l'absence d'ordre à longue distance caractéristique des systèmes 1D. Il est alors particulièrement intéressant d'étudier la compétition entre ces différentes phases dont la proximité en énergie est inhabituelle mais dont les propriétés macroscopiques sont tout à fait différentes. Des variations modérées de paramètres extérieurs tels que la pression, la température, la structure du réseau

atomique, le champ magnétique, permettent d'induire toute une variété de transitions de phases.

Parmi ces paramètres, le champ magnétique peut modifier radicalement le diagramme de phase et cela pour deux raisons :

- le champ se couple au spin de l'électron et sépare la bande électronique en deux sous-bandes de spins opposés. Ceci a pour conséquence de geler certains processus d'interactions électroniques, donc de modifier le diagramme de phase. Nous étudierons ces effets dans la première partie de cette thèse (Chapitre III).

- par son couplage au moment orbital des électrons, le champ modifie radicalement le spectre électronique pour toute dimensionnalité d'espace supérieure à 1. Lorsque les orbites électroniques sont fermées, le spectre en énergie, au lieu d'être continu, se répartit en niveaux discrets, les niveaux de Landau. Cette quantification du mouvement orbital est à l'origine des oscillations en fonction du champ, de l'aimantation (effet de Haas-Van Alphen) ou de la magnétorésistance (effet Shubnikov-de Haas) observées à basse température dans les métaux [8] ; elle est également à l'origine de la quantification de l'effet Hall observée dans certaines structures parfaitement bidimensionnelles [9].

Dans les composés quasi-1D les orbites électroniques ouvertes au voisinage de la surface de Fermi ne sont pas quantifiées. Dans ce cas, notre travail démontre que l'instabilité de la phase métallique est alors conditionnée par la structure en orbites quantifiées du gaz électronique de la phase condensée. C'est ce double aspect - instabilité du gaz d'électrons et quantification des orbites sous champ - qui est la cause de phénomènes nouveaux observés dans une famille de composés 1D - les sels de Bechgaard - et que nous allons étudier dans la seconde partie de cette thèse.

I - B. BUT ET ORGANISATION DE LA THESE

I. B. 1. Présentation de la famille des sels de Bechgaard

Parmi les conducteurs quasi-1D, ce sont les sels de Bechgaard qui présentent la plus grande richesse de transitions de phases [10]. En particulier, c'est dans cette famille de composés qu'a été observée pour la première fois la supraconductivité dans un composé organique [11]. C'est également dans deux membres de cette famille, le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ et le $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ qu'a été observée pour la première fois une cascade de transitions vers des états Onde de Densité de Spin, induits par un champ magnétique.

Rappelons brièvement la structure de ces composés [10]. Les molécules de TMTSF (tétraméthyltétrasélénafulvalène) sont constituées d'atomes de carbone, de sélénium et d'hydrogène. Ces molécules s'empilent comme des assiettes, formant ainsi des chaînes entre lesquelles s'intercalent les anions complètement ionisés (figure 4). Comme il y a un anion pour deux molécules de TMTSF, la bande électronique, constituée par le recouvrement des orbitales moléculaires des molécules organiques, est au 3/4 remplie. Le recouvrement des orbitales dans les directions perpendiculaires aux chaînes est faible, ce qui conduit à une anisotropie des conductivités qui est typiquement, à température ambiante: $\sigma_a \approx 500 (\Omega\text{cm})^{-1}$, $\sigma_b \approx 10 (\Omega\text{cm})^{-1}$, $\sigma_c \approx 0,01 (\Omega\text{cm})^{-1}$. Elle reflète l'anisotropie des intégrales de transfert: $t_a \approx 3000 \text{ K}$, $t_b \approx 300 \text{ K}$, $t_c \approx 10 \text{ K}$, d'où le nom de conducteur quasi-1D donné à ces composés.

I - B. 2. Les méthodes d'investigation à une et trois dimensions

En principe, deux modélisations limites sont envisageables pour comprendre les propriétés électroniques des conducteurs quasi-1D :

- Dans la première, que nous développons au chapitre III, on suppose que les propriétés essentielles des quasi-1D sont réminiscentes du caractère purement 1D. Ces aspects spécifiquement 1D sont :

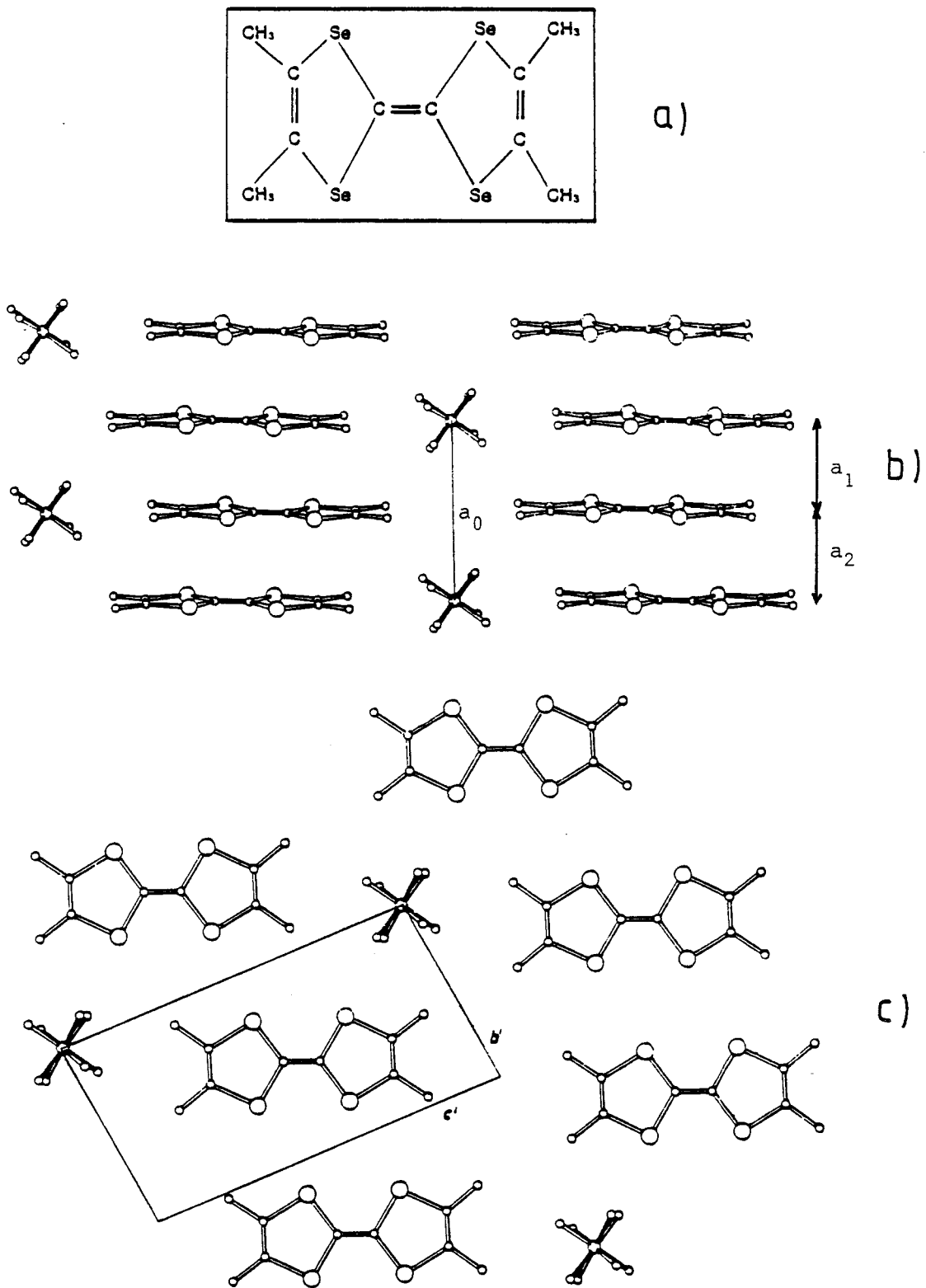


Figure 4

Structure cristallographique des sels de Bechgaard. Les molécules TMSF (4a) sont empilées le long de l'axe \vec{a} (4b). A cause d'une faible dimérisation, les distances a_1 et a_2 sont légèrement différentes. Entre ces empilements, s'intercalent les anions. \vec{b}' et \vec{c}' sont les projections des axes \vec{b} et \vec{c} dans le plan des molécules (4c). Ici les deux directions des anions ClO_4^- ont été indiquées.

. d'une part, la compétition entre différentes instabilités, supraconductrices ou Ondes de Densité ;

. d'autre part l'existence de fortes fluctuations thermiques ou quantiques liées précisément au développement simultané de plusieurs types d'instabilités. Par conséquent, il n'y a pas d'ordre à longue distance. On suppose alors que c'est un faible couplage entre chaînes 1D qui stabilise la phase correspondant à l'instabilité la plus forte.

- L'autre limite consiste à supposer que, si le conducteur a effectivement des propriétés électroniques très anisotropes, ces propriétés sont suffisamment bi- ou tridimensionnelles pour que l'on puisse négliger les fluctuations et décrire le gaz d'électrons à l'aide d'une théorie de liquide de Fermi. Le caractère quasi 1D est pris en compte uniquement par l'existence d'une surface de Fermi ouverte dont la structure exacte - ainsi que la nature des interactions électroniques - conditionne l'apparition de tel ou tel type d'instabilité.

Ces deux comportements extrêmes sont ceux du gaz d'électrons quasi 1D, respectivement à haute et à basse température. Il existe une température de cross-over T_x qui dépend du couplage interchaînes et qui sépare ces deux comportements. Le fait de savoir si le caractère unidimensionnel est essentiel ou non pour la description des propriétés physiques des sels de Bechgaard a été l'objet de vives controverses et n'est pas encore vraiment résolu. Certains auteurs argumentent que l'anisotropie des intégrales de transfert n'est pas assez grande et pensent qu'une théorie de champ moyen décrit correctement toutes les instabilités des sels de Bechgaard [12, 13]. Selon eux, les températures de transition (supra ou ODS) sont largement inférieures à T_x et égales à leur valeur obtenue en champ moyen T_{CM} . D'autres auteurs pensent que la théorie du gaz unidimensionnel décrit les caractéristiques essentielles de ces composés en particulier les transitions de phase [10, 14]. Des effets précurseurs dus aux fortes fluctuations 1D du paramètre d'ordre peuvent ainsi s'étendre bien au-delà de T_c , jusqu'à la température de champ moyen beaucoup plus élevée [14,15]. Dans ce cas, $T_c \lesssim T_x \ll T_{CM}$ (figure 5). Par exemple, en supposant une température de cross-over de l'ordre de 7 K, Bourbonnais donne une explication des déviations à la loi de Korringa observées dans plusieurs sels de Bechgaard [16,18]. Selon Bourbonnais [16], une valeur aussi faible de T_x est possible, car les corrélations électroniques peuvent réduire fortement l'estimation $T_x \approx t_b/\pi$ (≈ 100 K dans les sels de Bechgaard) obtenue dans une théorie à un électron [19].

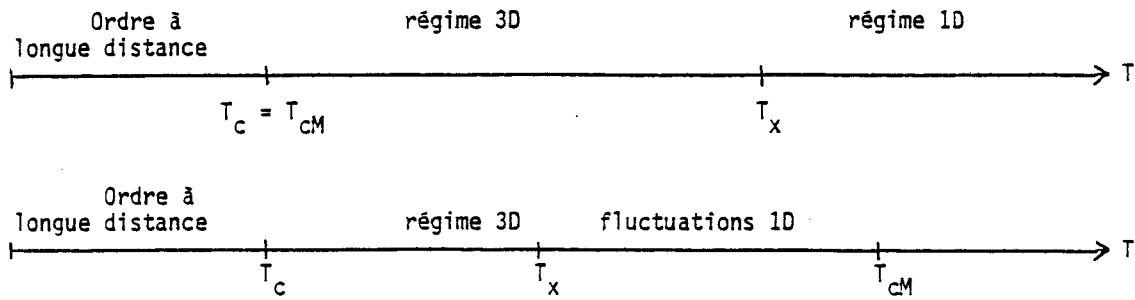


Figure 5

Situations extrêmes pour la description des conducteurs quasi-unidimensionnels. Dans le premier cas, une théorie de champ moyen décrit correctement le système et ses transitions de phase. Dans le second, des fluctuations 1D s'étendent jusqu'à la température T_{CM} de champ moyen qui peut être beaucoup plus grande que la température de transition T_c .

I - B. 3. Les effets du champ magnétique

L'interaction du gaz d'électrons avec un champ magnétique contient deux contributions très différentes, le champ se couplant d'une part au moment magnétique orbital de l'électron et d'autre part à son spin. Ces deux contributions modifient l'hamiltonien de l'électron libre qui s'écrit

$$\mathcal{H} = \sigma \mu_B H + \frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} \quad \sigma = \pm 1$$

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$$

Le premier terme, le terme Zeeman, lève la dégénérescence de spin de l'Hamiltonien. Son effet est de séparer la bande électronique en deux sous-bandes de spin $\pm 1/2$. En l'absence de couplage spin-orbite, cette contribution est isotrope, indépendante de la direction du champ.

La seconde contribution, orbitale, a des conséquences plus riches. Elle décrit le couplage au moment cinétique de l'électron. Pour des électrons libres, ou plus généralement chaque fois que les orbites électroniques sont fermées, elle décrit la quantification du flux à travers l'orbite électronique, conduisant au spectre discret des niveaux de Landau. Les effets orbitaux sont en général anisotropes et, de leur étude, on peut déterminer l'anisotropie des propriétés électroniques (par exemple par l'anisotropie des champs critiques

supra). Dans un système strictement unidimensionnel, ces effets n'existent pas, tout simplement parce qu'il n'y a pas de moment cinétique orbital ; il est toujours possible de choisir le potentiel vecteur dans une direction perpendiculaire à l'unique composante de l'impulsion. Mais nous montrerons dans ce mémoire que ces effets orbitaux peuvent devenir essentiels dans un système quasi 1D.

I - B. 4. Plan de la thèse

Dans un premier chapitre (II), nous rappellerons le caractère tout à fait inhabituel du diagramme de phases sous champ magnétique du plus étudié des sels de Bechgaard, le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$, ainsi que les différentes étapes expérimentales qui ont abouti à l'établissement de ce diagramme. Ces résultats ont été une motivation essentielle dans l'élaboration de notre travail.

Nous aborderons ensuite les différentes méthodes théoriques (III, IV) que nous avons utilisées pour comprendre le comportement sous champ des conducteurs quasi-1D. Dans ces deux parties (III, IV), nous ne ferons pas référence aux sels de Bechgaard (sauf pour quelques évaluations numériques). En effet, les résultats que nous exposons semblent suffisamment généraux pour ne pas être considérés uniquement comme des théories spécifiques de tel ou tel composé mais plutôt comme un cadre général pour comprendre la physique des conducteurs quasi-1D sous champ.

La première partie de ce mémoire (III) consiste à décrire les effets de spin du champ magnétique sur le gaz d'électrons strictement unidimensionnel. Il est bien établi maintenant que les effets spectaculaires observés dans les sels de Bechgaard sont dus à des effets orbitaux que nous décrivons dans la seconde partie de ce travail (IV). Cette première partie peut donc sembler un peu formelle. Néanmoins, cette étude est intéressante pour plusieurs raisons :

- Les effets orbitaux peuvent être négligeables si le champ magnétique est parallèle aux chaînes.

- On peut envisager des systèmes dans lesquels le couplage interchaîne est suffisamment faible pour que, dans un certain domaine de champ et de température, le système quasi 1D se comporte comme une assemblée de chaînes 1D indépendantes : $\mu_B H \gg T_x$; $T \gg T_x$.

- Le problème du gaz d'électrons 1D est relié à de nombreux autres problèmes de basse dimensionnalité. Sa résolution utilise des méthodes qui leur sont communes et des techniques théoriques assez variées. L'étude des effets de champ

présente donc un intérêt théorique en lui-même. Par ailleurs, ainsi que nous allons le démontrer au paragraphe III-D, il se trouve que ce problème est analogue à celui qui décrit l'effet du potentiel chimique sur le gaz d'électrons au voisinage de la commensurabilité d'une bande 1/2 remplie. Cette approche à la commensurabilité est aussi un problème important à étudier, étant donné qu'un certain nombre de métaux organiques présentent une variation continue du transfert de charge en fonction de la température ou de la pression.

Etant donné l'intérêt suscité par la physique des conducteurs quasi-1D et les efforts constants pour synthétiser de nouveaux composés dans lesquels se révélera un caractère plus ou moins 1D, il nous est donc apparu nécessaire de donner une description complète du gaz d'électrons 1D sous champ magnétique et en fonction du remplissage de bande. Nous discutons à la fin de cette partie l'effet d'un couplage interchaîne sur l'observabilité des effets de spin (III-H).

La seconde partie (IV) décrit des résultats physiques à la fois beaucoup plus originaux et plus simples. Nous étudions les conséquences des effets orbitaux sur la susceptibilité χ_0 du gaz d'électrons quasi-1D avec une surface de Fermi ouverte, dans le régime tridimensionnel. Nous montrons que le champ modifie totalement la structure de χ_0 , conduisant ainsi à des effets physiques nouveaux liés à la quantification des orbites électroniques. Nous avons pu ainsi comprendre l'origine de la cascade de transitions de phase ainsi que la plupart des résultats expérimentaux obtenus dans les sels de Bechgaard sous champ magnétique (V).

C H A P I T R E I I

HISTOIRE DE L'ETUDE, DANS LES SELS DE BECHGAARD,
DES TRANSITIONS DE PHASE INDUITES PAR LE CHAMP MAGNETIQUE

L'histoire n'est vraiment intéressante et instructive que si elle permet d'observer l'ensemble des événements dans leur interdépendance, avec leurs similitudes et leurs différences.

Polybe

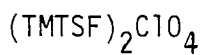
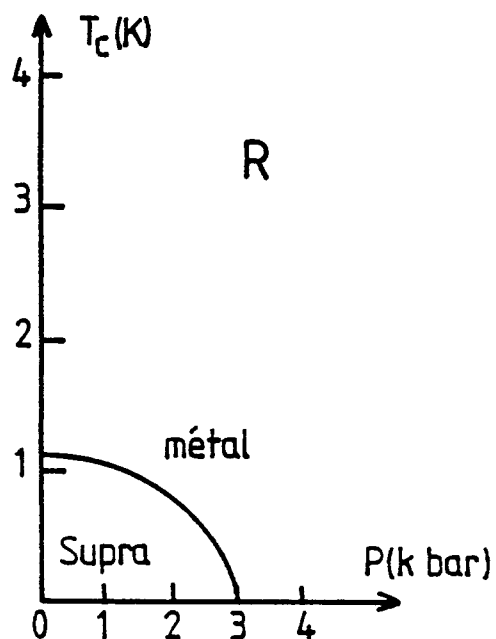
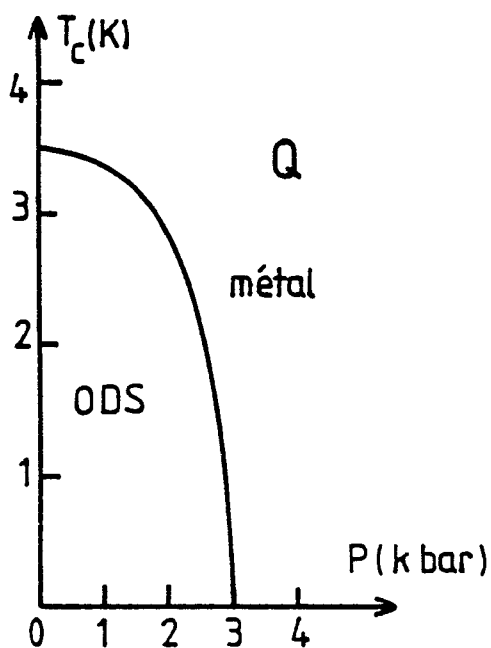
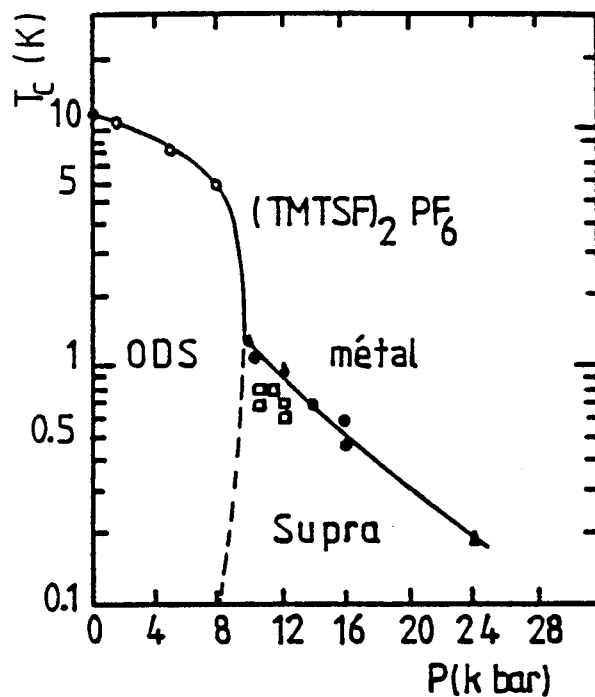


Figure 6 : Diagrammes de phases des sels de Bechgaard (TMTSF)₂PF₆ [10] et (TMTSF)₂ClO₄ (d'après [20]) en champ magnétique nul. Pour le (TMTSF)₂ClO₄, l'état fondamental dépend des conditions de refroidissement : Q = quenched = trempé ; R = relaxed = lentement refroidi.

Dans ce chapitre, nous tentons de présenter une synthèse : elle rappelle les différents résultats expérimentaux qui ont conduit à suspecter, dans deux sels de Bechgaard, l'existence d'une cascade de transitions entre phases Onde de Densité de Spin (ODS), cascade induite par le champ magnétique. La figure 6 rappelle le diagramme de phases de ces composés en champ nul.

La première observation d'une phase induite par le champ magnétique dans ces sels a été faite en 1981 par Kwak et coll. dans le sel $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ sous pression [21]. Il n'est alors pas encore question de phase proprement dite mais simplement de l'apparition, au-dessus d'un champ seuil H_T , d'oscillations Shubnikov-de Haas (SdH). Ce champ seuil varie avec la pression. Il est de l'ordre de 6,5 T à 6,9 kbar et de 7,5 T à 8 kbar. Ces premières expériences précisent déjà des caractéristiques importantes de cet effet du champ. La magnéto-résistance est très anisotrope au-dessus du champ seuil. L'effet du champ est maximal (c'est-à-dire que le champ seuil est alors minimal, égal à H_T) lorsque le champ est appliqué selon l'axe c^* , perpendiculaire au plan (a, b) de meilleure conductivité. Si le champ s'écarte d'un angle α de cette direction, il faut appliquer un champ seuil $H = H_T / \cos\alpha$ pour voir ces oscillations apparaître. La période des oscillations varie aussi comme $1/\cos\alpha$. Ce résultat montre qu'il s'agit là d'un effet dépendant uniquement de H_z , composante du champ parallèle à c^* , et donc d'un effet orbital. Par ailleurs, la fréquence des oscillations implique un nombre de porteurs de l'ordre de 1 % de la zone de Brillouin. De plus, ces oscillations n'ont pas la forme habituelle des oscillations SdH. Par des mesures RMN de temps de relaxation spin-réseau, Azevedo et coll. étudient la variation du champ H_T en fonction de la température et de la pression et commencent à parler de transition de phase [22].

Le même genre d'effet est observé dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ à pression nulle avec des champs critiques tout à fait comparables ($H_T = 6,7\text{ T}$ à 1,08 K et $H_T = 8\text{ T}$ à 1,66 K) par Kwak et coll. [23] et aussi par Bando et coll. qui, de plus, rapportent l'observation d'oscillations SdH de plus courte période, à 1,8 K, au-dessus de 12 T [24].

Les mesures de chaleur spécifique effectuées par Garoche et coll. montrent que, dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$, le changement de comportement observé au champ

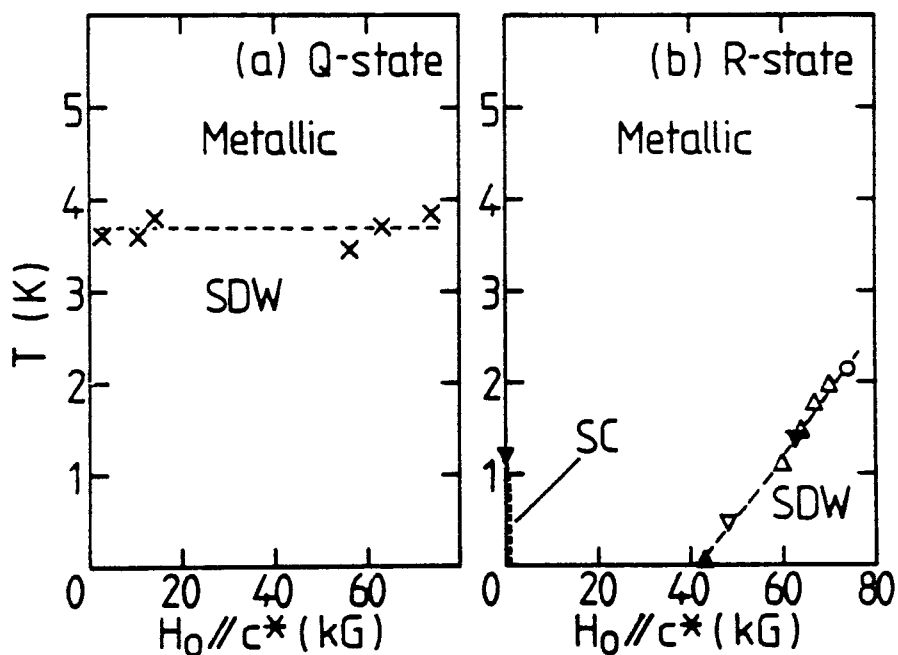


Figure 7 : Diagrammes de phases proposés par Takahashi et coll. [28] pour le $(TMTSF)_2ClO_4$, lorsqu'un champ magnétique H est appliqué selon l'axe c'' , perpendiculaire au plan le plus conducteur. Les résultats de chaleur spécifique (∇ [25]), l'apparition d'oscillations de type "Shubnikov-de Haas" (Δ [23], ∇ [24] et \blacktriangle [41]) sont reportées en plus des résultats obtenus en RMN (x et 0).

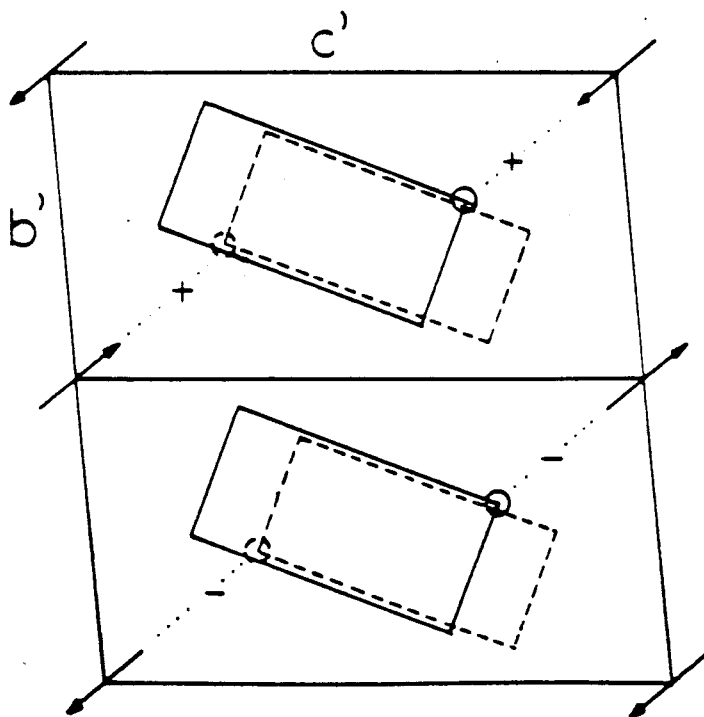
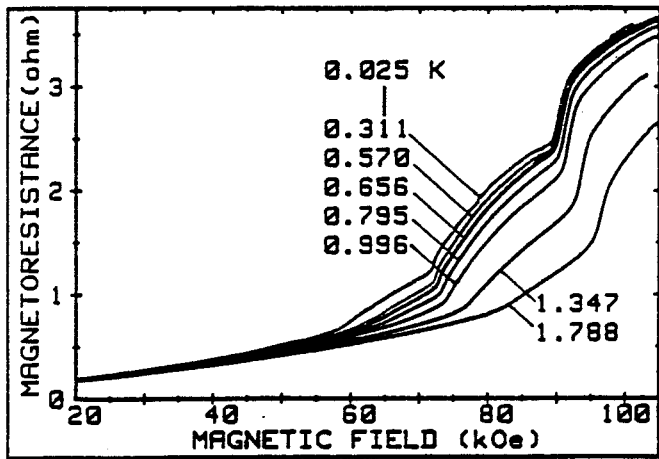


Figure 8 : Projection schématique de la structure de $(TMTSF)_2ClO_4$ sur un plan perpendiculaire à l'axe d'empilement. En dessous de 24 K, à cause de l'ordre des anions, deux empilements voisins n'ont plus le même environnement. L'orientation des anions ClO_4^- est indiquée par les flèches, les plans successifs de TMTSF le sont par des rectangles (Pouget et coll. [32]).

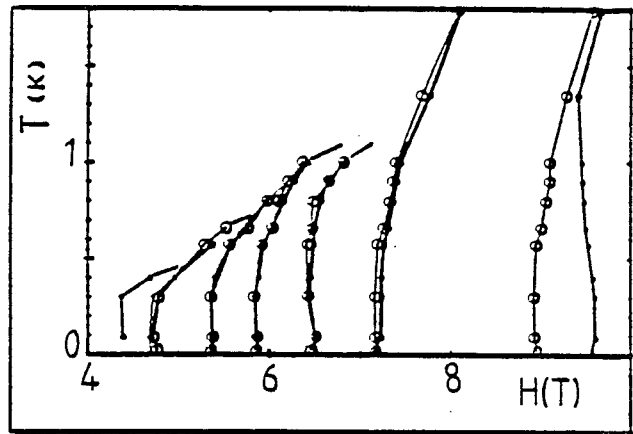
seuil est effectivement une transition de phase du second ordre et que la phase induite par le champ est caractérisée par une faible densité d'états au niveau de Fermi [25, 26].

Enfin, Takahashi et coll., par des mesures de l'amplitude et du temps de relaxation de la résonance nucléaire de ^{77}Se et de ^1H , confirment cette transition et, surtout, montrent que la phase observée au-delà de H_T est une phase magnétique caractérisée par un petit nombre de porteurs [27, 28]. Bien que le sel $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ présente une phase induite par le champ dans des conditions expérimentales plus simples (pression atmosphérique) que dans $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, les effets observés y sont plus compliqués car ils dépendent de la vitesse de refroidissement de l'échantillon [27, 28]. Dans un échantillon trempe, c'est à dire refroidi à une vitesse de l'ordre de 2K/sec ou plus rapide, l'état fondamental en champ nul est un état Onde de Densité de Spin (ODS) stabilisé vers 3,7 K et le champ magnétique n'influe pas sur cette température de transition (figure 7). Si l'échantillon est refroidi lentement (à un taux de 0,2 K/min ou moins) l'état fondamental est supraconducteur. Un champ H_{c2} de l'ordre de 0,1 T restaure la phase métallique [29], et la phase ODS apparaît au-delà du champ seuil estimé à 4,3 T (extrapolé à température nulle). D'autres auteurs trouvent un champ seuil plus faible. Sa valeur dépend de l'orientation et du refroidissement du cristal).

L'importance des conditions de refroidissement sur les expériences réalisées dans ce sel [30, 31] provient de l'existence d'une transition de phase structurale à 24 K, mise en évidence aux rayons X [32-34]. A cette température, apparaissent des pics de surstructure suivant le vecteur d'onde $\vec{q} = (0, 1/2, 0)$ et dont l'intensité et la largeur dépendent du traitement thermique. Ces pics sont dus à l'apparition d'un ordre d'orientation des anions ClO_4^- . Ce sont des anions non centrosymétriques, contrairement aux anions PF_6^- . On peut donc y définir deux directions non équivalentes. L'ordre d'orientation le long de l'axe b implique un doublement de la cellule unitaire le long de l'axe b (figure 8). Cette mise en ordre des anions n'est réalisée que si la vitesse de refroidissement est suffisamment lente, alors qu'une trempe de l'échantillon gèle leur désordre existant à haute température. Il a été montré par ailleurs que c'est la vitesse de refroidissement dans le domaine de température proche de la transition structurale qui conditionne l'ordre des anions et que l'ordre ainsi obtenu ne dépend pratiquement plus de la vitesse de trempe en dessous de 18 K [34, 35]. La description des propriétés physiques de ce sel nécessite donc de préciser les conditions de trempe dans lesquelles



a



b

Figure 9 : a) Oscillations de la magnétorésistance dans $(TMTSF)_2ClO_4$, dans l'état R, lentement refroidi, pour différentes températures (Kajimura et coll. [41]).

b) Dépendance en température des champs d'oscillation obtenue par un balayage en champ croissant (●) et décroissant (○) [41]. On verra que ce diagramme est en fait un diagramme de phases. (Les champs caractéristiques sont plus élevés que dans les diagrammes ultérieurs. Ceci est dû à une mauvaise orientation du champ).

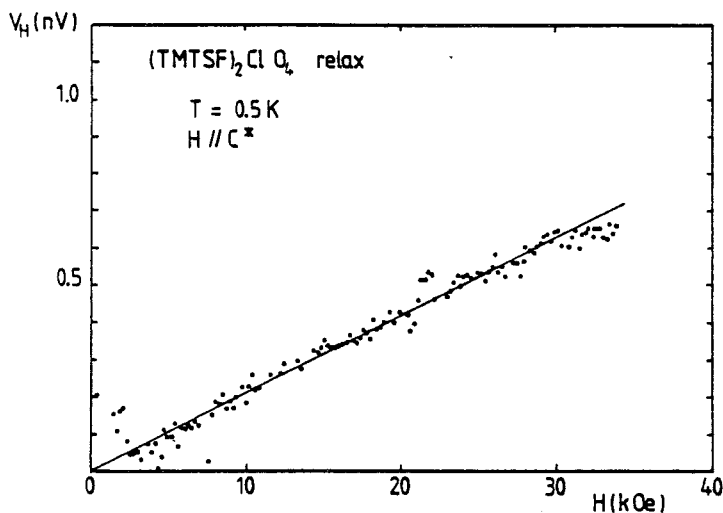


Figure 10

La tension de Hall en champ faible dans $(TMTSF)_2ClO_4$

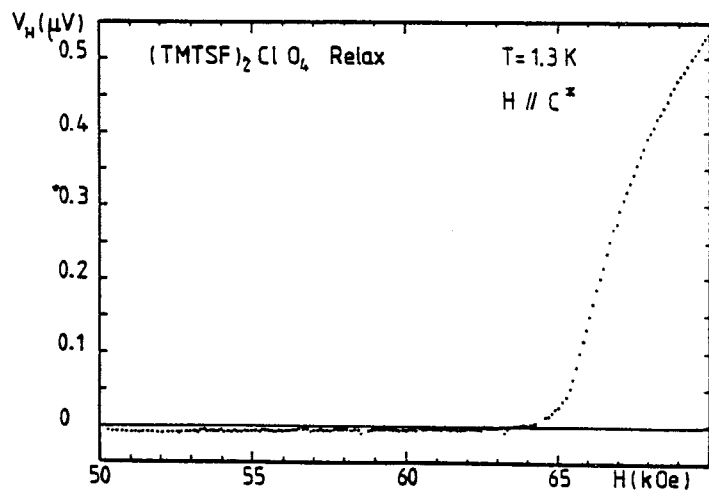


Figure 11

Evolution de la tension de Hall au voisinage du champ seuil

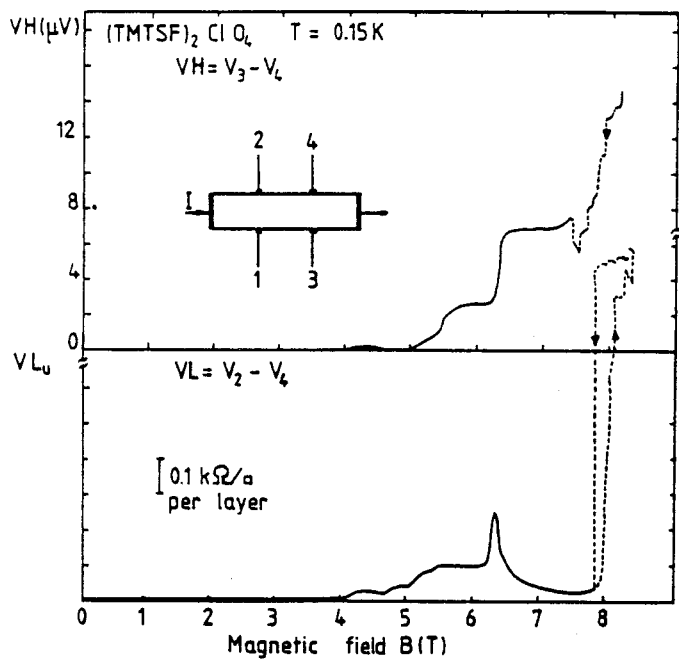
elles sont mesurées [30, 31, 36, 37] (figure 6).

C'est dans le sel $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ refroidi lentement que le plus grand nombre d'expériences sous champ ont été réalisées, révélant de nouvelles surprises...

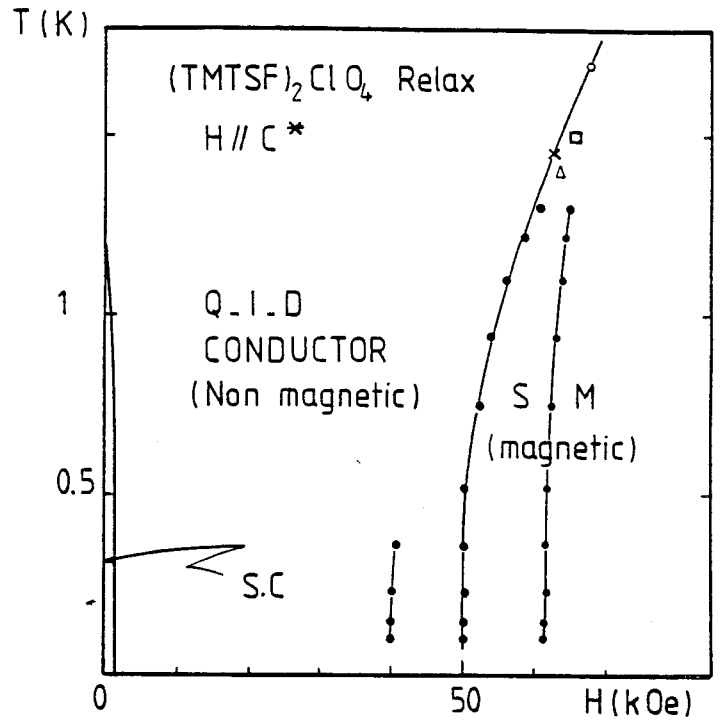
Les oscillations SdH observées au-dessus du champ seuil semblent avoir un caractère inhabituel : leur amplitude augmente rapidement juste au-dessus de H_T , et surtout leur fréquence dépend de la température [38, 39]. Kajimura et coll. analysent en détail la position des champs d'oscillation en fonction de la température et obtiennent déjà pratiquement toutes les caractéristiques d'un diagramme qui se révélera plus tard être un diagramme de phases [40, 41] (figure 9). Par ailleurs, on peut déjà remarquer une forte hysteresis autour du dernier champ (≈ 9 T).

L'existence d'une série de transitions est fortement suggérée par les expériences d'effet Hall effectuées par Ribault et coll. [42, 43] et Chaikin et coll. [44, 45]. Les premiers utilisent un échantillon refroidi lentement, de 30 K à 4,2 K en 3 heures. Le champ magnétique est aligné le long de la direction c^* , perpendiculaire au plan (a, b). Le courant est appliqué le long de a et la tension de Hall est mesurée le long de b^* , perpendiculaire au plan (a, c). A faible champ, en dessous de 3T, la tension varie linéairement avec le champ, de façon habituelle (figure 10). Puis, pour un champ qui dépend de la température, elle change de signe avant d'augmenter brusquement (figure 11). Ce champ est de l'ordre de 6,5 T à 1,3 K et de 4 T à 0,1 K. Il a été identifié avec le champ seuil H_T d'apparition de la phase ODS. Cette brusque augmentation de la tension se comprend aisément par la diminution du nombre de porteurs à la transition métal-ODS. Mais à basse température ($\approx 0,1$ K) et à plus fort champ, la tension de Hall présente des caractères inhabituels : après une bosse à 4,5 T, elle présente deux plateaux à 5,1 T et 6,2 T (figure 12). Ceci rappelle la structure en paliers due à la quantification de la résistance de Hall dans les structures bidimensionnelles réalisées dans les MOSFET ou dans les couches d'inversion de composés III. V [9]. D'ailleurs, la densité de porteurs par plan dans cette phase est estimée à $7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, ordre de grandeur nécessaire pour l'observation de l'effet Hall quantifié. Mais deux différences importantes avec les caractéristiques de l'effet Hall quantifié sont à signaler :

- la magnéto-résistance ρ_{xx} présente des minima, mais ne semble pas s'annuler dans les régions associées aux plateaux [43] ;
- la hauteur des plateaux varie avec la température. Elle semble se saturer à basse température [42, 44].



a



b

Figure 12 : a) Tension de Hall (V_H) et magnétorésistance (V_L) mesurées dans $(TMTSF)_2ClO_4$ en fonction du champ magnétique. Au-delà de 8T, le comportement semble être très différent avec, en particulier, une hystérésis importante (Ribault et coll. [43]).

b) Diagramme de phases proposé par Ribault et coll [42], lorsqu'un champ magnétique est appliqué le long de c^* du $(TMTSF)_2ClO_4$ lentement refroidi (Relax). Les points noirs correspondent aux variations rapides de l'effet Hall. Une transition a aussi été détectée en chaleur spécifique (x [25]) et en RMN (Δ [27]). (S. C. = supraconducteur, S. M. = semimétallique).

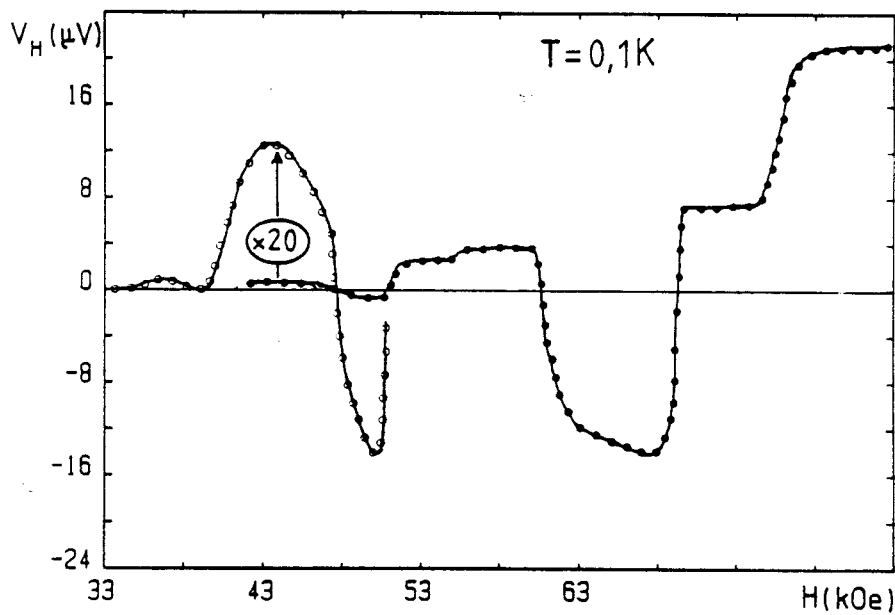


Figure 13 : Tension de Hall en fonction du champ magnétique, dans un échantillon $(TMTSF)_2ClO_4$ très lentement refroidi, de 30 à 4,2 K en 70 heures (Ribault [46]).

Ribault et coll. suggèrent que les marches séparant les plateaux soient la signature d'une succession de transitions de phase de type excitonique ou d'un effet Hall quantifié [42].

Les expériences réalisées par Chaikin et coll. [44, 45] l'ont été sur un échantillon moins bien recuit (de 40 K à 4 K en 1 heure) ce qui peut expliquer que les effets observés soient moins bien caractérisés. Mais elles ont pu être réalisées à plus haut champ. A partir de 10 T environ, la magnéto-résistance présente des oscillations rapides, déjà observées par Bando et coll. [24], dont les maxima varient linéairement en fonction de $1/H$ avec un champ fondamental de l'ordre de 275 T, ce qui suggère la présence d'orbites fermées de surface égale à 3 à 4 % de la zone de Brillouin. Ce champ est 10 fois plus grand que le champ fondamental (~ 23 T) qui caractérise les oscillations observées à plus bas champ. Il semble donc se confirmer que nous aurons à analyser et comprendre deux régimes de champ bien distincts séparés par une transition sans doute du premier ordre vers 8 - 10 Teslas.

Une nouvelle anomalie fut découverte par Ribault dans un échantillon refroidi très lentement : 70 heures pour descendre de 40 K à 4 K. Dans ce cas, la tension de Hall présente une succession de plateaux positifs et négatifs (figure 13) [46].

De l'ensemble de ces résultats semblent se dégager les conclusions suivantes. Dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ et aussi probablement dans $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ sous pression, il existe une phase induite par le champ et dont la structure est inhabituelle. Alors que la surface de Fermi dans la phase métallique est ouverte, les oscillations de la magnéto-résistance indiquent l'existence d'orbites fermées. Il est probable que cette phase induite par le champ ait une structure plus riche constituée d'une série de transitions de phase. Ces résultats ont motivé notre travail sur les effets de champ dans les conducteurs quasi-1D et en particulier l'étude des effets orbitaux. Depuis, de nouvelles expériences ont été faites, qui confirment l'existence d'une cascade de transitions. Nous discuterons l'ensemble de ces résultats expérimentaux à la lumière de nos résultats théoriques (V).

C H A P I T R E I I I

LE GAZ D'ELECTRONS UNIDIMENSIONNEL SOUS CHAMP MAGNETIQUE

III - A. INTRODUCTION

Les fonctions de réponse supraconductrice (singulet ou triplet) du gaz d'électrons sans interaction divergent logarithmiquement à basse température. C'est aussi le cas, à une dimension, des fonctions de réponse Onde de Densité. Ces instabilités entrent donc en compétition et ce sont les interactions qui favorisent telle ou telle instabilité. Pour décrire le gaz d'électrons en interaction à une dimension, on utilise un modèle simplifié dans lequel les interactions sont décrites par des processus de diffusion entre électrons au voisinage de la surface de Fermi. Chaque processus est caractérisé par une constante g_j censée décrire les interactions microscopiques. Ce modèle, dit de g -ologie, contient les caractéristiques essentielles du gaz d'électrons 1D. Il décrit d'une part la compétition entre les instabilités et d'autre part les fluctuations 1D. Résoudre le problème de g -ologie, c'est connaître le comportement des fonctions de réponse en fonction des constantes de couplage. Pour cela on utilise essentiellement deux méthodes :

- Le groupe de renormalisation qui consiste à suivre l'évolution des solutions du problème en fonction de l'échelle d'énergie qui caractérise les processus physiques (ici cette énergie est la largeur de bande).

- La technique de bosonisation qui décrit le gaz d'électrons par ses fluctuations de densité de charge ou de spin. La quantification de ces fluctuations introduit des opérateurs bosons. Cette méthode est décrite en détail dans la littérature [47-51]. Elle est difficile, laisse dans l'ombre certains problèmes délicats, et les présentations les plus rigoureuses qui en sont faites sont ardues. Notre but n'étant pas le développement en soi de cette technique mais uniquement son utilisation pour décrire les effets de champ, nous essaierons d'en présenter simplement et physiquement la démarche, quitte à manquer de rigueur.

Cette méthode présente de nombreux avantages. Elle permet de relier le problème de g -ologie à de nombreux autres problèmes de mécanique statistique dans des systèmes de basse dimensionnalité. Elle nous permettra aussi de démontrer l'analogie entre l'effet du champ magnétique et celui de l'incommensurabilité.

De façon plus générale, nous n'entrerons pas dans les détails du modèle de g-ologie, largement étudié dans la littérature, mais nous tenterons plutôt de souligner la signification physique des méthodes utilisées et des résultats obtenus. Néanmoins l'exposé, même rapide, des différentes techniques et des problèmes posés nécessite une présentation assez longue. C'est l'objet des chapitres III.- A à III - C. Dans le chapitre III-D (voir aussi § III - C. 1.d. nous démontrons l'analogie entre l'effet du champ magnétique et celui du potentiel chimique. Puis nous utilisons cette équivalence ainsi que l'emploi combiné des techniques de bosonisation et de renormalisation pour connaître le comportement des fonctions de réponse sous champ et en fonction du remplissage de bande (III - E.). Nous en déduisons l'évolution du "diagramme de phases" en fonction de ces deux "champs" (III - F , G). Le terme "diagramme de phases" est abusif à une dimension puisqu'il n'y a pas d'ordre à longue distance. Ce diagramme décrit plutôt les domaines de couplages où dominent les fluctuations de tel ou tel type d'ordre. Enfin, nous discutons la conséquence du couplage cinétique entre chaînes 1D, pour évaluer l'effet du champ sur le gaz d'électrons quasi-1D (III - H).

III - B. LE MODELE

III - B. 1. L'hamiltonien de g-ologie

Les processus de diffusion que décrit le modèle de g-ologie concernant des états proches du niveau de Fermi, les seuls états pertinents pour l'étude des phénomènes à basse énergie. Ces processus sont essentiellement de trois types (figure 14).

- Dans le premier, chaque électron reste du même côté de la surface de Fermi. Après diffusion, chacun a donc gardé le même sens. C'est le processus de diffusion "vers l'avant" caractérisé par le paramètre g_2 .

- Dans le second processus, il y a permutation des deux électrons de part et d'autre de la surface de Fermi. Chacun a donc changé de sens. Cette diffusion "vers l'arrière" est caractérisée par le paramètre g_1 . Chaque électron subit un transfert d'impulsion de l'ordre de $2k_F$, mais le transfert total d'impulsion est proche de 0.

- On peut aussi imaginer que deux électrons soient transférés d'un côté vers l'autre de la surface de Fermi, ce qui nécessite une impulsion totale de l'ordre de $4k_F$. Ce processus, d'amplitude g_3 , n'est donc possible que si cette impulsion est cédée par le réseau atomique. C'est un processus Umklapp, important si $4k_F$ est un vecteur G du réseau réciproque, c'est-à-dire pour une bande à demi remplie.

L'hamiltonien de g-ologie s'écrit $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_Z$. Dans le terme cinétique \mathcal{H}_0 , la variation de l'énergie en fonction du vecteur d'onde a été linéarisée :

$$\mathcal{H}_0 = v_F \sum_{k,s} k (a_{ks}^+ a_{ks} - b_{ks}^+ b_{ks}) \quad (III.1)$$

Les opérateurs a_{ks}^+ et b_{ks}^+ créent des électrons de spin s , respectivement à droite (impulsion positive) et à gauche de la surface de Fermi. v_F est la vitesse de Fermi des électrons sans interaction. Lorsqu'on s'intéresse, comme c'est le cas ici, aux phénomènes à basse énergie, il est probable que la linéarisation de la relation de dispersion - c'est-à-dire l'hypothèse d'une densité d'état constante - ne modifie que très peu le comportement du gaz de Fermi.

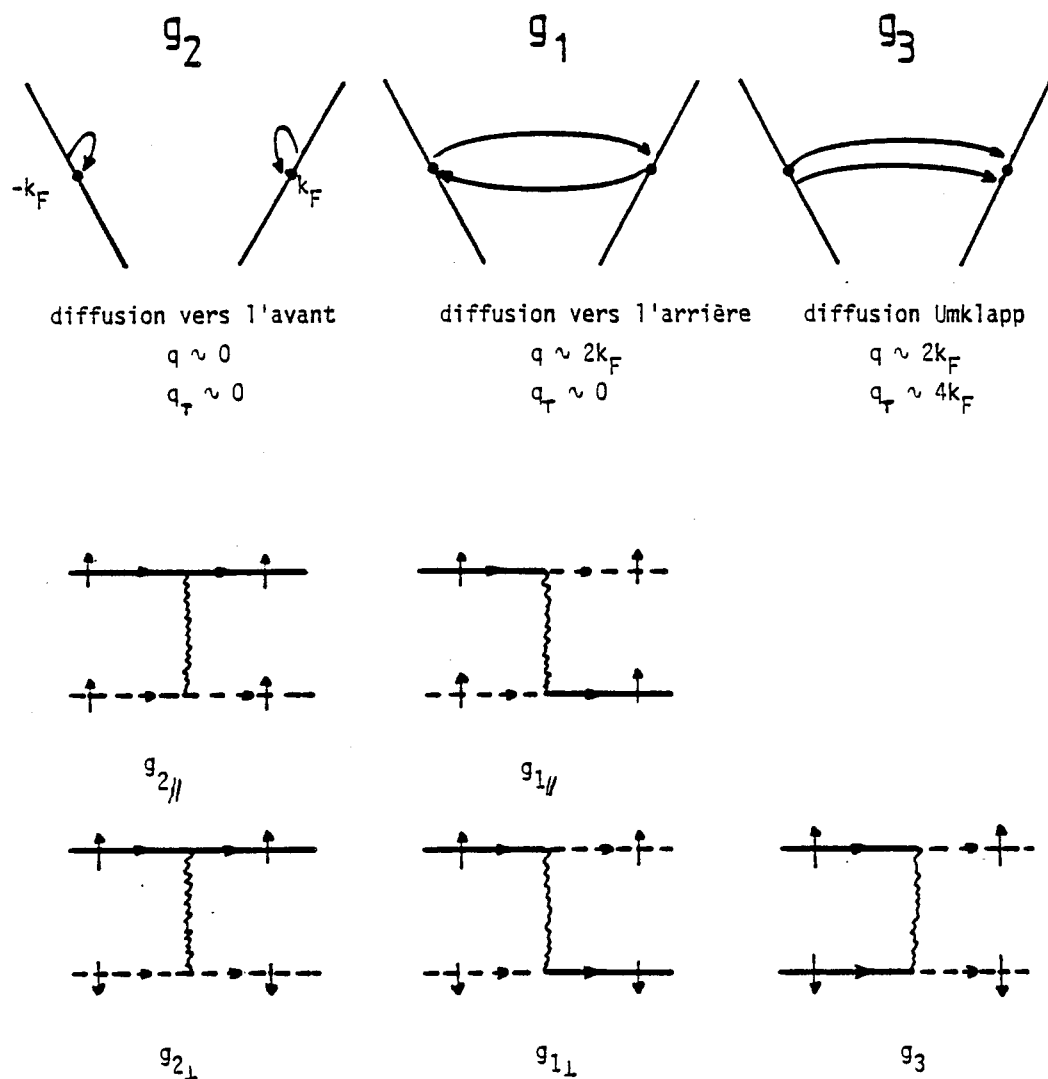


Figure 14

Processus de diffusion entre électrons à la surface de Fermi.
 (q = transfert d'impulsion pour un électron, q_T = transfert total)

Les termes d'interaction s'écrivent :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} = & g_2 \int \psi_{2s}^+ \psi_{2s} \psi_{1s'}^+ \psi_{1s'} dx \\ & + (g_{1//} \delta_{ss'} + g_{1\perp} \delta_{s,-s'}) \int \psi_{1s}^+ \psi_{2s} \psi_{2s'}^+ \psi_{1s'} dx \quad (\text{III.2}) \\ & + g_3 \int (\psi_{1s}^+ \psi_{2s} \psi_{1-s}^+ \psi_{2-s} e^{-iGx} + \text{h.c.}) dx \end{aligned}$$

où $\psi_{1s}(x) = L^{-1/2} \sum_k e^{ikx} a_{ks}$ et $\psi_{2s}(x) = L^{-1/2} \sum_k e^{ikx} b_{ks}$. Les sommes sur s et s' sont implicites. Les constantes de couplage g_1, g_2, g_3 sont les transformées de Fourier du potentiel d'interaction, respectivement autour des vecteurs d'onde $2k_F, 0$ et $2k_F$. En toute rigueur, ce sont des fonctions du transfert d'impulsion. Comme dans de nombreuses études du problème de g -ologie, nous les supposons constantes, ce qui revient à faire l'hypothèse d'une interaction delta dans l'espace réel. Mais une coupure sur le transfert d'impulsion simule une portée finie des interactions (voir discussion en ref. 50).

\mathcal{H}_z est le couplage de Zeeman :

$$\mathcal{H}_z = \mu_B H \sum_{k,s} s (a_{ks}^+ a_{ks} + b_{ks}^+ b_{ks}) \quad s = \pm 1 \quad (\text{III.3})$$

Il est facile de voir que l'effet du champ magnétique, en séparant la bande en deux sous-bandes de spins opposés, est de perturber l'un des processus que nous avons décrits. C'est le processus $g_{1\perp}$ qui affecte deux électrons de spins opposés. En effet, si ces deux électrons sont sur leur surface de Fermi avant l'interaction, ils ne le sont plus après (figure 15). En bloquant ce processus, le champ modifie donc le comportement du gaz de Fermi. Il est donc essentiel de distinguer entre les processus $g_{1//}$ entre électrons de même spin et $g_{1\perp}$ entre électrons de spins opposés. Sauf exception, nous ne ferons pas cette distinction pour les processus g_2 car ils ne sont pas affectés par le champ. Enfin, à cause du principe d'exclusion, le terme Umklapp ne peut coupler que des électrons de spins opposés.

Une revue détaillée des propriétés de cet hamiltonien, en champ nul et lorsque $G = 4k_F$ ou bien lorsque $g_3 = 0$, a été écrite par Solyom [49].

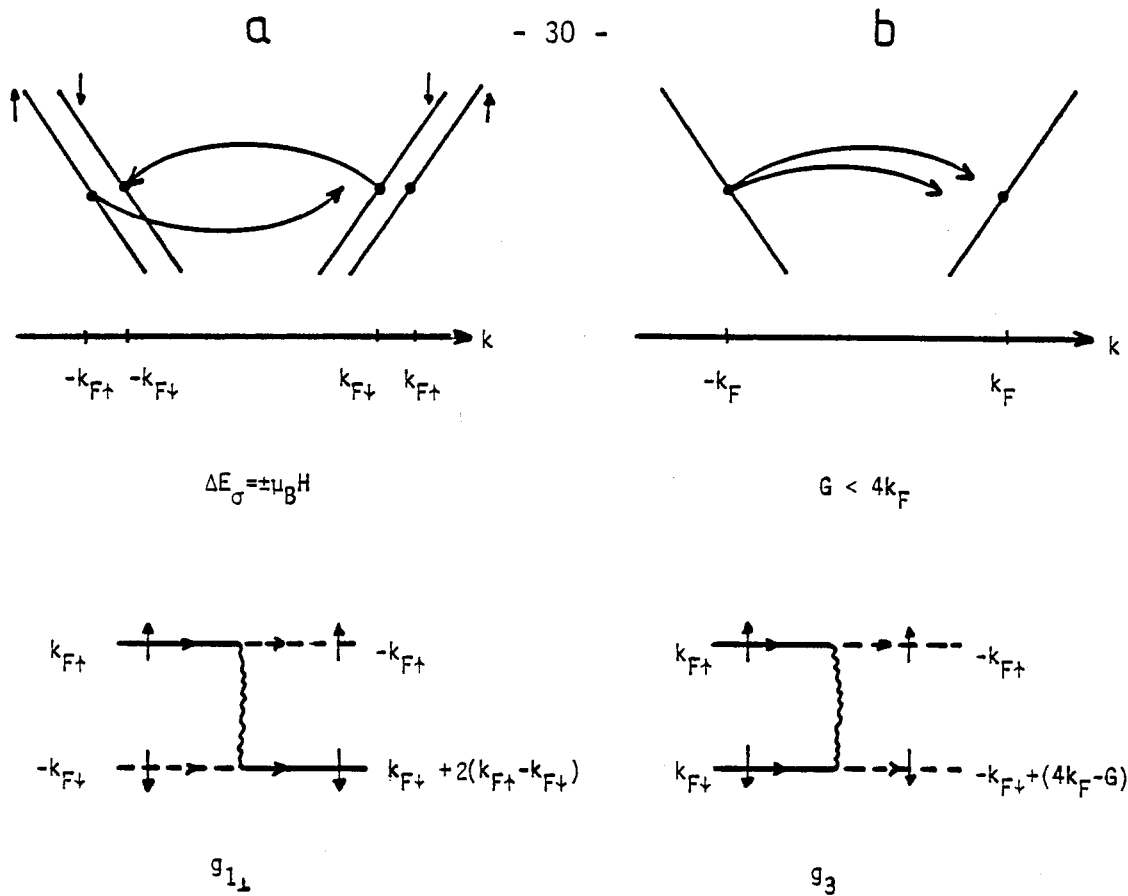


Figure 15 : Lorsqu'un champ magnétique est appliqué sur le gaz d'électrons 1D, le processus $g_{1\perp}$ n'est plus divergent car les deux électrons ne peuvent pas être sur la surface de Fermi avant et après le processus (15 a). De même, si G , vecteur du réseau réciproque, est différent de $4k_F$, l'impulsion cédée par le réseau ne permet pas de transférer deux électrons de part et d'autre de la surface de Fermi (15 b : $G < 4k_F$).

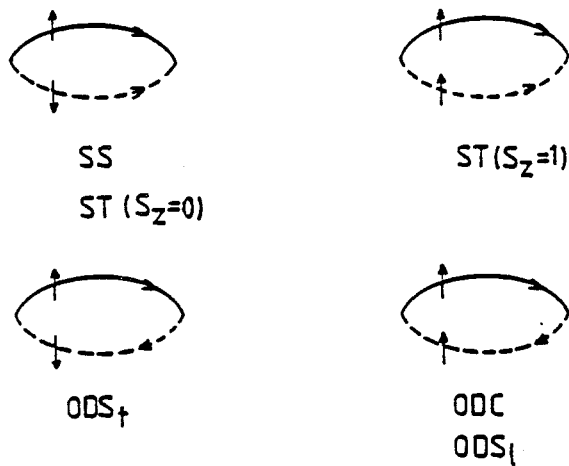


Figure 16 : Représentation diagrammatique des fonctions de réponse.

Nous nous proposons de généraliser ce travail. Avant de rappeler les méthodes utilisées, revenons sur la signification physique des différents processus d'interaction. Remarquons d'abord que $g_{1//}$ et $g_{2//}$ sont identiques, à une permutation près des électrons (figure 14). C'est donc la différence $g_{1//} - g_{2//}$ qui interviendra dans les calculs. Le processus $g_{1\perp}$ permute deux électrons de spins opposés de part et d'autre de la surface de Fermi. Il transfère donc du spin. Le processus g_3 transfère ensemble deux électrons de spins opposés. Il transfère donc de la charge. Ces processus sont ainsi très analogues, le premier agissant sur les degrés de liberté de spin, le second sur ceux de charge. Ceci a été démontré par Emery, Luther et Peschel [52]. Mais ces auteurs n'ont établi cette équivalence que dans le cas d'une bande 1/2 remplie. Si $4k_F$ n'est plus un vecteur du réseau réciproque, le problème de charge avec g_3 n'est plus analogue au problème de spin avec $g_{1\perp}$. Nous avons montré que ces deux problèmes restent équivalents lorsqu'un champ magnétique est appliqué, car ce dernier joue exactement le même rôle sur les processus $g_{1\perp}$ que l'écart à la commensurabilité sur les processus Umklapp [53].

L'écart à la commensurabilité a été étudié par Prigodin et Seidel par le groupe de renormalisation [54, 55]. Nous avons décrit les effets de champ magnétique par une procédure analogue [56]. Dans le cas d'une interaction attractive $g_{1//} < 0$, Japaridze et Nersesyan ont étudié l'effet du champ en utilisant la méthode de bosonisation [57]. Mais dans ces travaux, les effets de champ ou de potentiel chimique n'ont jamais été étudiés ensemble. Nous avons utilisé l'équivalence entre ces deux problèmes pour en déduire une synthèse de résultats déjà obtenus dans la littérature. Nous pouvons ainsi décrire complètement l'évolution du gaz unidimensionnel en fonction de l'application combinée de ces deux "champs".

III - B. 2. Instabilités du gaz de Fermi. Fonctions de réponse.

La variation spatiotemporelle des fonctions de réponse s'écrit :

$$R(x, t) = -i \theta(t) \langle [\mathcal{O}^+(x, t), \mathcal{O}(0, 0)] \rangle \quad (\text{III.4})$$

θ est la fonction de Heaviside ; $\langle \dots \rangle$ désigne la moyenne thermique ; à température nulle, c'est la moyenne dans l'état fondamental. L'opérateur \mathcal{O} caractérise chaque instabilité du gaz d'électrons (figure 16). Les fonctions de

réponse Onde de Densité de Charge (ODC) ou de Spin (ODS) sont des fonctions de corrélation électron-trou. Ainsi :

$$\sigma_{\text{ODC}}(x, t) = \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{2\uparrow} + \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{2\downarrow} \quad . \quad (\text{III.5})$$

On doit distinguer les composantes longitudinales et transverses de l'Onde de Densité de Spin :

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ODS-}\ell}(x, t) &= \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{2\uparrow} - \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{2\downarrow} \\ \sigma_{\text{ODS-t}}(x, t) &= \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{2\downarrow} + \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{2\uparrow} \quad . \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

Les fonctions de réponses supraconductrices sont des fonctions de corrélation électron-électron. Pour la supraconductivité singulet [55] :

$$\sigma_{\text{SS}}(x, t) = \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{2\downarrow}^+ + \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{2\uparrow}^+ \quad . \quad (\text{III.7})$$

La fonction de réponse triplet dépend de la composante S_z du spin total :

$$\begin{aligned} S_z = 0 \quad \sigma_{\text{ST}}(x, t) &= \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{2\downarrow}^+ - \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{2\uparrow}^+ \\ S_z = 1 \quad \sigma_{\text{ST}}(x, t) &= \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{2\uparrow}^+ \text{ ou } \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{2\downarrow}^+ \quad . \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

Dans ces expressions, ψ_{iS} désigne la valeur de l'opérateur champ au point (x, t) . En l'absence d'interaction, les fonctions de réponse sont aisément calculables. Les fonctions Onde de Densité divergent à $q = 2k_F$ alors que les fonctions supra divergent à $q = 0$.

$$\chi_{\text{densité}}(2k_F, T) = \chi_{\text{supra}}(0, T) = \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{T}{E_0} \quad (\text{III.9})$$

où E_0 est une énergie de coupure, typiquement la largeur de bande. Nous garderons dans la suite $\hbar = k_B = 1$. On s'intéresse à la dépendance en fréquence ou en vecteur d'onde. Les fonctions de réponse ont la forme approximative :

$$\chi(q, \omega, T) \approx \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\max(v_F(q - q_i), \omega, T)}{E_0} \quad (\text{III.10})$$

avec $q_i = 0$ ou $2k_F$. Dans la suite, nous analyserons les processus à $T = 0$ et $q = q_i$.

III - C. LES METHODES

III - C. 1. Les méthodes perturbatives

III - C. 1. a. Le développement en perturbation

En présence d'interactions, les fonctions de réponse peuvent être calculées en perturbation. On trouve ainsi à l'ordre le plus bas, lorsque $G = 4 k_F$ et en champ nul :

$$\begin{aligned}
 \text{ODC} \quad N(\omega) &= \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_{1//} + \bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_2 + \bar{g}_3}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \right) \\
 \text{ODS} \quad \chi_{\ell}(\omega) &= \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_2 - \bar{g}_3}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \right) \\
 \chi_t(\omega) &= \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 - \frac{\bar{g}_2 - \bar{g}_3}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \right) \\
 \text{SS} \quad \Delta_{SS}(\omega) &= - \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_2 + \bar{g}_{1\perp}}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \right) \\
 \text{ST} \quad S_z = 0 \quad \Delta t_0(\omega) &= - \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_2 - \bar{g}_{1\perp}}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \right) \\
 S_z = 1 \quad \Delta t_1(\omega) &= - \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_2 - \bar{g}_{1//}}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \right)
 \end{aligned} \tag{III.11}$$

Nous avons posé $\bar{g}_i = g_i / \pi v_F$. De même, le développement en perturbation conduit à corriger les couplages nus par les interactions elles-mêmes et à les remplacer par des couplages effectifs appelés vertex et notés Γ :

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{//} &= \Gamma_{1//} - \Gamma_{2//} = \bar{g}_{1//} - \bar{g}_2 + \frac{\bar{g}_{1\perp}^2 + \bar{g}_3^2}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \\
 \Gamma_{1\perp} &= \bar{g}_{1\perp} + \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \\
 \Gamma_2 &= \bar{g}_2 + \frac{\bar{g}_{1\perp}^2 - \bar{g}_3^2}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \\
 \Gamma_3 &= \bar{g}_3 + \bar{g}_3(\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2) \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots
 \end{aligned} \tag{III.12}$$

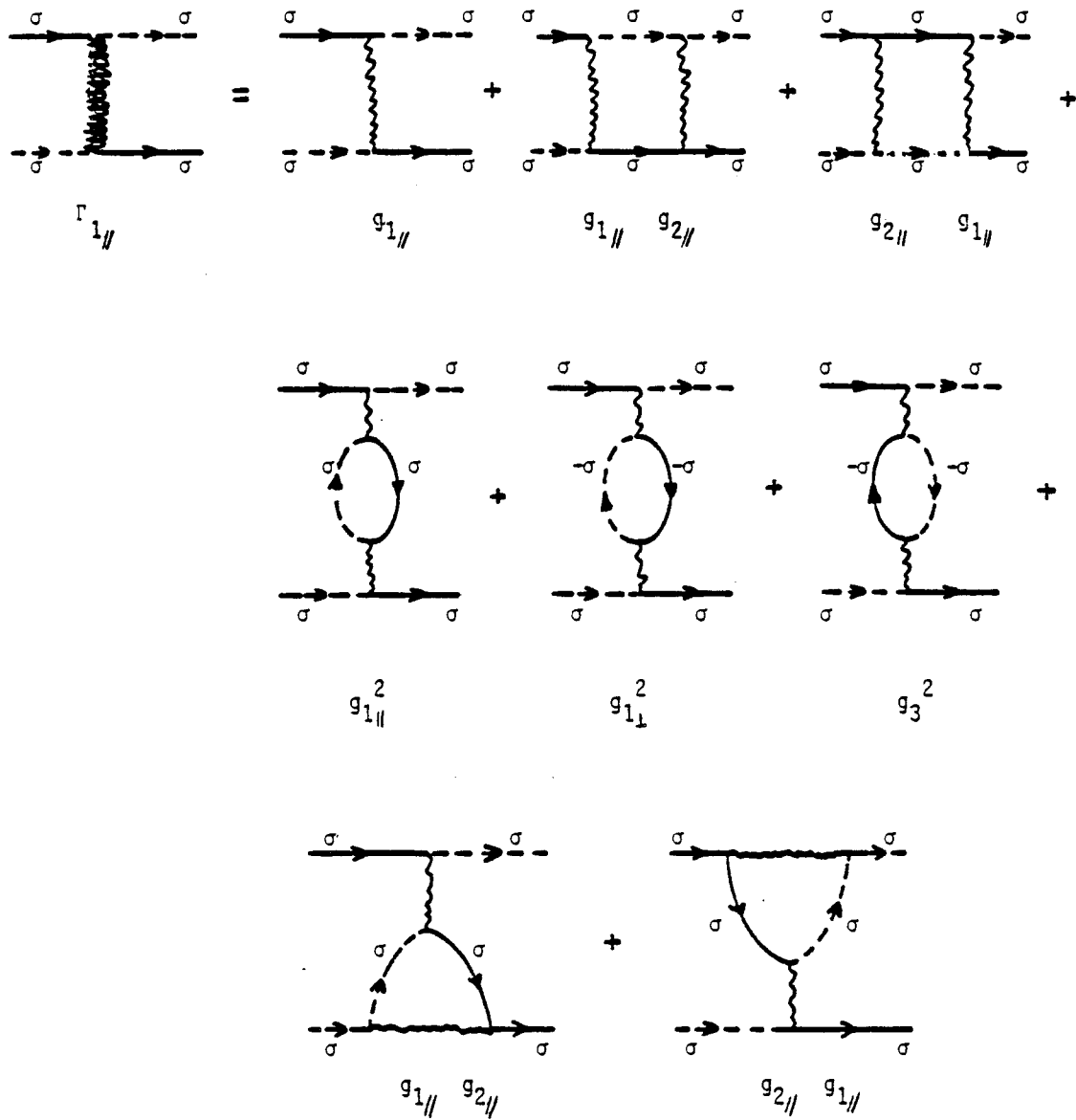


Figure 17

Développement en perturbation du vertex $\Gamma_{1//}$ qui permute deux électrons de spins parallèles de part et d'autre de la surface de Fermi

La figure 17 rappelle, à titre d'exemple, le développement diagrammatique correspondant à la première ligne.

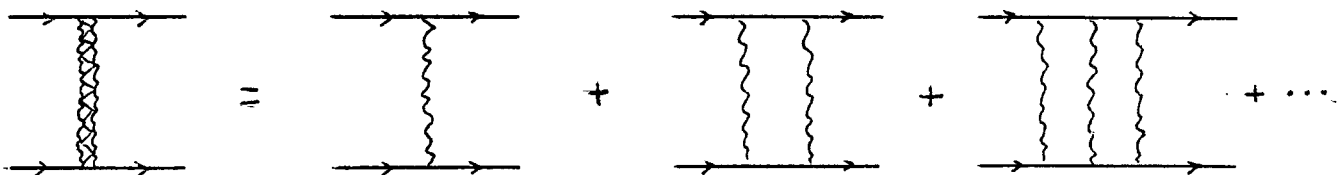
Ces fonctions de réponse contiennent des termes logarithmiques à tous les ordres de perturbation. Cette divergence infrarouge ($\omega \rightarrow 0$) est caractéristique des modèles de basse dimensionnalité qui présentent une symétrie continue : modèle XY bidimensionnel classique (invariance par rotation), cristal 2D (invariance par translation), superfluidité 2D (invariance de jauge), systèmes quantiques 1D comme le problème de Sine-Gordon, Effet Kondo. Pour résoudre ces problèmes perturbatifs, deux méthodes peuvent être envisagées : soit une sommation partielle de diagrammes, soit la méthode du groupe de renormalisation.

Il est fondamental de souligner que les différents termes perturbatifs font intervenir deux types de contributions. Certains décrivent la création d'une paire d'électrons dans l'état intermédiaire (les deux premiers de la figure 17) et les autres, la création d'une paire électron-trou. Aux ordres supérieurs, les diagrammes contiennent un mélange des contributions électron-électron et électron-trou. Cette interférence des canaux "Cooper" et "zéro-son" est caractéristique du gaz unidimensionnel. Elle est à l'origine de l'absence d'ordre à longue distance. A trois dimensions, la divergence électron-trou est affectée par le couplage entre chaînes, ce qui n'est pas le cas de la divergence électron-électron. Les canaux "zéro-son" et Cooper se trouvent donc découplés par le couplage tridimensionnel (voir chapitre III - H) [58-60].

III - C. 1. b. Sommations partielles de diagrammes

. Sommation RPA (Random Phase Approximation)

On élimine tous les diagrammes contenant des mélanges de canaux. On resomme séparément les diagrammes de chacun des deux canaux. Par exemple, la resommation du canal Cooper sélectionne les diagrammes en échelle :



La sommation est immédiate et donne un résultat du type RPA :

$$\Gamma = g + g^2 \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots + g^n \ln^{n-1} \frac{\omega}{E_0} + \dots = \frac{g}{1 - g \ln \frac{\omega}{E_0}} \quad (\text{III.13})$$

lorsque g est négatif, ce vertex est singulier à une fréquence (ou température) finie donnée par la relation de champ moyen $T_c = E_0 \exp - 1/|g|$. Cette instabilité est le signe d'une transition de phase à température finie, ce qui contredit le théorème selon lequel il n'y a pas de transition à une dimension lorsque les forces sont à courte portée. Cette sommation n'est licite que dans le domaine tridimensionnel, pour des températures supérieures à celles de cross-over T_x au-dessous de laquelle les canaux sont découplés [58-60] (voir paragraphe III - H).

. Sommation parquet
.....

On peut alors considérer une classe plus étendue de diagrammes, appelés parquets caractérisés par la topologie suivante : en coupant deux lignes internes on retrouve deux diagrammes rencontrés à un ordre plus bas. Ces diagrammes sont donc factorisables et de la forme $G^n \ln^{n-1} \frac{\omega}{E_0}$ [61-63]. La sommation est différente de la sommation RPA car elle couple les canaux Cooper et zéro-son. Elle se heurte néanmoins au même problème, la présence d'une instabilité à température finie.

Dans le vertex suivant ($g_3 = 0$)

$$\Gamma_{1//} = \bar{g}_{1//} + \bar{g}_{1\perp}^2 \ln \frac{\omega}{E_0} + \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp}^2 \ln^2 \frac{\omega}{E_0} + \frac{\bar{g}_{1//}}{4} (\bar{g}_{1\perp}^2 - \bar{g}_{1//}^2 + 2\bar{g}_{1//} \bar{g}_2 - 2\bar{g}_2^2) \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \quad (\text{III.14})$$

les deux premières corrections sont des contributions parquet et la troisième est négligée dans cette approximation. Or cette troisième contribution est nécessaire pour une description correcte des caractéristiques du gaz 1D en particulier l'absence de température d'ordre finie.

III - C. 1. c. Le groupe de renormalisation

. α -renormalisation des couplages
.....

Le développement en perturbation diverge si ω/E_0 tend vers 0, c'est-à-dire, à une fréquence donnée, pour une grande largeur de bande. L'idée de cette

méthode est de réduire la largeur de bande, c'est-à-dire le nombre de degrés de liberté pour décrire ainsi d'autres problèmes où les termes perturbatifs sont de moins en moins divergents. Il faut corriger cette réduction du nombre de degrés de liberté par la modification des couplages g_i de telle façon que les couplages effectifs Γ_i restent inchangés :

$$\frac{d\Gamma_i}{dE_0} = 0 \quad (\text{III.15})$$

On a ainsi construit un ensemble de problèmes de plus en plus simples mais qui ont les mêmes propriétés physiques. Si un de ces problèmes peut être résolu exactement, on en déduit alors une solution pour le problème original [49, 64].

Des développements en perturbation présentés plus haut (eqs. III.12), peuvent être dérivées quatre équations différentielles qui décrivent l'évolution des couplages en fonction de l'énergie de coupure. Mais cette renormalisation au premier ordre de perturbation appelée renormalisation du pauvre [65] est équivalente à la méthode des parquets. Elle contient l'instabilité à température finie. Pour effectuer une renormalisation à un ordre supérieur en perturbation, quelques précautions doivent être prises. La propagation d'un seul électron est elle-même modifiée par les processus de diffusion : $G = dG_0$ où G et G_0 sont les fonctions de Green de l'électron en interaction et de l'électron libre. Ces corrections de self-énergie sont aussi logarithmiquement divergentes. Ainsi, lorsque $g_3 = 0$,

$$d(\omega) = 1 + \frac{1}{8}(\bar{g}_{1\parallel}^2 + \bar{g}_{1\perp}^2 - 2\bar{g}_{1\parallel}\bar{g}_2 + 2\bar{g}_2^2) \ln \frac{\omega}{E_0} + \dots \quad (\text{III.16})$$

Pour les processus de diffusion à 2 électrons étudiés ici, c'est la quantité Γd^2 qui doit rester invariante [66]. C'est cette invariance qui détermine l'évolution des couplages en fonction de la coupure E . Voyons comment. Notons E_0 la largeur de bande initiale, E et E' étant des coupures variables. Les couplages sont maintenant des fonctions de la coupure $g(E/E_0)$. Le produit $\Pi = \Gamma d^2$ est indépendant de la coupure E :

$$\Pi \left(\frac{\omega}{E}, g\left(\frac{E}{E_0}\right) \right) = \Pi \left(\frac{\omega}{E'}, g\left(\frac{E'}{E_0}\right) \right) \quad (\text{III.17})$$

Dans cette égalité, laissons ω prendre la valeur E' , puis E' prendre la valeur E . Nous faisons apparaître $\Pi(1, g(x))$ qui n'est autre que $g(x)$ puisque tous les logarithmes disparaissent. Ainsi :

$$\Pi\left(\frac{E'}{E}, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) = \Pi\left(1, g\left(\frac{E'}{E_0}\right)\right) = g\left(\frac{E'}{E_0}\right) \quad (\text{III.18})$$

et lorsque $E' = E$

$$\Pi\left(1, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) = \Pi\left(1, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) = g\left(\frac{E}{E_0}\right) \quad (\text{III.19})$$

Par soustraction de ces lignes, on déduit aussitôt l'équation différentielle dite de Lie :

$$x \frac{dg(x)}{dx} = \frac{\partial \Pi(y, g(x))}{\partial y} \Big|_{y=1} \quad (\text{III.20})$$

avec $x = E/E_0$. Cette équation relie l'évolution des couplages à toute énergie à celle de l'invariant Π près de E_0 . C'est tout le principe de la technique de renormalisation.

Par exemple, la quantité $\Gamma_{1//} d^2$ s'écrit (si $g_3 = 0$)

$$\Gamma_{1//} d^2 = \bar{g}_{1//} + \bar{g}_{1\perp}^2 \ln \frac{E}{E_0} + \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp}^2 \left(\ln^2 \frac{E}{E_0} + \frac{1}{2} \ln \frac{E}{E_0} \right) + \dots \quad (\text{III.21})$$

Dans l'équation de Lie, la dérivation de Π par rapport à E/E_0 garde donc le terme non parquet $\frac{1}{2} \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp}^2$. Par dérivation peuvent ainsi être déduites les équations d'évolution des couplages :

$$\frac{d\bar{g}_{1//}}{d\ell} = \bar{g}_{1\perp}^2 + \frac{1}{2} \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp}^2 + \dots$$

$$\frac{d\bar{g}_{1\perp}}{d\ell} = \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp}^2 + \frac{1}{4} \bar{g}_{1\perp} (\bar{g}_{1//}^2 + \bar{g}_{1\perp}^2) + \dots \quad (\text{III.22a})$$

$$\frac{d\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2}{d\ell} = \bar{g}_3^2 + \frac{1}{2} (\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2) \bar{g}_3^2 + \dots$$

$$\frac{d\bar{g}_3}{d\ell} = (\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2) \bar{g}_3 + \frac{1}{4} \bar{g}_3 ((\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2)^2 + \bar{g}_3^2) + \dots \quad (\text{III.22b})$$

avec $\ell = \ln E/E_0$. Nous avons regroupé les couplages de façon à faire

apparaître les deux espaces découplés de paramètres $(g_{1//}, g_{1\perp})$ et $(g_{1//} - 2g_2, g_3)$ qui décrivent respectivement les degrés de liberté de spin et de charge. Les équations d'évolution sont identiques pour ces deux jeux de paramètres, ce qui traduit l'équivalence des deux problèmes de spin et de charge. On note aussi que la renormalisation serait triviale si $g_{1\perp}$ et g_3 étaient nuls. Dans ces cas on connaît des solutions exactes que nous rappellerons plus loin.

Les trajectoires décrites par ces équations sont rappelées sur la figure 18 pour le plan $(g_{1//}, g_{1\perp})$. La première carte montre les trajectoires obtenues à l'ordre le plus bas en perturbation. Ce sont des hyperboles d'équation $g_{1//}^2 - g_{1\perp}^2 = \text{constante}$. Deux régions doivent être distinguées, séparées par les deux lignes d'équation $g_{1//} = |g_{1\perp}|$.

- Lorsque $g_{1//} > |g_{1\perp}|$, les couplages diminuent le long des trajectoires qui convergent vers la ligne $g_{1\perp} = 0$ quand E/E_0 tend vers 0 :

$$g_{1//} \left(\frac{E}{E_0} \right) = g_{1//}^{**} \frac{1 + \frac{g_{1//} - g_{1//}^{**}}{g_{1//} + g_{1//}^{**}} \left(\frac{E}{E_0} \right)^{2\bar{g}_{1\perp}^{**}}}{1 - \frac{g_{1//} - g_{1//}^{**}}{g_{1//} + g_{1//}^{**}} \left(\frac{E}{E_0} \right)^{2\bar{g}_{1//}^{**}}} \quad (\text{III.23})$$

avec $g_{1//}^{**2} = g_{1//}^2 \left(\frac{E}{E_0} \right) - g_{1\perp}^2 \left(\frac{E}{E_0} \right) = g_{1//}^2 - g_{1\perp}^2$. Dans le cas $g_{1//} = |g_{1\perp}| = g_1$,

$$g_1 \left(\frac{E}{E_0} \right) = \frac{g_1}{1 - \bar{g}_1 \ln \frac{E}{E_0}} \quad (\text{III.24})$$

Ainsi tous les problèmes pour lesquels les constantes de couplage appartiennent à cette région sont équivalents aux problèmes définis sur la ligne $g_{1\perp} = 0$ qui se trouvent avoir une solution exacte, dite de Tomonaga [67]. Par ailleurs, la théorie de perturbation même au plus bas ordre est une bonne approximation dans cette région puisque, si les couplages initiaux sont faibles, ils le restent au cours de la renormalisation.

- L'autre partie du diagramme, définie par $g_{1//} < |g_{1\perp}|$ est appelée région de couplage fort. Les trajectoires y divergent vers des valeurs infinies des couplages qui sont atteintes pour une valeur finie de E/E_0 , d'où une température finie de transition. La théorie de perturbation devient fautive.

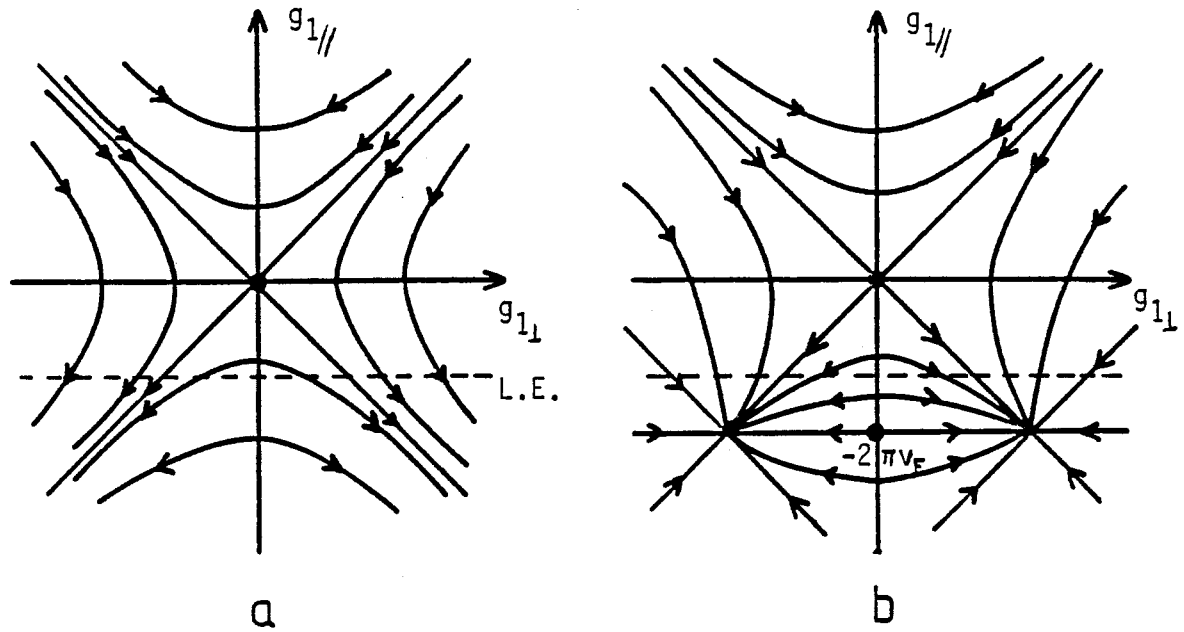


Figure 18

Trajectoires de renormalisation dans le plan $(g_{1\parallel}, g_{1\perp})$ au premier (18 a) et au second (18 b) ordre en perturbation. Dans la région de couplage faible $g_{1\parallel} \gg |g_{1\perp}|$, les trajectoires convergent vers la ligne dite de Tomonaga $g_{1\perp} = 0$ sur laquelle une solution exacte est connue. Dans la région de couplage fort, les trajectoires évoluent vers l'infini au premier ordre et vers des points fixes de coordonnées $(-2\pi v_F, -2\pi v_F)$ et $(-2\pi v_F, 2\pi v_F)$, au second ordre. Il existe dans cette région une ligne de solutions exactes, la ligne de Luther-Emery (L.E.) d'équation $g_{1\perp} = -6\pi v_F/5$.

Les équations de Lie à l'ordre suivant, telles qu'elles sont écrites dans les équations III.22, ne modifient pas cette structure en deux régions, ni la position des lignes frontières. Mais dans la région de couplage fort, les trajectoires convergent maintenant vers deux points fixes de coordonnées $(\bar{g}_{1//}, \bar{g}_{1\perp}) = (-2, 2)$ et $(-2, -2)$, qui sont atteints lorsque E/E_0 tend vers 0. (figure 18 b). Comme dans le cas $g_{1//} > |g_{1\perp}|$, il serait nécessaire de connaître, dans cette région au moins, une ligne de solutions exactes qui couperait toutes les trajectoires. Cette ligne existe. C'est la solution dite de Luther-Emery ($\bar{g}_{1//} = -6/5$) que nous rappellerons en développant la méthode de la bosonisation [68]. Enfin, la description que nous venons de rappeler est exactement la même pour les paramètres $(g_{1//} - 2g_2, g_3)$

R - renormalisation des fonctions de réponse.
.....

Nous avons vu comment évoluent les couplages avec la coupure E. Faisons de même pour les fonctions de réponse. Pour être renormalisables, elles doivent avoir la structure multiplicative [49, 69]:

$$R\left(\frac{\omega}{E_0}, g\right) = R\left(\frac{\omega}{E}, g(E/E_0)\right) \times f(E_0/E) \quad (\text{III.25})$$

ce qui n'est pas le cas des fonctions calculées plus haut. Zawadowski [64] introduit des fonctions auxiliaires \bar{R}

$$\bar{R}(\omega) = \pi v_F \frac{\partial R(\omega)}{\partial \ln \omega} \quad (\text{III.26})$$

qui ont la structure requise et vérifient donc les équations de Lie (Appendice A):

$$x \frac{\partial \ln \bar{R}(x, g)}{\partial x} = \frac{\partial \ln \bar{R}(y, g(x))}{\partial y} \Bigg|_{y=1} \quad (\text{III.27})$$

avec $x = \omega/E_0$. Ainsi la dépendance des fonctions de réponse en fonction de la fréquence ω et des couplages nus s'obtient à l'aide des couplages $g(\frac{\omega}{E_0})$ renormalisés déduits de la première équation de Lie (eq. III.20). Le comportement à basse fréquence $\omega \rightarrow 0$ est donc donné par les valeurs des couplages aux points fixes $g_i^* = g_i(x=0)$. Les fonctions de réponse varient donc algébriquement.

$$R(\omega) \propto \bar{R}(\omega) \propto \left(\frac{\omega}{E_0}\right)^\alpha \quad (\text{III.28})$$

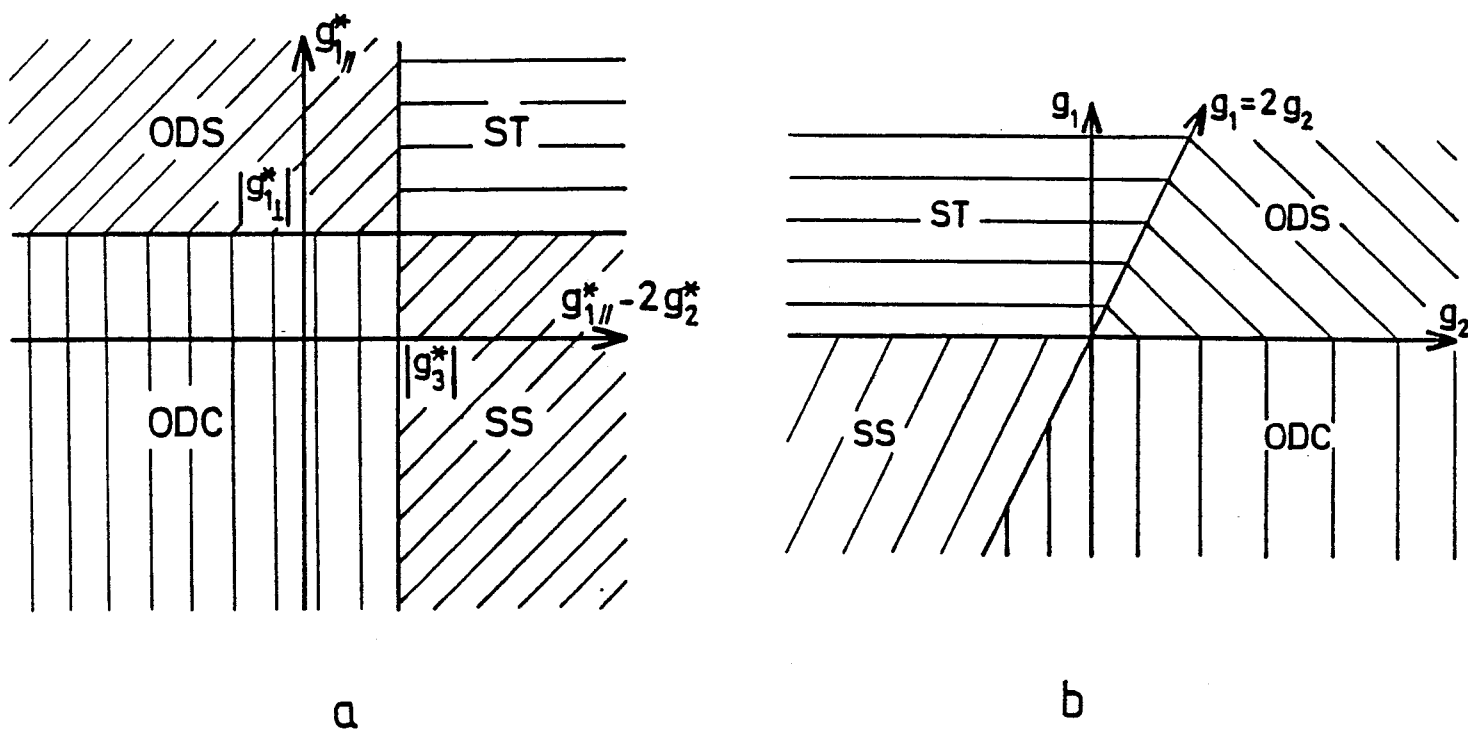


Figure 19

- a) "Diagramme de phases" en fonction des valeurs des couplages en point fixe $g_{1\parallel}^*$ et $g_{1\parallel}^* - 2g_2^*$.
- b) "Diagramme de phases (g_1, g_2) " obtenu dans le cas particulier $g_{1\perp} = g_{1\perp}$ et $g_3 = 0$, à l'aide d'une renormalisation au second ordre [49].

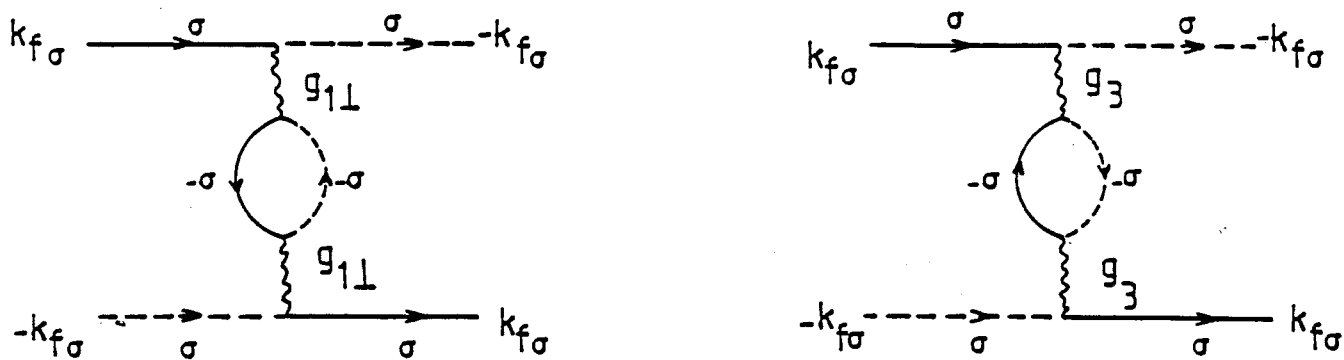


Figure 20 : Diagrammes électron-trou, corrections au vertex $\Gamma_{1\parallel}$

avec $\alpha = \left. \frac{\partial \ln R(y, g^{\ddot{}})}{\partial y} \right|_{y=1}$

Ces coefficients se déduisent ainsi immédiatement du développement en perturbation. On en déduit le "diagramme de phases" en fonction des valeurs des couplages en point fixe (figure 19a). La ligne $g_{1//}^{\ddot{}} - 2g_2^{\ddot{}} = g_3^{\ddot{}}$ sépare les fluctuations supraconductrices des fluctuations Onde de Densité. La ligne $g_{1//}^{\ddot{}} = g_{1\perp}^{\ddot{}}$ sépare les fluctuations longitudinales (ODC, ODS, SS, ST($S_z=0$)) des fluctuations transverses (ODS_t, ST($S_z=1$)). Les valeurs des points fixes étant mal connues, à part dans la région de couplage faible $g_{1//} - 2g_2 \gg |g_3|$, $g_{1//} \gg |g_{1\perp}^{\ddot{}}|$, il est difficile d'en déduire le diagramme de phases en fonction des couplages nus, sauf dans certaines limites simples comme le cas "standard" rappelé par Solyom : $g_3 = 0$, $g_{1//} = g_{1\perp} = g_1$ (figure 19b). Un développement ultérieur nécessite une meilleure compréhension de la région de couplage fort (voir paragraphe III - C.2).

III - C. 1. d. Le développement en perturbation sous champ magnétique

α - Lien avec le problème de commensurabilité

Nous avons vu qualitativement que l'effet du champ est de bloquer les processus $g_{1\perp}$ de même que celui de l'écart à la commensurabilité est de geler les processus Umklapp, puisque les électrons en interaction ne sont plus sur la surface de Fermi. Cela se traduit dans le traitement en perturbation des couplages effectifs. Par exemple, le développement de $\Gamma_{1//}$ fait intervenir un état intermédiaire avec une paire électron-trou interagissant "en arrière" et un autre avec des interactions g_3 (figure 20). Rappelons l'expression de la fonction de Green qui décrit la propagation d'un électron de spin s sans interaction sur les deux branches (droite et gauche) de spin s :

$$G_{\pm}^S(k, \omega) = \frac{1}{\omega - v_F(\pm k - k_{F_s}) + i\delta \text{sign}(\pm k - k_{F_s})} \quad (\text{III.29})$$

avec $k_{F_s} = k_F - s\mu_B H/v_F$, $s = \pm 1$. Le premier diagramme de la figure 21 donne la contribution :

$$- \int \frac{dk'}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_+^{-S}(k', \omega') G_-^{-S}(k' - 2k_{F_s}, \omega' - \omega) = \frac{1}{2\pi v_F} \ln \frac{|\omega^2 - 16h^2|^{1/2}}{E_0} \quad (\text{III.30})$$

ODC réponse au vecteur d'onde $Q = 2k_{F\sigma}$

$$N(\omega) = \frac{1}{2\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left[1 + \frac{\bar{g}_{1\parallel} - \bar{g}_{2\parallel} + \bar{g}_3}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{\Delta}{E_0} \right] + \frac{1}{2\pi v_F} \ln \frac{\Delta}{E_0} \left[1 + \frac{\bar{g}_{1\parallel} - \bar{g}_{2\parallel} + \bar{g}_3}{2} \ln \frac{\Delta}{E_0} \right]$$

ODS_z $Q = 2k_{F\sigma}$

$$X_z(\omega) = N(\omega) \text{ en changeant } \bar{g}_{1\perp} \rightarrow -\bar{g}_{1\perp}$$

ODS_t $Q = 2k_F$

$$X_t(\omega) = \frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left[1 - \frac{\bar{g}_{2\parallel} - \bar{g}_3}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} \right] \text{ est inchangée sous champ}$$

SS $Q = k_{F\sigma} - k_{F-\sigma}$

$$\Delta_s(\omega) = \frac{1}{2\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left[1 + \frac{\bar{g}_{2\perp}}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \frac{\bar{g}_{1\perp}}{2} \ln \frac{\Delta}{E_0} \right] - \frac{1}{2\pi v_F} \frac{\Delta}{E_0} \left[1 + \frac{\bar{g}_{2\perp}}{2} \ln \frac{\Delta}{E_0} \right]$$

ST(S_z=0) $Q = k_{F\sigma} - k_{F-\sigma}$

$$\Delta_{t0}(\omega) = \Delta_s(\omega) \text{ en changeant } \bar{g}_{1\perp} \rightarrow -\bar{g}_{1\perp}$$

ST(S_z=1) $Q = 0$

$$\Delta_{t1} = -\frac{1}{\pi v_F} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_{2\parallel} - \bar{g}_{1\parallel}}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} \right) \text{ ne dépend pas du champ}$$

Fonctions de réponse sous champ magnétique $h \neq 0$
 et lorsque $\delta\mu = 0$; $\Delta^2 = |\omega^2 - 16 h^2|$

et le second est égal à

$$- \int \frac{dk'}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_+^{-s}(k', \omega') G_-^{-s}(k'+2k_F - G, \omega' - \omega) = \frac{1}{2\pi v_F} \ln \frac{|\omega^2 - 16\delta\mu^2|^{1/2}}{E_0} \quad (\text{III.31})$$

$\delta\mu = v_F(k_F - G/4)$ est la variation de potentiel chimique ; G est un vecteur du réseau réciproque. La contribution similaire de ces deux diagrammes souligne une profonde analogie entre les effets de champ et de potentiel chimique. Le calcul de tous les diagrammes, lorsque $h \neq 0$ et $\delta\mu \neq 0$, nous a conduits au développement suivant :

$$\Gamma_{\parallel} - \Gamma_2 = \bar{g}_{1\parallel} + \bar{g}_{1\perp}^2 \ln \frac{|\omega^2 - 16h^2|^{1/2}}{E_0} + \dots \quad (\text{III.32a})$$

$$\Gamma_{1\perp} = \bar{g}_{1\perp} + \frac{1}{2} \bar{g}_{1\parallel} \bar{g}_{1\perp} \left(\ln \frac{\omega}{E_0} + \ln \frac{|\omega^2 - 16h^2|^{1/2}}{E_0} \right) + \dots$$

$$\Gamma_{\parallel} + \Gamma_{2\perp} = \bar{g}_{1\parallel} - 2\bar{g}_2 + \bar{g}_3^2 \ln \frac{|\omega^2 - 16\delta\mu^2|^{1/2}}{E_0} + \dots \quad (\text{III.32b})$$

$$\Gamma_3 = \bar{g}_3 + \frac{1}{2} \bar{g}_3 (\bar{g}_{1\parallel} - 2\bar{g}_2) \left(\ln \frac{\omega}{E_0} + \ln \frac{|\omega^2 - 16\delta\mu^2|^{1/2}}{E_0} \right) + \dots$$

où nous avons regroupé les couplages effectifs de façon à faire apparaître le découplage entre, d'une part, le jeu de paramètres $(g_{1\parallel}, g_{1\perp})$ affectés par le champ et, d'autre part, l'ensemble $(g_{1\parallel} - 2g_2, g_3)$ affecté par le potentiel chimique.

Le développement en perturbation des fonctions de réponse est aussi affecté par le champ ou par une variation du potentiel chimique. Nous avons calculé ces développements qui sont rapportés page 44, au premier ordre de perturbation lorsque $\delta\mu = 0$. L'élément essentiel introduit par le champ magnétique ou par $\delta\mu$ est la saturation à basse fréquence de certains diagrammes, à la valeur $\ln \frac{4h}{E_0}$ ou $\ln \frac{4\delta\mu}{E_0}$. Voyons comment le traitement de renormalisation se trouve modifié par ces "champs".

β - Le groupe de renormalisation en présence d'un champ.

Nous nous intéressons au comportement du gaz d'électrons pour des champs physiquement accessibles c'est-à-dire tels que $h \ll E_0$, E_0 étant de l'ordre de l'énergie de Fermi. On se trouve donc en présence d'un problème logarithmique avec deux singularités, l'une en $\ln \omega$ et l'autre en $\ln h$. Nous devons donc construire une procédure de renormalisation à deux coupures. Ce

genre de procédure a déjà été envisagé dans la littérature pour décrire le gaz d'électrons interagissant via les phonons [70, 71]. Les deux énergies caractéristiques sont alors E_0 et la fréquence de Debye ω_D . Ici ce sont E_0 et l'énergie Zeeman. En fonction des deux paramètres de renormalisation indépendants $\frac{\omega}{4h}$ et $\frac{4h}{E_0}$, les vertex se réécrivent à basse fréquence (nous nous limitons à la description du plan $g_{1//}$, $g_{1\perp}$, l'effet de $\delta\mu$ sur l'espace de paramètres $g_{1//} - 2g_2$, g_3 se décrivant de façon identique) :

$$\begin{aligned} \Gamma_{//} - \Gamma_{2\perp} &= \bar{g}_{1//} + \bar{g}_{1\perp}^2 \ln \frac{4h}{E_0} + \dots \\ \Gamma_1 &= \bar{g}_{1\perp} + \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{4h}{E_0} + \frac{1}{2} \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{\omega}{4h} + \dots \end{aligned} \quad (\text{III.33})$$

Puisque nous avons un problème logarithmique en $\frac{h}{E_0}$, nous pouvons dériver une équation de Lie et effectuer une première renormalisation dans laquelle h/E_0 varie de 1 à sa valeur physique. On obtient ainsi des couplages renormalisés qui dépendent logarithmiquement de ω/h . Ces couplages sont donc le point de départ d'une seconde renormalisation où le paramètre ω/h varie de 1 à 0, h/E_0 étant maintenu constant [56]. La première étape est équivalente à la renormalisation en champ nul. Les équations de Lie pour ces deux régimes s'écrivent :

$$\frac{d\bar{g}_{1//}}{d\ell} = \bar{g}_{1\perp}^2 \quad \frac{d\bar{g}_{1\perp}}{d\ell} = \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp} \quad \text{lorsque } E \gtrsim 4h \quad (\text{III.34a})$$

$$\frac{d\bar{g}_{1//}}{d\ell} = 0 \quad \frac{d\bar{g}_{1\perp}}{d\ell} = \frac{1}{2} \bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp} \quad \text{si } E \lesssim 4h \quad (\text{III.34b})$$

L'effet du champ est donc de bloquer la renormalisation du couplage $g_{1//}$ lorsque $E < 4h$. Ceci se comprend aisément : les processus $g_{1\perp}$ n'étant plus divergents ne peuvent plus renormaliser $g_{1//}$.

Au lieu de résoudre ce problème avec deux renormalisations successives, il est aussi possible de le décrire comme l'ont fait Seidel et Prigodin pour étudier l'effet du potentiel chimique [54]. Ils considèrent qu'il n'y a qu'un seul problème logarithmique en $\ln \frac{\omega}{E_0}$ et gardent explicitement la forme $\ln \frac{|\omega^2 - \Delta|^{1/2}}{E_0}$ dans le développement en perturbation. Dans ce cas, l'équation

de Lie qu'ils obtiennent doit être intégrée numériquement. Le résultat, rappelé sur la figure 21, montre qu'en excellente approximation, il est possible de séparer cette renormalisation en deux régimes : à haute fréquence $\omega > \Delta$, les processus restent divergents et $\ln \frac{|\omega^2 - \Delta^2|^{1/2}}{E_0} \approx \ln \frac{\omega}{E_0}$; à basse fréquence $\ln \frac{|\omega^2 - \Delta^2|^{1/2}}{E_0} \approx \text{cte}$. On retrouve ainsi le résultat que nous avons obtenu par la double renormalisation.

Les trajectoires de renormalisation sont présentées figure 22. La valeur des couplages au point fixe sous champ est supérieure à leur valeur en champ nul :

$$g_{1//}^{**}(H) > g_{1//}^{**}(0)$$

Dans la région de couplage faible, lorsque $g_{1//} > |g_{1\perp}|$, on déduit immédiatement de l'expression III.23 :

$$g_{1//}^{**}(H) = g_{1//}^{**} \frac{1 + \frac{g_{1//} - g_{1//}^{**}}{g_{1//} + g_{1//}^{**}} \left(\frac{4h}{E_0} \right)^{2\bar{g}_{1//}^{**}}}{1 - \frac{g_{1//} - g_{1//}^{**}}{g_{1//} + g_{1//}^{**}} \left(\frac{4h}{E_0} \right)^{2\bar{g}_{1//}^{**}}}, \quad g_{1\perp}^{**}(H) = 0 \quad (\text{III.35})$$

où $g_{1//}^{**}$ est l'ordonnée du point fixe en l'absence de champ : $g_{1//}^{**} = \sqrt{g_{1//}^2 - g_{1\perp}^2}$.

Lorsque $g_{1//} = |g_{1\perp}| = g_1$, on a

$$g_1^{**}(H) = \frac{g_1}{1 - \bar{g}_1 \ln \frac{4h}{E_0}} \quad (\text{III.36})$$

Dans le cas du couplage fort, le champ peut avoir un effet important quand $0 < g_{1//} < |g_{1\perp}|$: s'il est supérieur à une valeur critique H_T , il ramène le point fixe vers la ligne de Tomonaga $g_{1\perp}^{**} = 0$. Si le point représentatif des couplages nus est juste sous la ligne $g_{1//} = |g_{1\perp}|$, le champ H_T varie selon la forme de Kosterlitz-Thouless [72] :

$$H_T \approx E_0 \exp \frac{-A}{(|g_{1\perp}| - g_{1//})^{1/2}} \quad \text{avec} \quad A = \frac{\pi}{2\sqrt{2}g_1} \quad (\text{III.37})$$

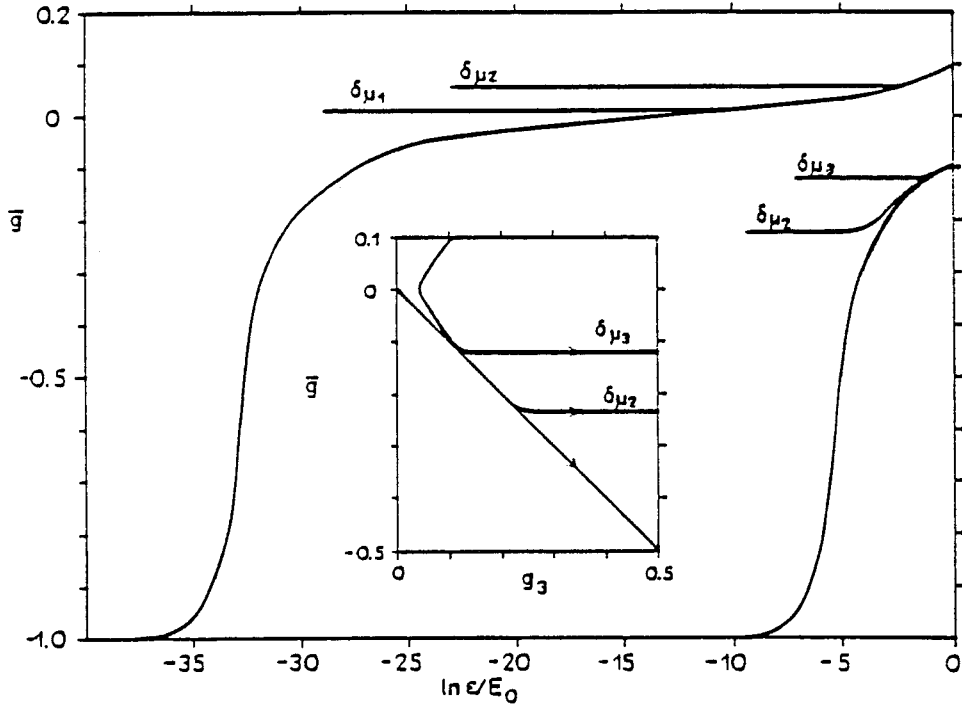


Figure 21 : Renormalisation du couplage $\bar{g} = \bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2$, lorsque $\delta\mu$ est non nul [54]. La renormalisation stoppe lorsque l'échelle d'énergie ω (ici ϵ) est de l'ordre de $\delta\mu$. C'est une bonne approximation de supposer que $\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2$ est constant dès que $\omega = \delta\mu$. Le problème est le même pour la renormalisation de $g_{1//}$ sous champ magnétique

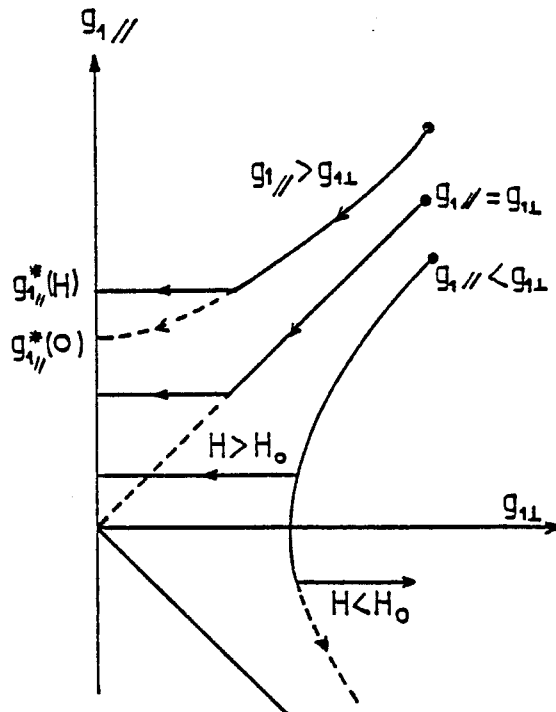


Figure 22 : Trajectoires de renormalisation dans le plan $(g_{1//}, g_{1\perp})$ sous champ magnétique (traits pleins), quand les points de départ, dont les coordonnées sont les valeurs des couplages nus, sont proches de la ligne $g_{1//} = |g_{1\perp}|$. Dans le cas particulier du couplage indépendant du spin, le champ magnétique brise la symétrie $g_{1//} = g_{1\perp}$ et le point fixe $(0, 0)$ est déplacé vers une valeur finie $(g_{1//}^*(H), 0)$. Un cas intéressant se produit près de la ligne $g_{1//} = |g_{1\perp}|$, lorsque $g_{1//} < |g_{1\perp}|$: un champ supérieur à une valeur critique H_T ramène le point fixe vers une région de couplage faible.

On peut donc s'attendre à ce qu'un champ supérieur à H_T modifie le diagramme de phase du gaz de Fermi. Néanmoins, puisque le champ n'a pas d'effet sur le plan $(g_{1//} - 2g_2, g_3)$, il ne permet pas de traverser la ligne $g_{1//} - 2g_2 = |g_3|$ qui sépare les instabilités supraconductrices des instabilités Onde de Densité ; ce que peut permettre une variation du potentiel chimique.

Pour déterminer l'évolution du diagramme de phases sous champ, il est nécessaire de développer une procédure de renormalisation des fonctions de réponse. Comme en champ nul, il est nécessaire d'introduire une grandeur renormalisable multiplicativement $\bar{R}(\omega) = \partial \bar{R} / \partial (\ln \omega / E_0)$ qui, par exemple pour l'Onde de Densité de Charge dans le cas $g_3 = 0$, s'écrit :

$$\bar{R}(\omega) = \bar{N}(\omega) = 1 + (\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//}) \ln \frac{\omega}{E_0} + \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{|\omega^2 - 16h^2|^{1/2}}{E_0} + \dots \quad (\text{III.38})$$

La renormalisation de cette quantité est, elle aussi, séparée en deux régimes, chacun étant décrit par une équation de Lie :

$$\omega \gtrsim 4h \quad \frac{d \ln \bar{R}}{d \ln x} = \bar{g}_{1//}(x) - \bar{g}_2(x) + \bar{g}_{1\perp}(x) \quad (\text{III.39})$$

$$\omega \lesssim 4h \quad \frac{d \ln \bar{R}}{d \ln x} = \bar{g}_{1//}(x) - \bar{g}_2(x)$$

Dans le second régime, le couplage parallèle ne varie plus (eq. III. 34b), de sorte que :

$$\omega \lesssim 4h \quad \frac{d \ln \bar{R}}{d \ln x} = \text{cte} = \bar{g}_{1//} \left(\frac{h}{E_0} \right) - \bar{g}_2 \left(\frac{h}{E_0} \right). \quad (\text{III.40})$$

Cette équation décrit le comportement à basse fréquence de la fonction de réponse ω^α avec :

$$\alpha(H) = \left. \frac{\partial \ln \bar{R}(y, g^*(H))}{\partial y} \right|_{y=1} \quad (\text{III.41})$$

La dépendance complète en champ des fonctions de réponse nécessite l'intégration complète des deux équations de Lie, ce que nous faisons en Appendice B, à l'ordre le plus bas en perturbation. Nous retrouvons dans ce cas les résultats déjà obtenus par le calcul parquet [73], ce qui est normal puisque ces méthodes sont équivalentes. Néanmoins, la méthode que nous avons développée est plus puissante puisqu'elle est applicable à n'importe quel ordre en perturbation, le principe restant exactement le même. Nous l'utiliserons aux paragraphes III - E. c. et III - F pour en déduire le diagramme de phases sous champ.

III - C. 2. Méthode de la bosonisation

III - C. 2. a. Le principe

Cette méthode est intéressante à plusieurs titres :

- Elle permet de découpler les degrés de liberté de spin et de charge, et de montrer ensuite l'équivalence des effets du potentiel chimique et du champ magnétique, le premier agissant sur les degrés de charge, le second sur ceux de spin.

- Elle conduit à une ligne de solutions exactes dans la région de couplage fort.

- Elle permet de montrer l'équivalence du modèle de g-ologie avec de nombreux autres problèmes de basse dimensionnalité comme le problème de Sine-Gordon 1D ou le gaz de Coulomb 2D pour lesquels les équations de renormalisation donnent une meilleure compréhension de la région de couplage fort.

Le principe de cette méthode est de remplacer la description du problème de fermions en termes d'opérateurs densité. La quantification des fluctuations de densité, comme dans le cas d'une chaîne d'atomes par exemple, introduit des opérateurs bosons dont le maniement est plus simple que celui des fermions. On définit les opérateurs densité au point x :

$$\begin{aligned}
\rho_{1\uparrow}(x) &= \psi_{1\uparrow}^+ \psi_{1\uparrow} & \rho_{2\uparrow}(x) &= \psi_{2\uparrow}^+ \psi_{2\uparrow} \\
\rho_{1\downarrow}(x) &= \psi_{1\downarrow}^+ \psi_{1\downarrow} & \rho_{2\downarrow}(x) &= \psi_{2\downarrow}^+ \psi_{2\downarrow}
\end{aligned}
\tag{III.42}$$

En fonction de ces opérateurs, certaines parties de l'hamiltonien s'expriment très facilement. Ce n'est pas le cas des termes $g_{1\perp}$ et g_3 qui font intervenir des produits $\psi_{i\uparrow}^+ \psi_{i\downarrow}$ ou $\psi_{i\uparrow}^+ \psi_{i\downarrow}^+$. Il faudrait donc pouvoir écrire explicitement les opérateurs ψ en fonction des opérateurs ρ , c'est-à-dire inverser les expressions III.42.

III - C. 2. b. La méthode

α - Représentation bosonisée des champs de fermions

Cette technique a été introduite par Mattis et Lieb [47]. Emery [48] et Solyom [49] en décrivent les éléments essentiels, les calculs étant effectués dans l'espace réciproque. Nous présentons ici une version de cette méthode dans

l'espace réel, le formalisme y étant moins lourd. Nous y avons adjoint par ailleurs la contribution h et $\delta\mu$. La première étape est d'établir un certain nombre de relations de commutation entre ces opérateurs.

Commutation de ρ avec ρ

Dans l'espace réciproque cette relation s'écrit

$$\left[\tilde{\rho}(p), \tilde{\rho}(p') \right] = \frac{pL}{2\pi} \delta_{pp'} \quad [47-49] . \text{ Dans l'espace réel, elle devient}$$

$$\left[\rho(x), \rho(x') \right] = \frac{1}{2i\pi} \frac{\partial}{\partial(x-x')} \delta(x-x') . \rho \text{ n'est donc pas réellement un opérateur boson. Sa quantité conjuguée s'écrit}$$

$$\phi(x) = 2\pi \int \rho(x) dx \quad (\text{III.43})$$

de sorte que

$$\left[\rho(x), \phi(x') \right] = i \delta(x-x') \quad (\text{III.44})$$

Commutation de ρ avec ψ

Il est immédiat de montrer que :

$$\left[\rho(x), \psi(x') \right] = - \delta(x-x') \psi(x) \quad (\text{III.45})$$

A l'aide des deux relations de commutation III.44 et III.45, il est possible d'écrire ψ en fonction de ρ . Nous utilisons pour cela un formalisme bien connu de mécanique quantique [74] : si Q et P sont deux opérateurs conjugués, $(Q, P) = i$, et si on introduit l'opérateur $S(\lambda) = \exp(-i \lambda P)$, on montre que :

$$\left[Q, S(\lambda) \right] = \lambda S(\lambda) \quad (\text{III.46})$$

Une généralisation très simple à des opérateurs champ conjugués ρ et ϕ s'écrit :

$$\left[\rho(x), e^{-i\lambda \phi(x')} \right] = \lambda e^{-i\lambda \phi(x)} \delta(x-x') \quad (\text{III.47})$$

En comparant cette relation avec la relation de commutation III.45, il vient :

$$\psi(x) \propto e^{i\phi(x)} \quad (\text{III.48})$$

Il reste à normaliser cette expression ; il faut que $\{\psi(x), \psi(x')\}_+ = \delta(x-x')$.

On introduit la coupure α telle que

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\phi(x)} \quad (\text{III.49})$$

Ainsi $1/2\pi\alpha$ est la densité électronique. α est donc inversement proportionnelle à la largeur de bande. Les problèmes liés au choix d'une coupure α sont discutés dans la littérature [49, 79, 76]. Nous ne les aborderons pas.

La relation III.49 est l'expression bosonisée du champ de fermions $\psi(x)$. Quelle est sa signification physique ? Revenons pour cela à l'opérateur $S(\lambda) = e^{-i\lambda P}$ défini plus haut. C'est un opérateur de translation, c'est-à-dire qu'appliqué à un vecteur propre $|q\rangle$ de l'opérateur Q , il donne le vecteur propre $|q + \lambda\rangle$ dont la valeur propre associée est translatée de λ . L'opérateur $\exp(i\phi(x))$ a la même signification. Il translate la valeur propre de $\rho(x)$ de une unité, c'est-à-dire qu'il crée (ou annihile) une particule au point x . Il joue donc le même rôle que l'opérateur $\psi(x)$. En tenant compte du spin ($s = \pm 1$) et de l'indice de bande $r = 1$ ou 2 , l'expression bosonisée des opérateurs fermions s'écrit

$$\psi_{rs}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\phi_{rs}(x)} \quad (\text{III.50})$$

avec

$$\phi_{rs}(x) = (-1)^r 2\pi \int \rho_{rs}(x) dx \quad (\text{III.51})$$

β) Représentation bosonisée de l'hamiltonien

A partir de cette transformation, il est maintenant possible d'écrire explicitement l'hamiltonien en fonction des ρ_{rs} ou de leurs quantités conjuguées ϕ_{rs} :

— \mathcal{H}_0 contient des termes de la forme $\psi^+ \frac{\partial}{\partial x} \psi$. Or,

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = i \frac{\partial \phi}{\partial x} \psi = 2i\pi\rho .$$

Ainsi,

$$\mathcal{H}_0 = \pi v_F \int (\rho_{1\uparrow} \rho_{1\uparrow} + \rho_{1\downarrow} \rho_{1\downarrow} + \rho_{2\uparrow} \rho_{2\uparrow} + \rho_{2\downarrow} \rho_{2\downarrow}) dx \quad (\text{III.52})$$

— Le terme en $g_{1\perp}$ s'écrit :

$$\frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int \cos(\phi_{1\uparrow} - \phi_{1\downarrow} + \phi_{2\downarrow} - \phi_{2\uparrow}) dx, \quad (\text{III.53})$$

— et celui en g_3 :

$$\frac{2g_3}{(2\pi\alpha)^2} \int \cos(\phi_{2\uparrow} + \phi_{2\downarrow} - \phi_{1\uparrow} - \phi_{1\downarrow} - Gx) dx \quad (\text{III.54})$$

- Le terme Zeeman devient

$$\mathcal{H}_Z = \mu_B H \int (\rho_{1\uparrow} + \rho_{2\uparrow} - \rho_{1\downarrow} - \rho_{2\downarrow}) dx \quad (\text{III.55})$$

- Rappelons l'écriture évidente des autres termes :

$$(g_{2\parallel} - g_{1\parallel}) \int (\rho_{1\uparrow}\rho_{2\uparrow} + \rho_{1\downarrow}\rho_{2\downarrow}) dx + g_{2\perp} \int (\rho_{1\uparrow}\rho_{2\downarrow} + \rho_{1\downarrow}\rho_{2\uparrow}) dx \quad (\text{III.56})$$

A-t-on progressé ? Le problème est entièrement écrit en fonction des opérateurs ρ et ϕ , Les termes cinétiques, en $g_{2\parallel} - g_{1\parallel}$ et en $g_{2\perp}$, étant bilinéaires. Une complication est introduite dans les termes $g_{1\perp}$ et g_3 , en cosinus. Le premier pas est de diagonaliser les termes bilinéaires en découplant les spins \uparrow et \downarrow :

γ) Découplage des degrés de liberté de spin et de charge

On introduit les opérateurs de charge et de spin :

$$\rho_r = \frac{\rho_{r\uparrow} + \rho_{r\downarrow}}{\sqrt{2}} \quad \sigma_r = \frac{\rho_{r\uparrow} - \rho_{r\downarrow}}{\sqrt{2}} \quad (\text{III.57})$$

Les opérateurs ϕ sont aussi affectés par la même transformation

$$\phi_r^\rho = \frac{\rho_{r\uparrow} + \phi_{r\downarrow}}{\sqrt{2}} \quad \phi_r^\sigma = \frac{\rho_{r\uparrow} - \phi_{r\downarrow}}{\sqrt{2}} \quad (\text{III.58})$$

Cette diagonalisation sépare les contributions de spin et de charge, non seulement dans les termes bilinéaires mais aussi dans les cosinus, tout simplement parce qu'au lieu de manipuler des produits d'opérateurs fermions, on opère sur des sommes d'opérateurs "bosons". L'hamiltonien se découple en deux parties, la première n'agissant que sur les degrés de charge, le seconde sur ceux de spin :

$$\mathcal{H}_\rho = \pi v_F \int (\rho_1 \rho_1 + \rho_2 \rho_2) dx - (g_{1\parallel} - 2g_2) \int \rho_1 \rho_2 dx + \frac{2g_3}{(2\pi\alpha)^2} \int \cos(\sqrt{2}(\phi_2^\rho - \phi_1^\rho) + Gx) dx \quad (\text{III.59})$$

$$\mathcal{H}_\sigma = \pi v_F \int (\sigma_1 \sigma_1 + \sigma_2 \sigma_2) dx - g_{1\parallel} \int \sigma_1 \sigma_2 dx + \frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int \cos \sqrt{2}(\phi_2^\sigma - \phi_1^\sigma) dx + h\sqrt{2} \int (\sigma_1 + \sigma_2) dx \quad (\text{III.60})$$

avec $h = \mu_B H$. Nous avons aussi introduit de nouveaux opérateurs "bosons" ρ et σ de charge et de spin (au lieu des "bosons" ρ_\uparrow et ρ_\downarrow). A partir de ces nouveaux opérateurs, il pourra être utile de redéfinir de nouveaux opérateurs fermions :

$$\begin{aligned} \psi_\rho &\propto e^{i\phi_\rho} \\ \psi_\sigma &\propto e^{i\phi_\sigma} \end{aligned} \tag{III.61}$$

On les appelle fermions sans spin. (Disons plutôt que ce nouvel opérateur a un degré de liberté interne qui n'est plus : spin = ↑ ou ↓ mais "spin" = ρ ou σ. Il y a un hamiltonien pour le "spin" ρ et un autre pour le "spin" σ).

Il est maintenant possible d'étudier chacun des deux hamiltoniens séparément puisqu'ils ont une structure identique, au moins en champ nul. Rappelons comment ces hamiltoniens ont été étudiés, en prenant \mathcal{H}_σ en champ nul à titre d'exemple. De la même manière que nous avons découpé les spins ↑ et ↓, il est tentant d'éliminer le terme bilinéaire $\sigma_1 \sigma_2$ qui couple les deux côtés de la surface de Fermi :

δ) Découplage "droite-gauche"

On introduit la transformation de Bogoliubov d'angle θ [49, 77]:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \tilde{\sigma}_1 \operatorname{ch}\theta + \tilde{\sigma}_2 \operatorname{sh}\theta \\ \sigma_2 &= \tilde{\sigma}_1 \operatorname{sh}\theta + \tilde{\sigma}_2 \operatorname{ch}\theta \end{aligned} \tag{III.62}$$

L'hamiltonien devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\sigma &= (2\pi v_F \operatorname{ch}2\theta - g_{1//} \operatorname{sh}2\theta) \int (\tilde{\sigma}_1 \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2 \tilde{\sigma}_2) dx \\ &+ (2\pi v_F \operatorname{sh}2\theta - g_{1//} \operatorname{ch}2\theta) \int (\tilde{\sigma}_1 \tilde{\sigma}_2 + \tilde{\sigma}_2 \tilde{\sigma}_1) dx \\ &+ \frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int \cos \{ \sqrt{2} \exp\theta (\tilde{\phi}_1^\sigma - \tilde{\phi}_2^\sigma) \} dx \end{aligned} \tag{III.63}$$

Deux lignes de solutions exactes existent pour cet hamiltonien dans l'espace des couplages $(g_{1//}, g_{1\perp})$.

ε) La solution de Tomonoga

Lorsque $g_{1\perp} = 0$, il est toujours possible de choisir l'angle θ de la transformation en fonction du couplage $g_{1//}$, de telle sorte que le terme non diagonal s'annule [49] :

$$\text{th } 2\theta = \frac{g_{1//}}{2\pi v_F} \longleftrightarrow \exp 2\theta = \left(\frac{1 + \bar{g}_{1//}/2}{1 - \bar{g}_{1//}/2} \right)^{1/2} \text{ noté } \gamma_\sigma \quad (\text{III.64})$$

avec $\bar{g}_1 = g_1 / \pi v_F$. Ainsi,

$$\mathcal{H}_\sigma = 2\pi v_\sigma \int (\tilde{\sigma}_1^+ \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2^+ \tilde{\sigma}_2) dx \quad (\text{III.65})$$

a la même structure qu'un hamiltonien de particule libre. Le spectre des excitations est linéaire $\varepsilon(k) = v_\sigma k$ avec

$$v_\sigma = v_F / \text{ch } 2\theta = v_F (1 - \bar{g}_{1//}^2/4)^{1/2} \quad (\text{III.66})$$

z) La solution de Luther-Emery [68]

Dans le cas où $g_{1\perp}$ est non nul, il existe une solution exacte lorsque l'angle θ de la transformation de Bogoliubov est tel que :

$$\sqrt{2} \exp \theta = 1 \quad (\text{III.67})$$

Dans ce cas le terme en cosinus se réécrit en termes de fermions sans spin.

$$2\cos(\phi_1^\sigma - \phi_2^\sigma) \propto \tilde{\psi}_{1\sigma}^+ \tilde{\psi}_{2\sigma} + \tilde{\psi}_{2\sigma}^+ \tilde{\psi}_{1\sigma} \quad (\text{III.68})$$

Le terme cinétique peut aussi se réécrire en terme de ces opérateurs puisque

$$\tilde{\sigma}_1^+ \tilde{\sigma}_1 = \frac{i}{2\pi} \tilde{\psi}_{1\sigma}^+ \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\psi}_{1\sigma} \quad (\text{III.69})$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\sigma &= \frac{\pi v_F}{8} (10 + 3\bar{g}_{1//}) \int (\tilde{\psi}_{1\sigma}^+ \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\psi}_{1\sigma} - \tilde{\psi}_{2\sigma}^+ \frac{\partial}{\partial x} \tilde{\psi}_{2\sigma}) dx \\ &\quad - \frac{\pi v_F}{4} (6 + 5\bar{g}_{1//}) \int (\tilde{\sigma}_1^+ \tilde{\sigma}_2 + \tilde{\sigma}_2^+ \tilde{\sigma}_1) dx + \frac{g_{1\perp}}{2\pi\alpha} \int (\tilde{\psi}_{1\sigma}^+ \tilde{\psi}_{2\sigma} + \tilde{\psi}_{2\sigma}^+ \tilde{\psi}_{1\sigma}) dx \end{aligned} \quad (\text{III.70})$$

Le terme bilinéaire en σ est un terme d'interaction à 4 fermions qui complique le problème. Il s'annule dans le cas particulier où les conditions III.64 et III.67 sont réunies, c'est-à-dire lorsque

$$g_{1//} = - \frac{6\pi v_F}{5}$$

Dans ce cas l'hamiltonien \mathcal{H}_σ se diagonalise facilement et donne un spectre de la forme:

$$\varepsilon(k) = (u^2 k^2 + \Delta_\sigma^2)^{1/2} \quad \text{avec } u = \frac{4}{5} v_F \quad (\text{III.71})$$

Il existe un gap Δ_σ dans le spectre de l'hamiltonien H_σ . Ce gap est égal à

$$\Delta_\sigma = \frac{g_{1\perp}}{2\pi\alpha}$$

III - C. 2. c. Les résultats

A l'aide des méthodes que nous avons rappelées, a été établi le "diagramme de phases" du gap de Fermi 1D en champ magnétique nul, lorsque $G = 4k_F$ et $g_3 \neq 0$ [91] ou bien lorsque $g_3 = 0$ [49] (figure 23). Dans les paragraphes suivants, nous généraliserons ces résultats en cherchant le comportement du gaz d'électrons en fonction du champ magnétique et du potentiel chimique.

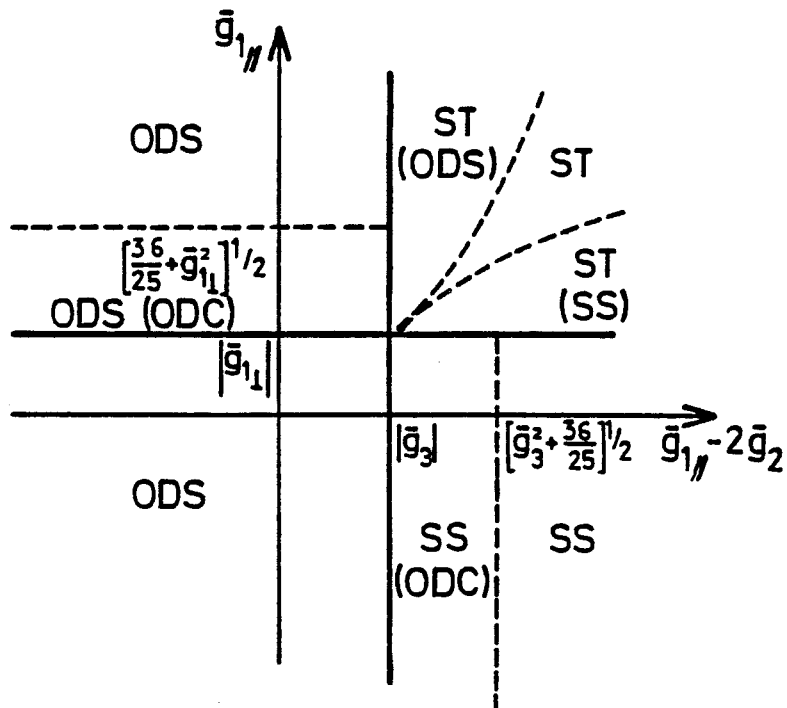


Figure 23 a

"Diagramme de phases" du gaz de Fermi 1D dans le cas d'une bande demi-remplie [91].
Les fonctions de réponse entre parenthèses ont une divergence plus faible

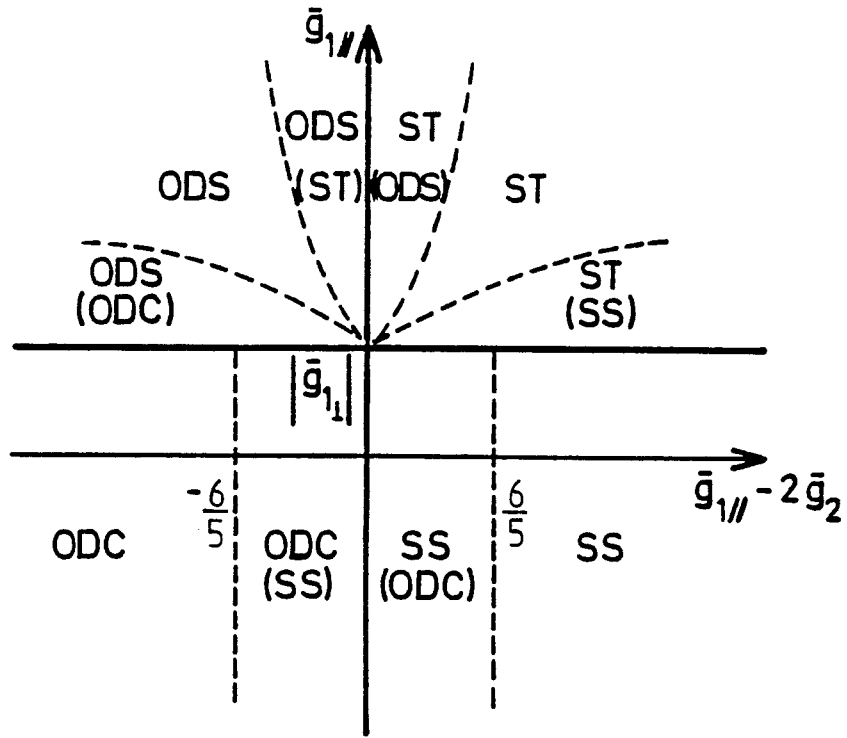


Figure 23 b

"Diagramme de phases" du gaz de Fermi 1D lorsque $g_3 = 0$ [49]

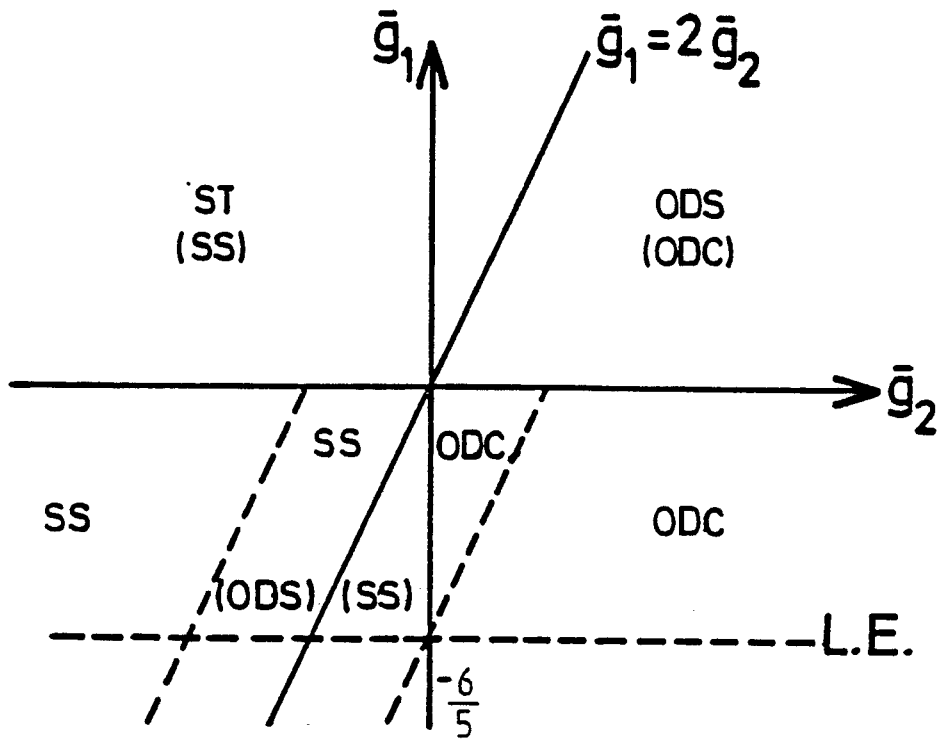


Figure 23 c

Diagramme " $g_1 g_2$ " déduit du diagramme précédent lorsque $g_{1\parallel} = g_{1\perp} = g_1$ [49]

III - D. EQUIVALENCE DES PROBLEMES DE CHAMP MAGNETIQUE ET DE POTENTIEL CHIMIQUE

L'utilisation de la bosonisation va nous permettre de généraliser l'équivalence des hamiltoniens de spin et de charge, lorsqu'un champ magnétique ou une variation de potentiel chimique sont appliqués. Si on introduit les variables de phase :

$$\phi^\rho(x) = \frac{\phi_1^\rho - \phi_2^\rho}{\sqrt{4\pi}} = \sqrt{\pi} \int (\rho_1 + \rho_2) dx \quad (\text{III.72})$$

et

$$\phi^\sigma(x) = \frac{\phi_1^\sigma - \phi_2^\sigma}{\sqrt{4\pi}} = \sqrt{\pi} \int (\sigma_1 + \sigma_2) dx \quad (\text{III.73})$$

et leurs quantités conjuguées,

$$\Pi^\rho(x) = \sqrt{\pi} (\rho_1 - \rho_2) \quad \Pi^\sigma(x) = \sqrt{\pi} (\sigma_1 - \sigma_2), \quad (\text{III.74})$$

chaque partie de l'hamiltonien prend la forme d'un hamiltonien de Sine-Gordon :

$$\mathcal{H}_\rho = \int v_F \left\{ \left(1 + \frac{\bar{g}_\rho}{2}\right) \frac{\Pi_\rho^2}{2} + \left(1 - \frac{\bar{g}_\rho}{2}\right) \frac{(\nabla\phi_\rho)^2}{2} \right\} + \frac{2g_3}{(2\pi\alpha)^2} \cos(\sqrt{8\pi} \phi_\rho - Gx) - \mu \sqrt{\frac{2}{\pi}} \nabla\phi_\rho \quad dx \quad (\text{III.75})$$

avec $g_\rho = g_{1//} - 2g_2$.

$$\mathcal{H}_\sigma = \int v_F \left\{ \left(1 + \frac{\bar{g}_{1//}}{2}\right) \frac{\Pi_\sigma^2}{2} + \left(1 - \frac{\bar{g}_{1//}}{2}\right) \frac{(\nabla\phi_\sigma)^2}{2} \right\} + \frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \cos\sqrt{8\pi} \phi_\sigma + h \sqrt{\frac{2}{\pi}} \nabla\phi_\sigma \quad dx \quad (\text{III.76})$$

Nous avons ici généralisé la dérivation de Heidenreich et coll. [78] lorsque h et $\delta\mu$ sont non nuls. k_F est le vecteur de Fermi du gaz sans interaction. $v_F k_F$ est le potentiel chimique μ du gaz avec interactions.

Ces deux hamiltoniens sont analogues (à un terme constant près) si on choisit dans \mathcal{H}_ρ la nouvelle phase :

$$\phi'_\rho = \phi_\rho - \frac{G}{\sqrt{8\pi}} x. \quad (\text{III.77})$$

Ce décalage de phase revient à choisir l'origine de la densité électronique lorsque la bande est 1/2 remplie. Dans les expressions III.75 et III.76, le terme en gradient décrit d'une part le couplage de l'aimantation $m = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int \nabla\phi_\sigma \quad dx$

degrés de liberté de charge	degrés de liberté de spin
$\delta\mu$ potentiel chimique $g_{1//} - 2g_2$ g_3 ODC ODC SS ST n densité électronique	h énergie Zeeman $g_{1//}$ $g_{1\perp}$ ODC SS ODS ST m aimantation

Table I

Equivalences obtenues en inversant degrés de liberté
de spin et de charge

au champ magnétique et d'autre part, le couplage de la densité électronique $n = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int \nabla \phi_\rho dx$ au potentiel chimique.

Les expressions III.75 et III.76 montrent l'équivalence entre l'effet du champ magnétique sur les degrés de liberté de spin et celui du potentiel chimique sur les degrés de charge. La table I présente les correspondances entre les différents paramètres. Nous utiliserons cette équivalence pour en déduire par la suite un diagramme complet du gaz d'électrons en fonction du champ et du potentiel chimique.

L'hamiltonien de la forme III.75 ou III.76 a déjà été discuté en détail dans la littérature [49, 79]. Il est équivalent au problème de Sine-Gordon 2D classique avec incommensurabilité le long d'une direction [20, 81]. L'aimantation et la densité électronique jouent le même rôle que l'incommensurabilité moyenne, c'est-à-dire la densité de solitons dans le problème de Sine-Gordon. D'ailleurs, pour celui-ci, des équations de renormalisation ont été dérivées directement [81]. Elles donnent des résultats analogues à ceux que nous avons obtenus dans le traitement du modèle de g-ologie. Dans le problème de Sine-Gordon, le comportement des trajectoires de renormalisation change lorsque le paramètre de réseau atteint la distance entre solitons ; alors le potentiel d'accrochage ne contribue plus à l'énergie libre. De façon analogue, les processus $g_{1\perp}$ sont inhibés quand l'échelle d'énergie de renormalisation est de l'ordre de l'énergie de Zeeman.

Si $g_{1\perp} = 0$, l'hamiltonien \mathcal{H}_σ est soluble exactement car, par la transformation

$$\phi_\rho = \tilde{\phi}_\rho \left(\frac{1 + \bar{g}_{1//}/2}{1 - \bar{g}_{1//}/2} \right)^{1/4} \quad (\text{III.78})$$

$$\Pi_\rho = \tilde{\Pi}_\rho \left(\frac{1 - \bar{g}_{1//}/2}{1 + \bar{g}_{1//}/2} \right)^{1/4}, \quad (\text{III.79})$$

il se ramène à l'hamiltonien libre :

$$\mathcal{H}_\sigma = v_\sigma \int \frac{\tilde{\Pi}_\rho^2}{2} + \frac{(\nabla \tilde{\phi}_\rho)^2}{2} dx \quad (\text{III.80})$$

avec $v_\sigma = v_F(1 - \bar{g}_{1//}^2/4)^{1/2}$

C'est la version bosonisée de l'hamiltonien de fermions libres avec un spectre d'excitations $E(k) = v_\sigma k$.

Nous avons vu que \mathcal{H}_σ^p et \mathcal{H}_ρ^p pouvaient être transformés en hamiltoniens de fermions sans spin. Il est facile de voir que l'application d'un champ magnétique ou qu'une variation $\delta\mu$ revient à changer le niveau de Fermi des fermions sans spin, en ajoutant un terme de la forme $h \int (\tilde{\psi}_{1\sigma}^\dagger \tilde{\psi}_{1\sigma} + \tilde{\psi}_{2\sigma}^\dagger \tilde{\psi}_{2\sigma}) dx$ pour \mathcal{H}_σ par exemple. Or, tant que le niveau de Fermi reste dans le gap $2\Delta_\sigma$, c'est-à-dire tant que l'élargissement Zeeman $2h$ est inférieur à $2h_c = 2\Delta_\sigma$, les propriétés du gaz d'électrons restent inchangées. Par conséquent, l'aimantation reste nulle tant que $h < h_c$. En utilisant le formalisme des fermions sans spin, on trouve ainsi, lorsque $\Delta \neq 0$ c'est-à-dire dans la région du couplage fort, que l'aimantation varie comme :

$$\begin{aligned}
 m &= 0 & \text{si } h < h_c \\
 m &= \frac{2}{\pi \tilde{v}_\sigma} \operatorname{sgn}(h) (h^2 - h_c^2)^{1/2} & \text{si } h > h_c
 \end{aligned}
 \tag{III.81}$$

Par ailleurs, la densité électronique varie de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 m &= \frac{G}{2\pi} & \text{si } \delta\mu < \delta\mu_c = \Delta_\rho \\
 m &= \frac{G}{2\pi} + \frac{2 \operatorname{sgn}(\delta\mu)}{\pi \tilde{v}_\rho} (\delta\mu^2 - \delta\mu_c^2)^{1/2} & \text{si } \delta\mu > \delta\mu_c
 \end{aligned}
 \tag{III.82}$$

Sur la ligne de Luther-Emery, $\Delta_\sigma = g_{1\perp} / 2\pi\alpha$. Hors de cette ligne, le gap varie avec le couplage $g_{1\parallel}$ et peut être estimé à l'aide du groupe de renormalisation (voir § III - C. 1. c. α). Il s'annule sur la ligne $g_{1\parallel} = |g_{1\perp}|$. La remarque est la même en ce qui concerne Δ_ρ . Quand le gap est nul (couplage faible), l'aimantation et la densité électronique varient comme :

$$m = \frac{2h}{\pi \tilde{v}_\sigma} \quad \text{et} \quad n = \frac{2\delta\mu}{\pi \tilde{v}_\rho}
 \tag{III.83}$$

Dans ces expressions \tilde{v}_σ et \tilde{v}_ρ sont des vitesses de Fermi renormalisées par les interactions parallèles : $\tilde{v}_\sigma = v_F (1 - \bar{g}_{1\parallel}/2)^{-1}$ et $\tilde{v}_\rho = v_F (1 - \bar{g}_\rho/2)^{-1}$ avec $g_\rho = g_{1\parallel} - 2g_2$.

Par ailleurs, le vecteur d'onde de Fermi est égal à $\frac{\pi}{2} n$, de sorte que, en présence d'interactions :

$$\tilde{k}_F = \frac{G}{4} \quad \text{tant que } \delta\mu < \delta\mu_C \quad (III.84)$$

et

$$\tilde{k}_F = \frac{G}{4} + \frac{\text{sgn}(\delta\mu)}{\tilde{v}_\rho} (\delta\mu^2 - \delta\mu_C^2)^{1/2} \quad \text{si } \delta\mu > \delta\mu_C .$$

Si le gap de charge Δ_ρ est nul,

$$\tilde{k}_F = \frac{G}{4} + \frac{\delta\mu}{\tilde{v}_\rho} \quad (III.85)$$

En présence d'un champ, il y a deux sous-bandes de spins opposés, dont les vecteurs d'onde de Fermi sont égaux à $\tilde{k}_{F_s} = \frac{\pi}{2} (n \pm m)$:

$$\tilde{k}_{F_s} = \tilde{k}_F \quad \text{si } h < h_C \quad (III.86)$$

$$\tilde{k}_{F_s} = \tilde{k}_F + \frac{s}{\tilde{v}_\sigma} (h^2 - h_C^2)^{1/2} \quad \text{si } h > h_C$$

D'autre part, à température nulle, la susceptibilité magnétique s'écrit :

$$\chi = \frac{1}{\pi \tilde{v}_\sigma} \frac{h}{(h^2 - h_C^2)^{1/2}} \quad \text{si } h > h_C \quad (III.87)$$

De même, au voisinage d'une bande 1/2 remplie, il y a une divergence de la compressibilité :

$$\kappa = \frac{1}{\pi \tilde{v}_\rho} \frac{\delta\mu}{(\delta\mu^2 - \delta\mu_C^2)^{1/2}} \quad \text{si } \delta\mu > \delta\mu_C \quad (III.88)$$

A cause du gap dans le spectre de \mathcal{H}_σ , Emery et coll. [52] ont trouvé un comportement activé de la susceptibilité magnétique à basse température lorsque $h < h_C$

$$\chi = \frac{1}{\pi \tilde{v}_\sigma} (2\pi\beta \Delta_\sigma)^{1/2} e^{-\beta\Delta_\sigma} \quad \beta = 1/k_B T \quad (III.89)$$

et on prévoit donc un comportement analogue de la compressibilité lorsque la bande est 1/2 remplie c'est-à-dire tant que $\delta\mu < \delta\mu_c$.

Le comportement de la chaleur spécifique a été prédit pour différentes limites, en présence d'un champ magnétique [57]. On s'attend donc à des comportements similaires en fonction du potentiel chimique, en particulier : un comportement activé de la contribution des degrés de liberté de charge à la chaleur spécifique lorsque $\delta\mu < \delta\mu_c$; un comportement linéaire en température quand $\delta\mu > \delta\mu_c$; une variation en \sqrt{T} si $\delta\mu = \delta\mu_c$.

III - E. LES FONCTIONS DE REPONSE SOUS CHAMP

La méthode de la bosonisation permet aussi d'analyser beaucoup mieux le comportement des fonctions de réponse que la méthode de renormalisation. Tout d'abord, puisque le vecteur d'onde de Fermi dépend du champ magnétique et du potentiel chimique, il en est de même du vecteur d'onde de chaque instabilité :

$$Q_{ODC} = \pi(n \pm m) = \frac{G}{2} + \frac{2}{\tilde{v}_\rho} \operatorname{sgn}(\delta\mu) \theta(|\delta\mu - \delta\mu_c|) (\delta\mu^2 - \delta\mu_c^2)^{1/2} \pm \frac{2}{\tilde{v}_\sigma} \operatorname{sgn}(h) \theta(|h - h_c|) (h^2 - h_c^2)^{1/2} \quad (\text{III.90a})$$

θ est la fonction de Heaviside. De même,

$$Q_{ODS} = \pi n = \frac{G}{2} + \frac{2}{\tilde{v}_\rho} \operatorname{sgn}(\delta\mu) \theta(|\delta\mu - \delta\mu_c|) (\delta\mu^2 - \delta\mu_c^2)^{1/2} \quad (\text{III.90b})$$

$$Q_{SS} = \pm \pi m = \pm \frac{2}{\tilde{v}_\sigma} \operatorname{sgn}(h) \theta(|h - h_c|) (h^2 - h_c^2)^{1/2} \quad (\text{III.90c})$$

$$Q_{ST} = 0 \quad (\text{III.90d})$$

La variation de ces vecteurs est présentée figure 24.

Par ailleurs, à cause de la séparation des degrés de charge et de spin, les fonctions de réponse sont le produit d'une contribution de spin et d'une contribution de charge. En effet, d'après les expressions des opérateurs décrivant les différents états ordonnés (eqs. III.5-8) et d'après l'expression bosonisée des opérateurs fermions, il est immédiat de montrer que les fonctions de réponse ont la structure suivante [49] :

$$\begin{aligned} \text{CDW et SDW}_\rho & \quad N(x, t) \propto S_\rho^+(x, t) S_\sigma^+(x, t) \\ \text{SDW}_t & \quad \chi(x, t) \propto S_\rho^+(x, t) S_\sigma^-(x, t) \\ \text{SS et ST } (S_z=0) & \quad \Delta_{SS}(x, t) \propto S_\rho^-(x, t) S_\sigma^+(x, t) \\ \text{ST } (S_z = 1) & \quad \Delta_{ST}(x, t) \propto S_\rho^-(x, t) S_\sigma^-(x, t) \end{aligned} \quad (\text{III.91})$$

avec

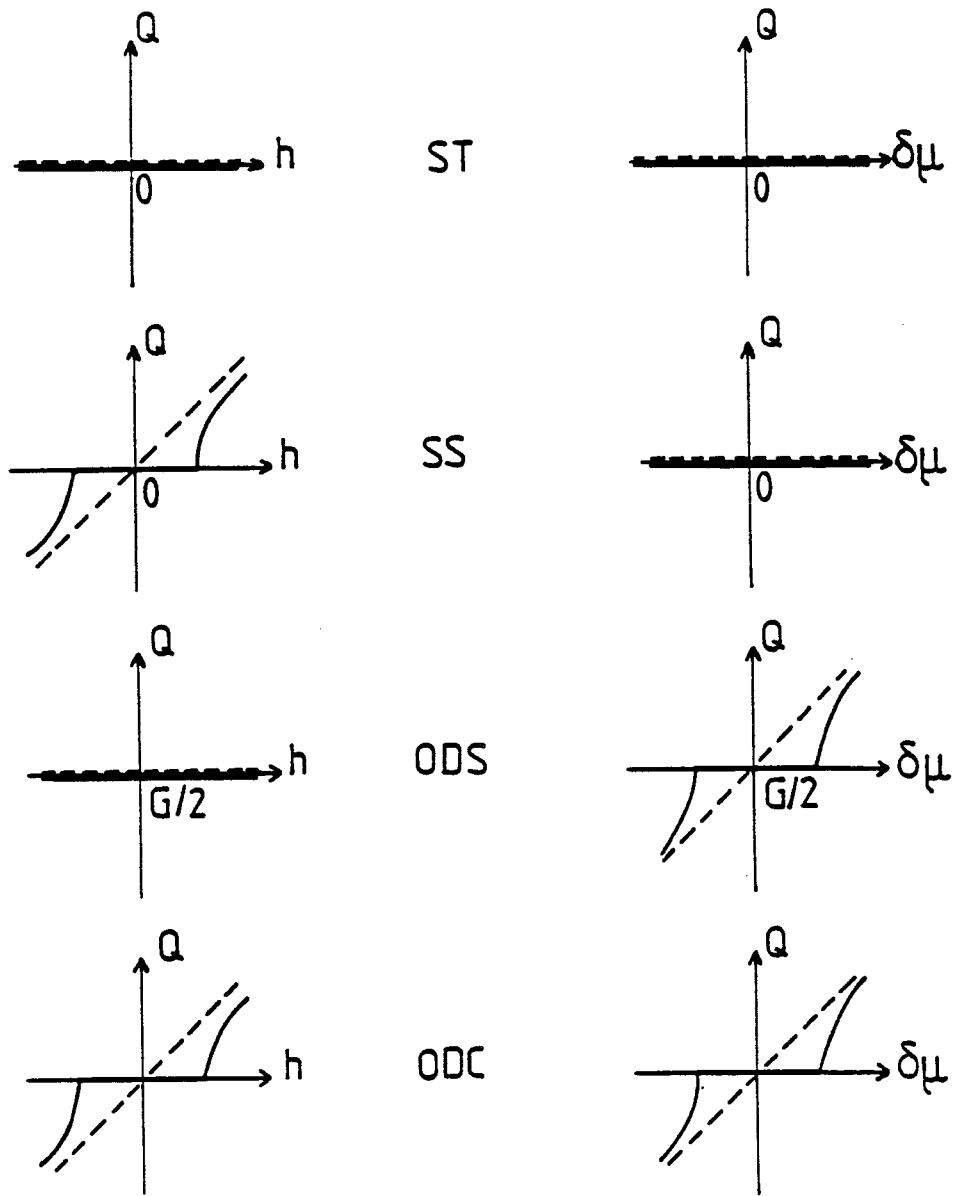


Figure 24

Variation du vecteur d'onde des différentes instabilités avec le champ magnétique et le potentiel chimique. Traits pleins : le gap (de spin ou de charge) est non nul ; traits pointillés : le gap est nul.

$$S_{\nu}^{+}(x, t) \propto \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}\phi^{\nu}(x, t)} e^{-i\sqrt{8\pi}\phi^{\nu}(0,0)} \right\rangle \quad (\text{III.92})$$

et

$$S_{\nu}^{-}(x, t) \propto \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}\theta^{\nu}(x, t)} e^{-i\sqrt{8\pi}\theta^{\nu}(0,0)} \right\rangle$$

pour $\nu = \rho$ ou σ . $\theta^{\nu}(x, t) = \int^{\Pi^{\nu}} dx = \sqrt{\pi} \int (v_1 - v_2) dx$. Ces deux expressions ne sont autre que des fonctions de Green de fermions sans spin.

Nous allons maintenant rappeler le calcul des exposants des fonctions de réponse.

a) La ligne de Tomonaga $g_{1\perp} = 0$ ou $g_3 = 0$

Avec le changement de variable :

$$\phi_{\nu} = \tilde{\phi}_{\nu} \left(\frac{1 + \bar{g}_{\nu}/2}{1 - \bar{g}_{\nu}/2} \right)^{1/2} \quad \text{où } g_{\sigma} = g_{1//}, \quad g_{\rho} = g_{1//} - 2g_2,$$

on se ramène, pour le calcul de S_{ν}^{\pm} , à une fonction de Green de fermions libres qui varie comme $1/x$ et on trouve donc :

$$S_{\nu}^{\pm}(x) \propto \left(\frac{1}{x} \right)^{\gamma_{\nu}^{\pm 1}} \quad (\text{III.93})$$

où $\gamma_{\nu} = \left(\frac{1 + \bar{g}_{\nu}/2}{1 - \bar{g}_{\nu}/2} \right)^{1/2}$. On en déduit ainsi la variation en fréquence des

fonctions de réponse $R(\omega) \propto \omega^{\mu}$

$$\begin{aligned} \text{ODC, ODS}_{\ell} & : \quad \mu = \gamma_{\rho} + \gamma_{\sigma} - 2 \\ \text{ODS}_t & : \quad \mu = \gamma_{\rho} + \gamma_{\sigma}^{-1} - 2 \\ \text{SS, ST } (S_z=0) & : \quad \mu = \gamma_{\rho}^{-1} + \gamma_{\sigma} - 2 \\ \text{ST } (S_z=1) & : \quad \mu = \gamma_{\rho}^{-1} + \gamma_{\sigma}^{-1} - 2 \end{aligned} \quad (\text{III.94})$$

De ces expressions, on retrouve au plus bas ordre en g_i , les résultats obtenus par le groupe de renormalisation.

b) Ligne de Luther-Emery, $\bar{g}_{1//} = -6/5$ ou $\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2 = -6/5$

Dans ce cas, le spectre des excitations présente un gap qui a été calculé. Dans cette région de couplage fort, la phase $\phi_{\nu}(x)$ est bloquée (eq. III.75). On en déduit que

$$\begin{aligned} S_{\nu}^{+}(x) & \sim \text{constante} \\ S_{\nu}^{-}(x) & \sim \exp(-x/\xi) \end{aligned} \quad (\text{III.95})$$

où ξ est la longueur de corrélation liée au gap $\xi_v = v_F/\Delta_v$. Cette variation spatiale peut se décrire par les exposants γ_ρ et γ_σ introduits plus haut :

$$\gamma_\rho = 0 \text{ ou } \gamma_\sigma = 0.$$

c) Cas général

On est alors confronté au même problème que celui exposé au début de ce travail. Les couplages perpendiculaires renormalisent les couplages parallèles. Mais par rapport au résultat simple du groupe de renormalisation, les exposants γ_v contiennent des ordres supérieurs en perturbation. Il faudrait donc savoir directement comment ils sont renormalisés par les couplages perpendiculaires $g_{1\perp}$ et g_3 . Cela est possible grâce à l'équivalence du problème de g-ologie avec celui du gaz de Coulomb classique :

Parenthèse : le gaz de Coulomb 2D classique

En utilisant la bosonisation, Chui et Lee ont montré que l'hamiltonien \mathcal{H}_σ est équivalent à celui du gaz de Coulomb 2D classique [82]. Il en est de même pour \mathcal{H}_ρ . La correspondance est la suivante [53, 82] :

$$y \leftrightarrow \frac{\bar{g}_{1\perp}}{4\pi(1 - \bar{g}_{1\parallel}^2/4)^{1/2}} = \frac{\bar{g}_{1\perp}(1 + \gamma_\sigma^2)}{8\pi\gamma_\sigma} \quad (\text{III.96})$$

$$K \leftrightarrow 4 \left(\frac{1 + \bar{g}_{1\parallel}/2}{1 - \bar{g}_{1\parallel}/2} \right)^{1/2} = 4 \gamma_\sigma$$

où $K = 2\pi J/k_B T$ est la constante de couplage du gaz de Coulomb et y est la fugacité de ce gaz $y = \exp -\mu/k_B T$, μ étant le potentiel chimique des particules chargées. Ce problème, dont l'hamiltonien s'écrit :

$$\overline{\mathcal{H}} = \beta \mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} \ln(r_{ij}/a_0) n_i n_j + \ln y \sum_i n_i^2 \text{ avec } n_i = \pm 1, \quad (\text{III.97})$$

a été étudié en détail [72, 83-85]. Il décrit tous les problèmes bidimensionnels classiques qui possèdent une symétrie continue, comme le modèle XY [72, 83], la transition superfluide-fluide normal [83], la transition rugueuse [86], la fusion à deux dimensions [87]. Tous ces problèmes sont caractérisés, à basse température par un quasi-ordre à longue distance avec une décroissance algébrique des fonctions de corrélation. Au-delà de la température critique (l'équivalent du passage couplage fort-couplage faible pour le gaz d'électrons 1D), la dissociation des charges (ou vortex ou dislocations ou disinclinaisons) détruit ce quasi-ordre et les fonctions de corrélation décroissent exponentiellement avec une longueur de corrélation ξ qui diverge à T_c . (Le problème de la transition

rugueuse est particulier. Par une transformation de dualité, sa phase haute température est équivalente à la phase basse température et inversement ; la longueur de corrélation ξ qui exprime la portée des fluctuations est alors finie dans la phase basse température [86]).

La région de couplage faible $g_{1\parallel} > |g_{1\perp}|$ caractérisée par l'absence de gap est équivalente à la phase isolante du gaz de Coulomb caractérisée par une longueur de corrélation (longueur d'écran) infinie ; la région de couplage fort, caractérisée par un gap fini Δ est équivalente à la phase métallique du gaz de Coulomb décrite par une longueur d'écran finie [87] : $\Delta \propto 1/\xi$.

A l'aide des équations de renormalisation du gaz de Coulomb [72] :

$$\frac{dK^{-1}}{d\ell} = 2\pi^2 y^2 \quad \frac{dy}{d\ell} = \left(2 - \frac{K}{2}\right)y \quad , \quad (\text{III.98})$$

nous avons déduit les équations de renormalisation du gaz de fermions 1D pour l'espace de paramètres $(\gamma_\sigma, \bar{g}_{1\perp})$:

$$\frac{d\gamma_\sigma}{d\ell} = \frac{\bar{g}_{1\perp}^2}{8} (1 + \gamma_\sigma^2)^2 \quad \frac{d\bar{g}_{1\perp}}{d\ell} = 2(\gamma_\sigma - 1)\bar{g}_{1\perp} \quad (\text{III.99})$$

L'intégration de ces équations décrit les trajectoires présentées figure 25.

Fin de parenthèse

=====

L'utilisation des équations de renormalisation III.99 va nous permettre de décrire le comportement des fonctions de réponse, y compris dans la région de couplage fort, et lorsque h ou $\delta\mu$ sont non nuls.

Remarque

Les équations III.99 redonnent, au plus bas ordre en $g_{1\perp}$ et à l'ordre suivant en $g_{1\parallel}$, les équations de renormalisation du plan $(g_{1\parallel}, g_{1\perp})$ trouvées par Solyom à partir du traitement en perturbation du problème de g-ologie.

$$\frac{d\bar{g}_{1\parallel}}{d\ell} = \bar{g}_{1\perp}^2 \left(1 + \frac{\bar{g}_{1\parallel}}{2}\right) \quad \frac{d\bar{g}_{1\perp}}{d\ell} = \bar{g}_{1\parallel} \bar{g}_{1\perp} \left(1 + \frac{\bar{g}_{1\parallel}}{4}\right) + \boxed{\frac{\bar{g}_{1\perp}^3}{4}} \quad (\text{III.100})$$

Pour les couplages parallèles, les équations du gaz de Coulomb contiennent les termes plus élevés en perturbation. Pour les couplages perpendiculaires, Solyom a poussé les calculs à un ordre plus élevé en perturbation. C'est le terme $\bar{g}_{1\perp}^3/4$ encadré dans l'équation III.100. Nous avons exploité l'équivalence entre les deux problèmes pour en déduire un terme supplémentaire dans le développement du gaz de Coulomb qui devient :

$$\frac{dK^{-1}}{d\ell} = 2\pi^2 y^2 \quad \frac{dy}{d\ell} = \left(2 - \frac{K}{2}\right)y - 4\pi^2 y^3 \quad (\text{III.101})$$

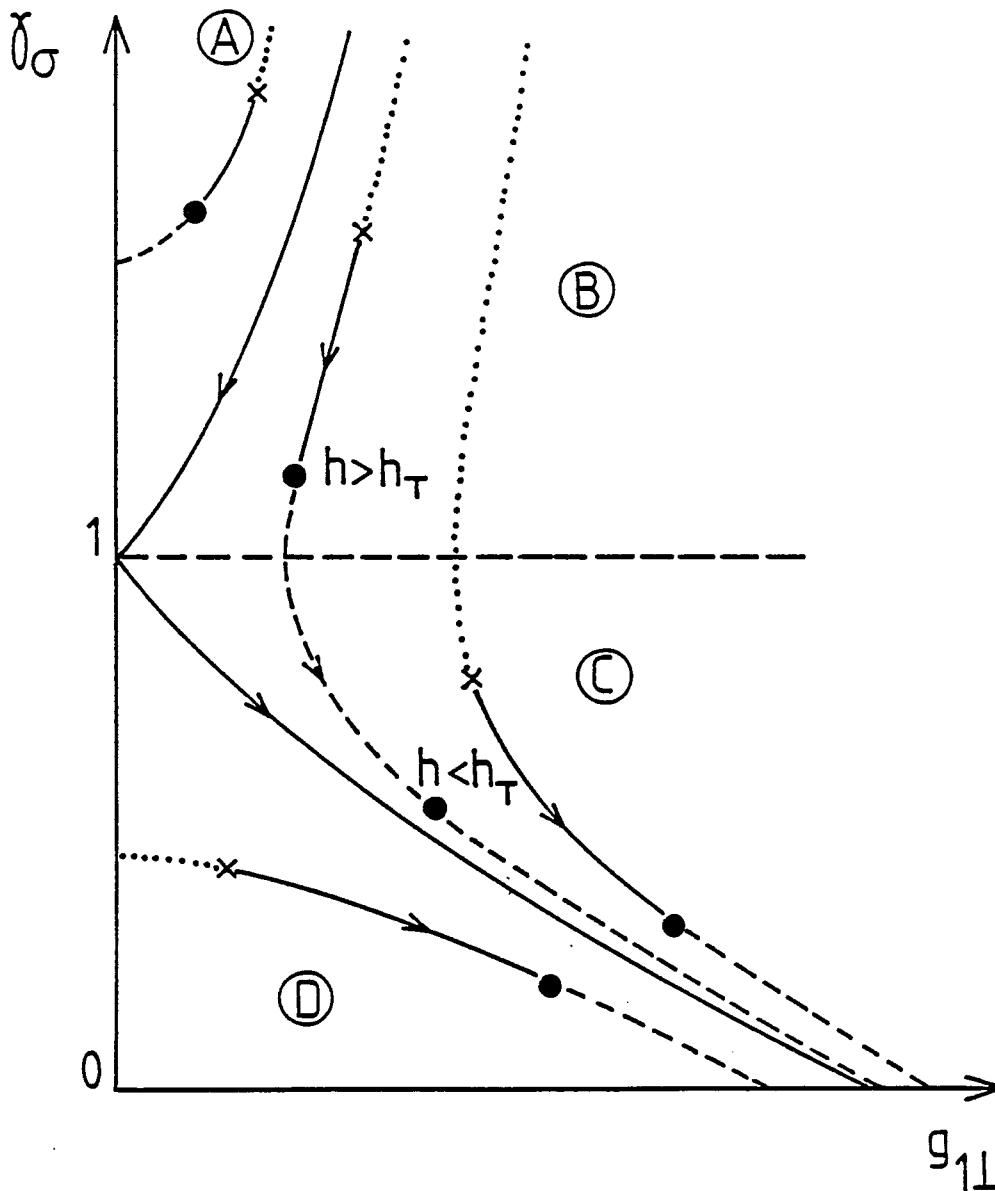


Figure 25 : Trajectoires de renormalisation dans le plan $(\gamma_\sigma, g_{\perp})$ pour différentes valeurs du champ magnétique. On obtient les mêmes trajectoires pour les variables (γ_ρ, g_3) avec un potentiel chimique $\delta\mu$. Quatre régions distinctes sont séparées par la courbe continue et la ligne $\gamma_\sigma = 1$. Le point de départ de la renormalisation est indiqué par une croix et ses coordonnées sont les valeurs des couplages nus. Le processus de renormalisation s'arrête (•) quand l'échelle d'énergie est égale à l'énergie Zeeman h . Les courbes en tirets indiquent l'évolution des trajectoires, en champ nul dans la région A, et tant que h est inférieur à h_c dans les régions B, C, D. Quand le point de départ se trouve dans la région B, il y a un champ critique h_T , au-dessus duquel l'exposant renormalisé γ_σ redevient supérieur à 1. (Les courbes en pointillés indiquent le prolongement des trajectoires).

III - F. DIAGRAMME DE PHASES DU GAZ D'ELECTRONS 1D SOUS CHAMP MAGNETIQUE ET
 EN FONCTION DU POTENTIEL CHIMIQUE.

Nous allons maintenant étudier chaque partie du diagramme de phases, selon que les paramètres de couplage sont dans une région de couplage fort ou de couplage faible.

$$a) g_{1//} \geq |g_{1\perp}|, \quad g_{1//} - 2g_2 \geq |g_3|$$

Discutons d'abord le problème lorsque $h = \delta\mu = 0$. Il n'y a de gap ni dans la partie charge, ni dans la partie spin de l'hamiltonien. Le problème se renormalise vers la solution de Tomonoga. Par conséquent, toutes les fonctions de réponse divergent algébriquement, $R(\omega) = \omega^\mu$:

$$\mu = \begin{cases} \text{ODC} & \gamma_\rho + \gamma_\sigma - 2 \\ \text{ODS} & \gamma_\rho + \gamma_\sigma^{-1} - 2 \\ \text{SS} & \gamma_\rho^{-1} + \gamma_\sigma - 2 \\ \text{ST} & \gamma_\rho^{-1} + \gamma_\sigma^{-1} - 2 \end{cases} \quad (\text{III.102})$$

où γ_ρ et γ_σ sont les valeurs au point fixe des couplages renormalisés. Ils se déduisent des équations de renormalisation III.99. De façon approchée, on peut aussi les déduire des équations de Lie au plus bas ordre pour les couplages $(g_{1//}, g_{1\perp})$ qui sont une bonne approximation dans cette région. Ainsi :

$$\gamma_\sigma = \left(\frac{1 + \bar{g}_{1//}^{**}/2}{1 - \bar{g}_{1//}^{**}/2} \right)^{1/2} \quad \gamma_\rho = \left(\frac{1 + (\bar{g}_{1//}^{**} - 2\bar{g}_2^{**})/2}{1 - (\bar{g}_{1//}^{**} - 2\bar{g}_2^{**})/2} \right)^{1/2} \quad (\text{III.103})$$

$$\text{avec } g_{1//}^{**} = (g_{1//}^2 - g_{1\perp}^2)^{1/2} \quad \text{et } g_{1//}^{**} - 2g_2^{**} = ((g_{1//} - 2g_2)^2 - g_3^2)^{1/2}$$

Puisque $\gamma_\rho > 1$ et $\gamma_\sigma > 1$ ($\gamma_\sigma = 1$ dans le cas $g_{1//} = g_{1\perp}$), la fonction de réponse ODC n'est pas singulière. La divergence la plus forte est celle de la fonction de réponse ST. Les réponses SS et ST peuvent aussi être singulières avec une divergence plus faible. Les domaines où ces différentes fonctions divergent sont présentés sur la figure 26.

Le champ magnétique ne modifie pas γ_ρ . Par contre, le couplage $g_{1//}^{**}(h)$ est supérieur à sa valeur en champ nul (eqs. III.35, III.36). Par conséquent, $\gamma_\sigma(h) > \gamma_\sigma(0)$. Dans le domaine de couplages étudiés ici, le champ

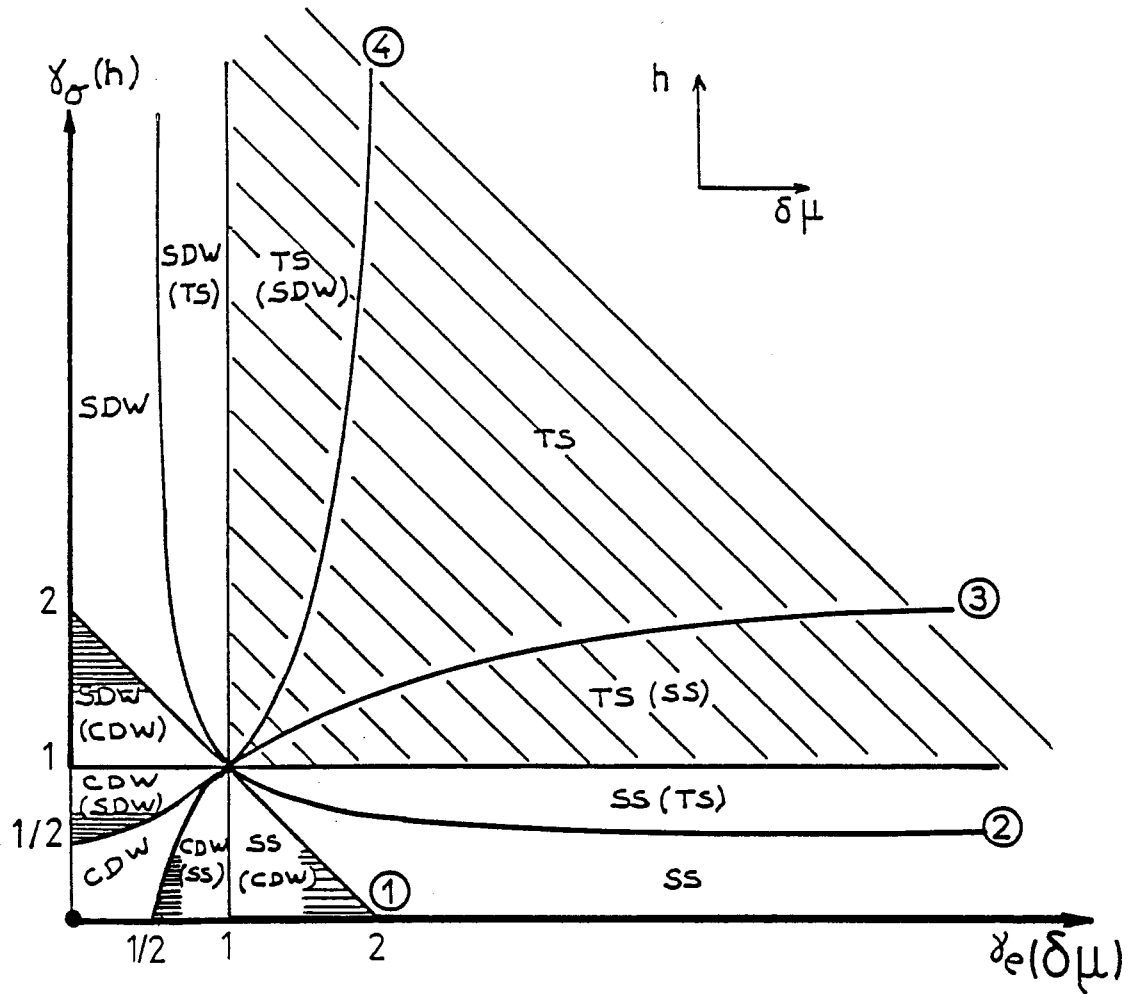


Figure 26

"Diagramme de phases" du gaz de Fermi 1D. Les courbes ①, ②, ③ et ④ sont respectivement définies par $\gamma_\rho + \gamma_\sigma = 2$, $\gamma_\rho^{-1} + \gamma_\sigma^{-1} = 2$, $\gamma_\rho^{-1} + \gamma_\sigma = 2$ et $\gamma_\rho + \gamma_\sigma^{-1} = 2$. Les "champs" h et $\delta\mu$ déplacent le point représentatif du système respectivement vers le haut et vers la droite. La région hachurée, les deux lignes épaisses et le point à l'origine indiquent les régions du diagramme de phases accessibles lorsque $h = \delta\mu = 0$. L'effet du champ et d'une variation $\delta\mu$ du potentiel chimique est de rendre tout ou partie du diagramme de phases accessible.

ne change pas la singularité principale qui est toujours supra-triplet mais la divergence secondaire ODS est favorisée (figure 26).

La discussion des instabilités secondaires est importante, s'il existe un mécanisme qui détruit l'instabilité principale : effet orbital du champ magnétique sur les instabilités supraconductrices dans le cas quasi 1D [56] ; effet des impuretés magnétiques sur la supraconductivité singulet ; effet des impuretés non magnétiques sur la supraconductivité triplet [88]. Nous avons ainsi montré que l'Onde de Densité de Spin pourrait être stabilisée par le champ dans le gaz de Fermi quasi-1D [56].

De façon symétrique, une variation du potentiel chimique (un écart au 1/2 remplissage) laisse la singularité principale (ST) inchangée mais favorise les fluctuations supra singulet, car $\gamma_\rho(\delta\mu) > \gamma_\rho(0)$. Si les deux "champs" h et $\delta\mu$ sont appliqués, leurs effets auront tendance à se compenser (figure 26).

$$b) \quad g_{1\parallel} < |g_{1\perp}|, \quad g_{1\parallel} - 2g_2 \geq |g_3|$$

Nous allons discuter en détail la partie spin de l'hamiltonien, la partie charge étant inchangée par rapport au cas précédent. Nous allons décrire cette région de couplage fort sous champ à l'aide des équations de renormalisation du gaz de Coulomb. Dans cette région, les trajectoires convergent vers la ligne $\gamma_\sigma = 0$ (figure 25) et atteignent cette ligne quand l'échelle d'énergie est égale au gap Δ_σ . Ce gap, égal à $g_{1\perp}/2\pi\alpha$ sur la ligne de Luther-Emery, peut être estimé à l'aide des équations de renormalisation, au moins lorsqu'il est petit c'est-à-dire au voisinage des lignes $g_{1\perp} = 0$ et $g_{1\parallel} = |g_{1\perp}|$. Près de la ligne $g_{1\perp} = 0$, on déduit de l'équation III.99,

$$\frac{\Delta_\sigma}{E_0} \approx g_{1\perp} \frac{1}{2(1-\gamma_\sigma)} \quad , \quad (III.104)$$

résultat obtenu pour la première fois par Luther avec une autre méthode [89]. On retrouve la solution de Luther-Emery $\Delta_\sigma \propto g_{1\perp}$ lorsque $\bar{g}_{1\parallel} = -6/5$ c'est-à-dire $\gamma_\sigma = 1/2$ et la solution classique (masse infinie) de l'équation de Sine-Gordon III.75, quand $\bar{g}_{1\parallel} = -2$ ($\gamma_\sigma = 0$) [90]. Près de la ligne $g_{1\parallel} = |g_{1\perp}|$, le gap a un comportement singulier

$$\Delta_\sigma \approx E_0 \exp \frac{-C}{(|g_{1\perp}| - g_{1\parallel})^{1/2}} \quad \text{avec} \quad C = \frac{\pi}{2\sqrt{g_1}} \quad (III.105)$$

Appliquons maintenant le champ magnétique. Nous avons montré au paragraphe III - C. 1. d. que lorsque l'échelle d'énergie devient inférieure

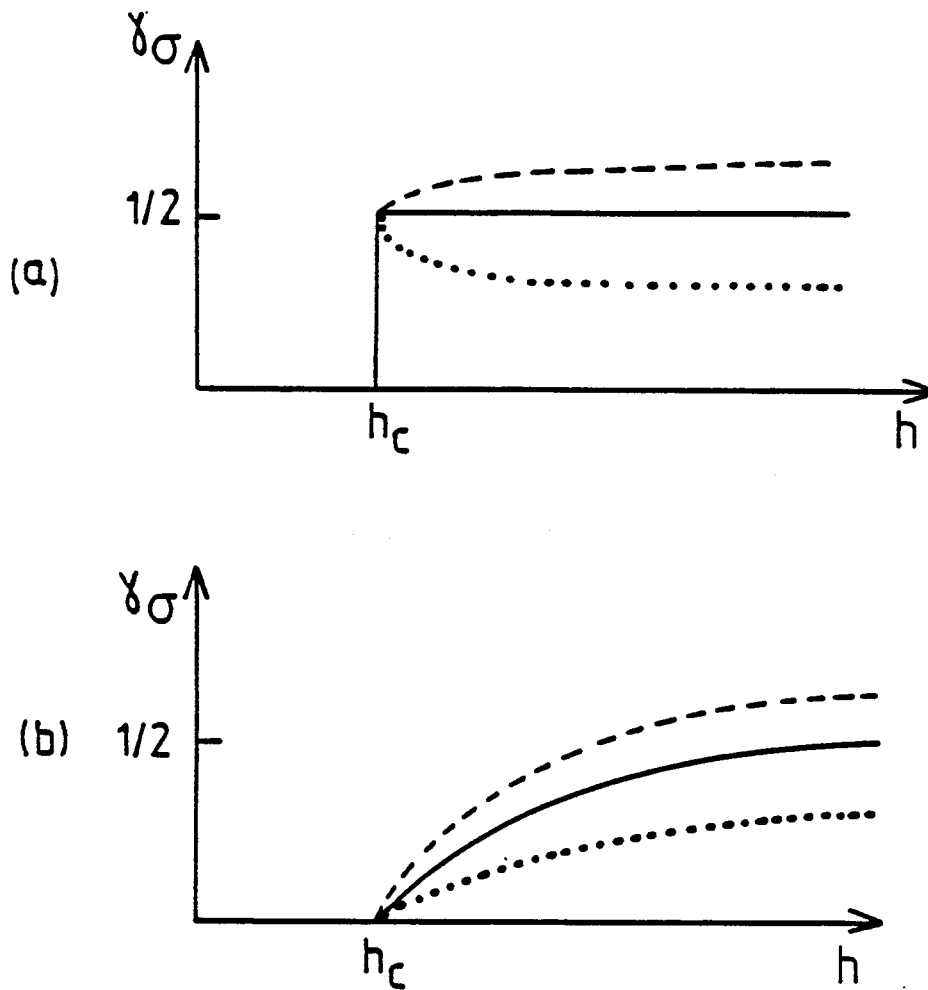


Figure 27

Variation schématique de l'exposant γ_σ en fonction du champ, lorsque le couplage nu $g_{1//}$ est égal (traits pleins), inférieur (tirets) ou supérieur (pointillés) à $-6\pi v_F/5$ (ligne de Luther-Emery),
 a) d'après Japaridze et Nersesyan [57]. Il faut noter un comportement réentrant si $g_{1//} < -6\pi v_F/5$.
 b) tel que l'on peut le déduire du groupe de renormalisation [56, 59]. Le champ critique h_c dépend de $g_{1//}$ et $g_{1\perp}$.

à l'énergie Zeeman ($\frac{\omega}{E_0} \lesssim \frac{4h}{E_0}$), le processus de renormalisation est stoppé. Ainsi la renormalisation de γ_σ par le couplage $g_{1\perp}$ est stoppée à la valeur $\gamma_\sigma(h)$. Par conséquent, tant que l'énergie Zeeman est plus petite que le gap ($h < \Delta_\sigma$), les trajectoires convergent toujours vers la ligne $\gamma_\sigma(h) = 0$. Quand le champ devient supérieur au gap, la renormalisation est stoppée à l'échelle d'énergie h , les processus $g_{1\perp}$ devenant non pertinents. On s'attend donc, à basse fréquence, à un comportement des fonctions de réponse en loi de puissance, avec un exposant $\gamma_\sigma(h)$ dépendant du champ. Lorsque le champ magnétique augmente et tend vers l'infini ($h \sim E_0$), la constante de couplage $g_{1\perp}$ tend vers sa valeur nue, non renormalisée, de sorte que $\gamma_\sigma(h)$ augmente de façon monotone jusqu'à sa valeur maximale :

$$\gamma_\sigma(\infty) = \left(\frac{1 + \bar{g}_{1\parallel}/2}{1 - \bar{g}_{1\parallel}/2} \right)^{1/2} \quad (\text{III.106})$$

Cette description présente des différences avec celle de Japaridze et Nersesyan obtenue à l'aide de la représentation en termes de fermions sans spin [57]. Ces auteurs ont analysé la ligne de Luther-Emery et son voisinage (où les fermions sans spin interagissent) : lorsque le champ est supérieur au gap ($h > h_c$), la relation de dispersion des excitations élémentaires peut être linéarisée autour du niveau de Fermi et un nouveau problème de Tomonaga-Luttinger peut être construit. Ils en déduisent les résultats suivants : Le comportement des fonctions de réponse reste inchangé tant que $h < h_c$, c'est-à-dire que $\gamma_\sigma(h)$ reste nul ; lorsque $h > h_c$, les fonctions $S_\sigma^\pm(x)$ décroissent algébriquement : $\gamma_\sigma(h)$ saute de façon discontinue de 0 à 1/2 et rejoint la valeur $\left(\frac{1 + \bar{g}_{1\parallel}/2}{1 - \bar{g}_{1\parallel}/2} \right)^{1/2}$ en champ infini.

Dans les deux descriptions, γ_σ rejoint sa valeur nue en champ infini, ce qui signifie que les processus $g_{1\perp}$ sont complètement gelés. Par ailleurs, les deux descriptions conduisent à une variation monotone de $\gamma_\sigma(h)$, au-dessus de la ligne de Luther-Emery. Mais dans la description de Japaridze et Nersesyan, en dessous de cette ligne, γ_σ décroît de la valeur 1/2 à la valeur plus faible quand h augmente de h_c à l'infini (figure 27). Il y a donc dans cette dernière description un comportement très différent en dessous et en dessus de la ligne de Luther-Emery. Toutefois, Solyom insiste sur la précaution à prendre quant aux résultats quantitatifs obtenus par la bosonisation à cause des problèmes de coupure liés à cette méthode [49]. Par ailleurs, on ne s'attend pas non plus à ce que la méthode de renormalisation décrive précisément la région en dessous de la ligne de Luther-Emery où des états liés apparaissent dans le gap.

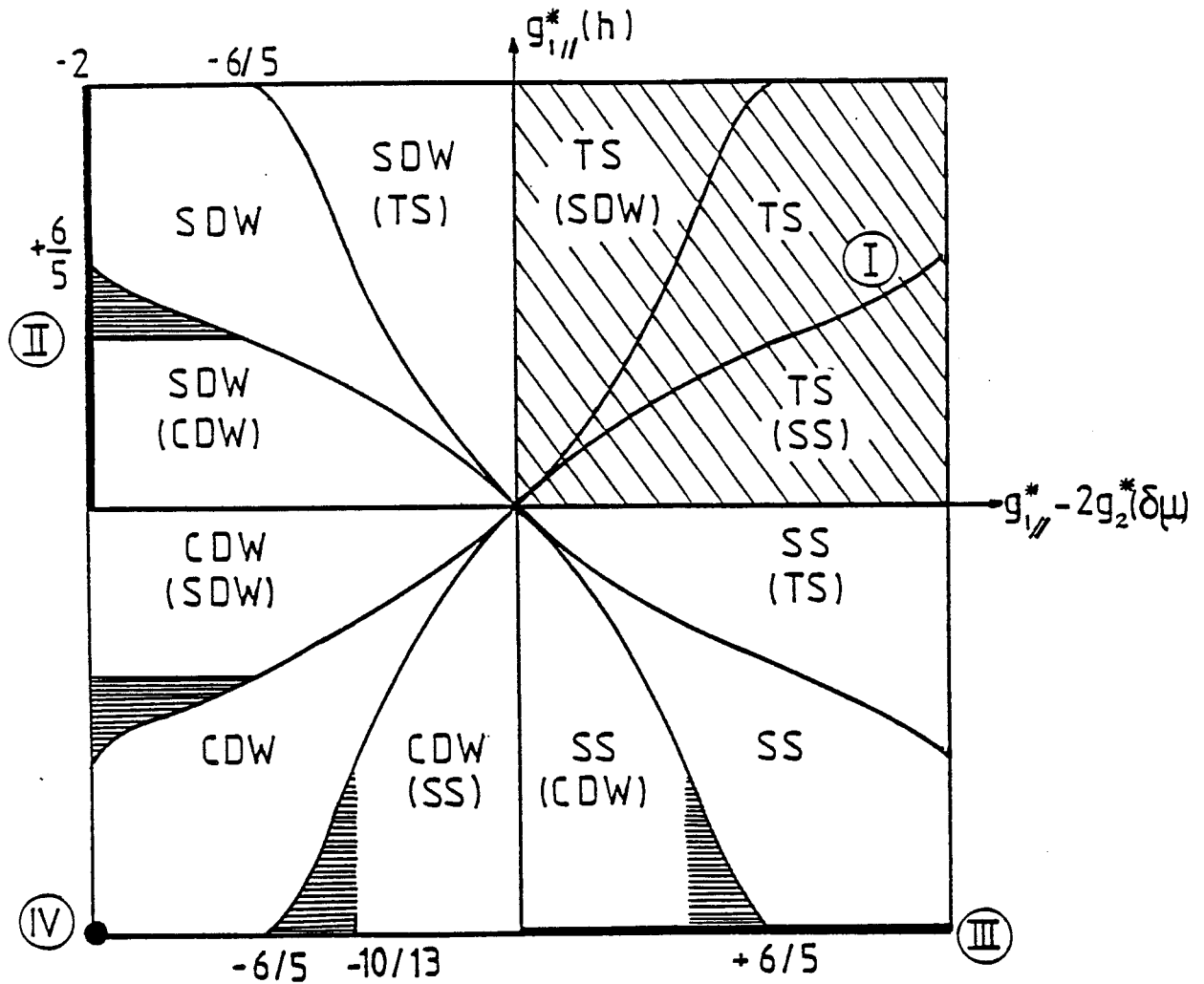


Figure 28

"Diagramme de phases" du gaz de Fermi 1D, en fonction des couplages au point fixe $g_{1//}^*$ et $g_{1//}^* - 2g_2^*$. Ce diagramme se déduit de la figure 26. Si $h = \delta\mu = 0$, seules les régions I (hachurée), II, III (traits pleins) et IV (points) sont accessibles. Le champ magnétique déplace le point représentatif vers le haut et $\delta\mu$ le déplace vers la droite. Dans les régions hachurées horizontalement, un comportement réentrant peut apparaître en fonction de h et $\delta\mu$, selon Japaridze et Nersesyan [57].

Quoi qu'il en soit, si on cherche seulement à décrire l'évolution du diagramme de phases, les deux descriptions donnent au moins qualitativement les mêmes indications, à part une petite différence sous la ligne de Luther-Emery.

Nous savons que, la plupart du temps, il y a deux fonctions de réponse divergentes. Si on s'intéresse uniquement à l'instabilité la plus forte (la réponse la plus divergente), il n'est pas nécessaire d'avoir une connaissance détaillée de la région de couplage fort. Les lignes qui séparent les régions du diagramme de phases caractérisées par des instabilités principales différentes sont définies par $\gamma_\sigma = 1$ et $\gamma_\rho = 1$. Par conséquent, un cas particulièrement intéressant intervient lorsque $\gamma_\sigma(h=0) = 0$ et $\gamma_\sigma(h=\infty) > 1$ c'est-à-dire lorsque $0 < g_{1//} < |g_{1\perp}|$ (région B de la figure 26). Dans ce cas, il existe un second champ critique h_T défini par $\gamma_\sigma(h_T) = 1$ et déjà évoqué au paragraphe III - C. 1. d. En appliquant un champ supérieur à h_T , un état fondamental SS (resp. ODC) devient ST (resp. ODS). Ce champ a été estimé dans l'équation III.37. juste en dessous de la ligne $g_{1//} = |g_{1\perp}|$. Il vérifie $h_T = \sqrt{h_c E_0}$.

La succession des instabilités secondaires avec le champ dépend de la valeur de la constante de couplage nue $g_{1//}$, en particulier de sa position par rapport à la ligne de Luther-Emery. Il y a en général plusieurs champs critiques h_i pour lesquels l'instabilité secondaire change de nature. Ces champs sont tels que $\gamma_\sigma^{\pm 1}(h_i) + \gamma_\rho^{\pm 1} = 2$.

Nous explorons maintenant différentes régions du diagramme de phases :

=====
 $| \bar{g}_{1\perp} | > \bar{g}_{1//} > -6/5$: γ_σ augmente avec le champ de sorte que plusieurs types d'instabilités peuvent se succéder. Lorsque $1 < \gamma_\rho < 2$ ($0 < \bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2 < 6/5$), la succession des instabilités possibles est SS (ODC) \rightarrow SS \rightarrow SS(ST) \rightarrow ST(SS) \rightarrow ST \rightarrow ST(ODS), les instabilités indiquées entre parenthèses étant les moins divergentes (figures 26, 28). Par ailleurs, si γ_σ saute à la valeur 1/2 dès que le champ est égal au gap $h = h_c$ (Japaridze et Nersesyan [57]) alors, quand $3/2 < \gamma_\rho < 2$, l'instabilité secondaire (ODC) disparaît dès que $h = h_c$. Lorsque $\gamma_\rho > 2$, seulement quatre comportements différents peuvent se succéder : SS \rightarrow SS(ST) \rightarrow ST(SS) \rightarrow ST. Le nombre de "phases" accessibles dépend de la valeur non renormalisée de γ_σ (figure 26).

$$\bar{g}_{1//} < -6/5 . \text{ Lorsque } 1 < \gamma_\rho < 3/2 \text{ (} 0 < \bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2 < 10/13 \text{)}$$

l'instabilité reste SS (ODC) quel que soit le champ magnétique. Si $\gamma_\rho > 2$ ($\bar{g}_{1//} - 2\bar{g}_2 > 6/5$), elle reste SS quel que soit le champ. Mais, d'après le résultat de Japaridze et Nersesyan, un cas curieux se produit lorsque $3/2 < \gamma_\rho < 2$ et $\gamma_\sigma (h = \infty) < 2 - \gamma_\rho$, c'est-à-dire la partie hachurée horizontalement des figures 26 et 28 : tant que $h < h_c$, l'instabilité est SS (ODC). Elle devient SS quand $h > h_c$ et l'instabilité secondaire (ODC) réapparaît au-dessus d'un champ tel que $\gamma_\sigma(h) = 2 - \gamma_\rho$.

L'effet du potentiel chimique sur la partie charge a été décrit dans le paragraphe précédent. γ_ρ augmente avec $\delta\mu$. En particulier les différents comportements en fonction du champ magnétique que nous venons de décrire suivant les valeurs de γ_ρ peuvent être obtenus en faisant varier le potentiel chimique. L'écart à la commensurabilité tend à supprimer les instabilités secondaires ODC et ODS en favorisant les fluctuations supraconductrices uniquement.

$$\text{c) } g_{1//} \geq |g_{1\perp}|, g_{1//} - 2g_2 < |g_3|$$

Le comportement du système dans ce cas se déduit immédiatement de la discussion du cas précédent avec la table d'équivalences I. En particulier, si $0 < g_{1//} - 2g_2 < |g_3|$, il y a une valeur critique $\delta\mu_T$, supérieure au gap des excitations de charge, au-dessus de laquelle les instabilités supraconductrices sont favorisées aux dépens des instabilités Onde de Densité.

$$\text{d) } g_{1//} < |g_{1\perp}|, g_{1//} - 2g_2 < |g_3|$$

Lorsque $h = \delta\mu = 0$, les parties spin et charge de l'hamiltonien sont toutes deux caractérisées par un gap fini. Le point représentatif du système a donc les coordonnées $\gamma_\sigma = \gamma_\rho = 0$. La fonction de réponse ODC est la seule divergente. Il est remarquable qu'à partir de ce point, si les couplages nus ont des valeurs appropriées ($0 < g_{1//} < |g_{1\perp}|$ et $0 < g_{1//} - 2g_2 < |g_3|$), toutes les "phases" du gaz de Fermi 1D peuvent être atteintes avec un champ magnétique ou une variation de potentiel chimique. La supraconductivité est favorisée par un écart à la commensurabilité et l'Onde de Densité de Spin ainsi que la supraconductivité triplet sont favorisées par le champ magnétique.

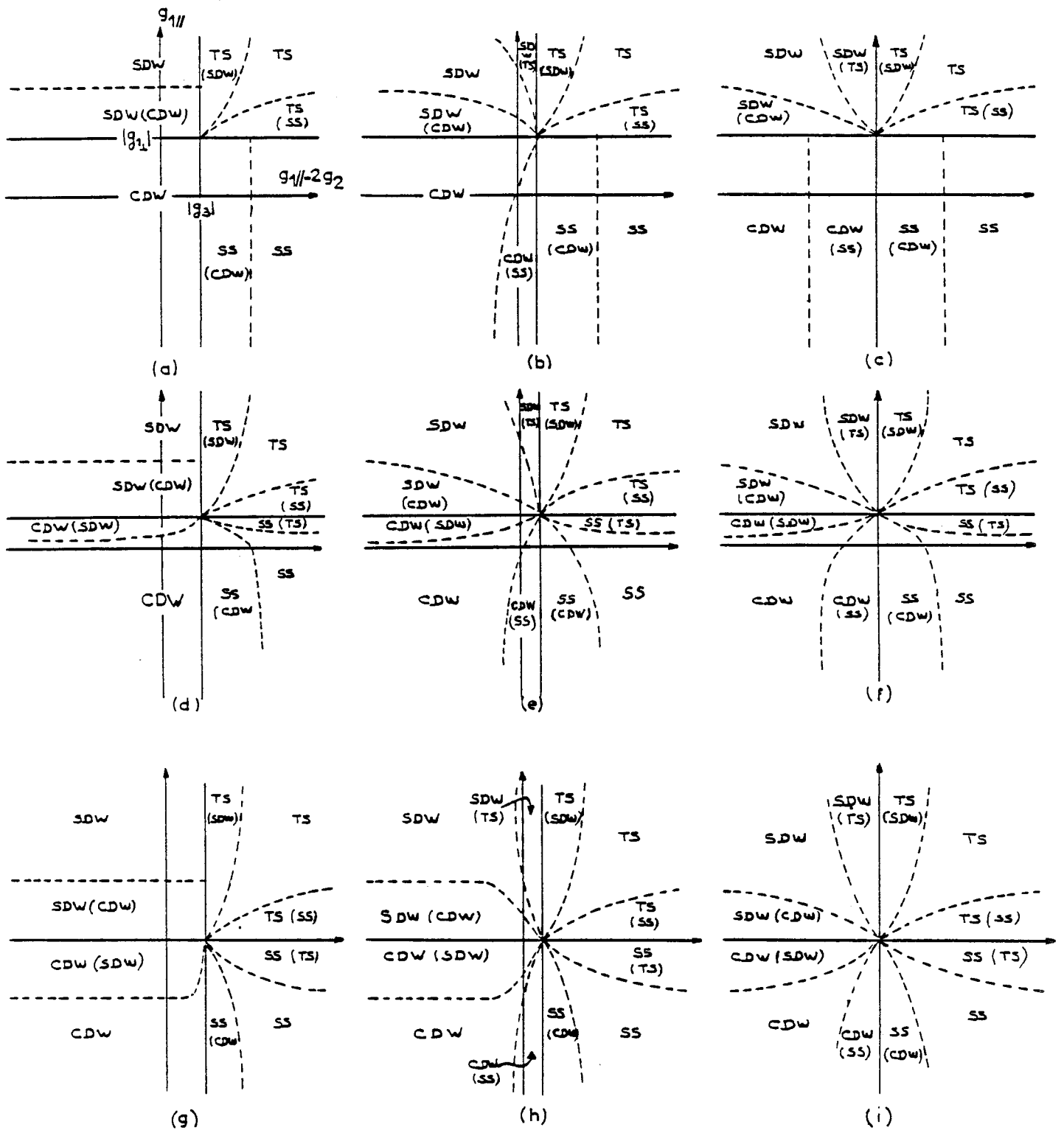


Figure 29 : "Diagrammes de phases" du gaz de Fermi 1D, en fonction des couplages nus, pour différentes valeurs de h et de $\delta\mu$. a) $h = 0, \delta\mu = 0$ [91]. b) $h = 0, \delta\mu > \delta\mu_c$. c) $h = 0, \delta\mu = \infty$ (cas très incommensurable, analogue au cas $g_3 = 0$ [49]). d) $h > h_c, \delta\mu = 0$. e) $h > h_c, \delta\mu > \delta\mu_c$. f) $h > h_c, \delta\mu = \infty$. g) $h = \infty, \delta\mu = 0$. h) $h = \infty, \delta\mu > \delta\mu_c$. i) $h = \infty, \delta\mu = \infty$.

III - G. CONCLUSION

L'espace des paramètres montrant les différentes instabilités possibles du gaz d'électrons dans une bande 1/2 remplie est représenté sur les figures 26 et 28. La surface hachurée obliquement, les lignes épaisses et le point à l'origine représentent l'espace des paramètres accessible en "champs" nuls. L'effet du champ magnétique et d'une variation de potentiel chimique est de translater le point représentatif du système respectivement vers le haut et vers la droite du diagramme de phases (sauf si les couplages nus sont dans les régions hachurées horizontalement où peut se produire un comportement réentrant). Dans la région de couplage faible cette translation est continue dès que h ou $\delta\mu$ sont non nuls. Par contre, il faut un "champ" plus grand que le gap pour quitter les lignes ($\gamma_\sigma = 0, \gamma_\rho > 1$) ou ($\gamma_\sigma > 1, \gamma_\rho = 0$) ou le point ($\gamma_\sigma = \gamma_\rho = 0$). Les instabilités principales sont séparées par les lignes $\gamma_\sigma = 1$ ou $\gamma_\rho = 1$. Un "champ" diminue la renormalisation des couplages qui atteignent leur valeur nue en "champ" infini. Ainsi selon la valeur des couplages nus, plusieurs phases peuvent être rencontrées lorsque ces champs sont appliqués. Quelques-unes étaient inaccessibles en "champs" nuls : ODS(ST), ODC(ODS), ODC(SS) et SS(ST) (figure 26, 28).

Les figures 29 montrent les différents diagrammes de phase en fonction des couplages nus pour différentes valeurs de h et $\delta\mu$. Ces diagrammes sont déduits des figures 26, 28. (Nous n'avons pas détaillé la région de couplage fort avec le comportement réentrant décrit au paragraphe III - F. b). Ces diagrammes généralisent le diagramme de phases obtenu par Prigodin et Firsov dans le cas $G = 4k_F$ et $h = 0$ [91]. Remarquons par ailleurs que le gaz de Fermi avec une bande non demi-remplie n'est pas identique au cas $g_3 = 0$. D'abord si $g_{1//} - 2g_2 < |g_3|$ et tant que $\delta\mu$ est inférieur à une valeur critique $\delta\mu_c = \Delta_\rho$, le comportement du gaz reste celui du cas commensurable. Et même dans les cas où g_3 est non pertinent, il conduit toujours à une renormalisation de γ_ρ .

Remarquons par ailleurs que le vecteur d'onde des instabilités principales est toujours bloqué en "champ" faible. En effet, dans la région (a), l'instabilité ST diverge au vecteur d'onde $Q = 0$ quels que soient h et $\delta\mu$. Dans la région (b), où l'instabilité SS est dominante, le vecteur d'onde Q_{SS}

ne dépend que du champ magnétique et reste bloqué tant que $h < h_c$. Dans la région (c) ce sont les fluctuations ODS qui dominent. Le vecteur d'onde Q_{ODS} ne dépend que du potentiel chimique et reste bloqué tant que $\delta\mu < \delta\mu_c$. Enfin, dans la région (d) de couplage fort, le vecteur d'onde Q_{ODC} de l'Onde de Densité de Charge ne varie avec le champ magnétique et le potentiel chimique qu'au dessus des valeurs h_c et $\delta\mu_c$.

Température finie.

Jusqu'à maintenant, nous ne nous sommes intéressés qu'aux propriétés de l'état fondamental du gaz d'électrons c'est-à-dire aux fonctions de réponse décrivant les différentes instabilités à fréquence nulle $\omega \rightarrow 0$. De cette analyse on peut en déduire les propriétés à température finie, puisque les diagrammes varient maintenant comme $\ln \max(\omega, T, \delta\mu)$ ou $\ln \max(\omega, T, h)$. Ainsi à température finie, le processus de renormalisation s'arrête quand l'échelle d'énergie est de l'ordre de $\max(T, h)$ ou $\max(T, \delta\mu)$. Par conséquent, les effets de champ magnétique ou de remplissage de bande que nous avons décrits dans ce travail ne peuvent être observés que si $\mu_B H > T$ et $\delta\mu > T$.

III - H. LE GAZ D'ELECTRONS QUASI-UNIDIMENSIONNEL

Ce que nous avons décrit jusqu'à présent n'est pas réellement un diagramme de phases. Nous avons simplement déterminé les régions de l'espace des couplages dans lesquelles les fluctuations de tel ou tel paramètre d'ordre (SS, ST, ODC, ODS) sont dominantes. A cause des fluctuations quantiques et thermiques, il ne peut pas s'établir d'ordre à longue distance dans le gaz de Fermi strictement 1D.

Le problème se pose maintenant de la généralisation de ces effets à des modèles plus proches de la réalité expérimentale, qui décrivent le gaz d'électrons quasi-unidimensionnel et pour lesquels l'aspect strictement 1D décrit par le modèle de g-ologie reste un cadre qualitatif. A cause d'un couplage cinétique entre chaînes tel que

$$\epsilon(\vec{k}) = v(|k_x| - k_F) - 2t_{\perp} (\cos k_y b + \cos k_z c), \quad (\text{III.107})$$

les températures d'ordre sont ramenées à des valeurs finies et c'est le couplage tridimensionnel qui stabilise les phases correspondant aux fonctions de réponse les plus divergentes.

Plus précisément, avec un couplage interchaînes t_{\perp} , il existe une température T_x de cross-over 1D-3D au-dessus de laquelle le cristal peut être considéré comme une collection de chaînes 1D indépendantes décrites correctement par le modèle que nous avons discuté. En dessous de T_x , les contributions Cooper et zéro-son sont découplées, ce qui a pour conséquence de bloquer le processus de renormalisation 1D à l'échelle d'énergie T_x . Ceci conduit à des températures d'ordre finies et restaure l'ordre à longue distance à basse température.

Prigodin et Firsov [59] puis Emery, Bruinsma et Barišić [60] ont ainsi décrit le gaz d'électrons quasi-1D (au dessous de T_x) par des équations RPA avec des constantes de couplage g_i renormalisées par les fluctuations 1D. En l'absence de champ, les températures d'ordre sont donc de la forme

$$T_c = T_x \exp - 1/g^{**} \quad (\text{III.108})$$

$$\text{où } g^{**} = g^{**} \left(\frac{T_x}{E_0} \right)$$

Quand un "champ" est appliqué, par exemple le champ magnétique, le processus de renormalisation s'arrête à la plus grande des deux échelles d'énergie T_x et $\mu_B H$. Ainsi, on trouve, par exemple, lorsque $g_3 = 0$ et $g_{1\parallel} = g_{1\perp} > 0$ (Appendice C, réf. 56)

$$T_{ODS}(H) = T_x \exp - 1/g''(H) \quad (III.109)$$

avec

$$g''(H) = 2\bar{g}_2 - \bar{g}_1 + \frac{\bar{g}_1}{1 - \bar{g}_1 \ln \max \left(\frac{T_x}{E_0}, \frac{\mu H}{E_0} \right)} \quad (III.110)$$

Ce couplage effectif $g''(H)$ augmente avec le champ. Il en est donc de même de la température d'ordre. Et si l'Onde de Densité de Spin n'est pas stable en champ nul, elle peut être stabilisée par un champ H_0 , tel que $g''(H)$ change de signe. Au voisinage du champ seuil, nous trouvons [56]

$$T_{ODS}(H) = T_x \exp \frac{B}{H_0 - H} \quad B > 0 \quad (III.111)$$

Mais le champ seuil ne peut être inférieur à T_x . Par ailleurs, cette phase ODS ne peut être stabilisée que si elle était presque stable en champ nul, c'est-à-dire que le point représentatif des couplages est très proche de la ligne $\gamma_p = 1$. Enfin, cet effet de spin est évidemment indépendant de l'orientation du champ par rapport au cristal.

Remarques

- Nous rappelons en appendice C , l'effet du découplage des canaux sur les équations de renormalisation 1D en corrigeant quelques erreurs mineures trouvées dans la référence [60].

- Nous n'avons décrit le gaz d'électrons quasi 1D que par un couplage cinétique entre chaînes. L'interaction coulombienne (diffusion vers l'arrière et vers l'avant) entre des électrons situés sur des chaînes voisines n'a pas été prise en compte [voir revue dans ref. 49].

De tels effets peuvent-ils être observés dans les sels de Bechgaard ? Pour que des effets de spin soient observables, l'énergie Zeeman doit être plus grande que T_X . T_X dépend du couplage t_{\perp} entre chaînes : $T_X \approx t_{\perp}/\pi$ dans l'approximation champ moyen du gaz d'électrons quasi 1D [19]. Dans les composés $(\text{TMTSF})_2X$, t_{\perp} est de l'ordre de 100 à 300 K, ce qui rendrait inobservable tout effet de spin. Mais Bourbonnais [16] a montré qu'à cause des corrélations électroniques, la température de cross-over pouvait être fortement réduite:

$$T_X \approx \frac{t_{\perp}}{\pi} \left(\frac{t_{\perp}}{E_0} \right)^{\gamma} \quad (\text{III.112})$$

où γ est un exposant de l'ordre de l'unité. Bourbonnais estime que $T_X \approx 6$ à 8 K. Des effets de spin pourraient alors être observables pour des champs de l'ordre de 10 T, ce qui ne semble pas être le cas sur le diagramme de phases des sels de Bechgaard. Cela signifie ou bien que T_X est supérieur à 10 K, ou bien que les valeurs des constantes de couplage sont telles que les effets de spin restent faibles. Par ailleurs, nous montrons au chapitre suivant que, dès que le nesting des deux nappes de la surface de Fermi est imparfait, les effets orbitaux deviennent essentiels.

L'effet du potentiel chimique semble plus simple à observer. Il n'y a pas dans ce cas l'équivalent d'effets orbitaux pour compliquer le problème. Une variation relative $\frac{\delta\mu}{E_0} \propto \frac{\delta k_F}{k_F}$ supérieure à $\frac{T_X}{E_0}$ est nécessaire pour observer l'effet du remplissage de bande. Or, typiquement $t_{\perp} \approx \frac{t_{\parallel}}{10}$, de sorte que $\frac{\delta k_F}{k_F}$ doit être supérieur à 1%. (dans le cas le plus défavorable où $T_X \approx t_{\perp}/\pi$). C'est une variation tout à fait accessible expérimentalement. Rappelons par exemple que, sous pression, une variation relative du vecteur d'onde de l'ordre de 10 % est observée dans le composé organique quasi-1D TTF-TCNQ, à cause de la variation du transfert de charge [92]. Mais dans les sels de Bechgaard, le transfert reste complet, probablement à cause de la forte énergie de Madelung due à une faible distance anion-cation [93].

Il semble donc que les effets du champ magnétique ou du remplissage de bande sur les fluctuations 1D n'aient pas encore été observés dans les composés étudiés jusqu'à maintenant. Les conditions nécessaires sont : une faible valeur de la température de cross-over T_X ainsi que de la température T où se déroulent les expériences ; une variation du transfert de charge avec la pression ou la température ; enfin des valeurs appropriées des constantes de couplage de sorte

que les différentes phases possibles soient très voisines en énergie. Notre étude donne alors un cadre très général pour comprendre l'évolution du diagramme de phases en fonction du champ magnétique et du remplissage de bande.

CHAPITRE IV

EFFETS ORBITAUX DU CHAMP MAGNETIQUE SUR LE GAZ D'ELECTRONS

QUASI-UNIDIMENSIONNEL

IV - A. INTRODUCTION

Dans la première partie de cette thèse, nous avons discuté les effets du champ magnétique liés au couplage Zeeman, les seuls apparaissant à une dimension. Mais dès qu'un couplage entre chaînes est introduit, deux aspects nouveaux apparaissent.

- D'une part, les deux nappes de la surface de Fermi ne sont plus planes. Les détails de la géométrie de la surface de Fermi deviennent essentiels à basse température, pour décrire la susceptibilité et donc l'instabilité éventuelle du gaz d'électrons vis-à-vis de la formation d'une Onde de Densité de Charge ou de Spin.

- D'autre part, le couplage du champ magnétique au moment orbital de l'électron est aussi essentiel. Nous allons démontrer que, à cause de cet effet, la susceptibilité présente une structure entièrement différente de ce qu'elle est en champ nul. Cette modification de structure est analogue dans son principe à la discrétisation du spectre des électrons libres sous champ magnétique. L'instabilité de la phase métallique dépend donc à la fois des détails de la surface de Fermi (propriétés de nesting) et de la quantification des orbitales électroniques sous champ.

Nous supposons maintenant que les fluctuations 1D sont négligeables, c'est-à-dire que la température du système est inférieure à la température T_x de cross-over 1D-3D. Le gaz d'électrons en interaction est donc décrit en champ moyen et la susceptibilité s'écrit

$$\chi = \frac{\chi_0}{1 - I \chi_0} \quad (\text{IV.1})$$

avec un paramètre d'interaction I , qui éventuellement est renormalisé par des fluctuations 1D jusqu'à la température T_x : $I = g^2 \left(\frac{T_x}{E_0} \right)$. Par ailleurs, nous négligerons le couplage Zeeman. Dans cette partie, l'aspect quasi 1D du gaz d'électrons est pris en compte uniquement par l'anisotropie de la surface de Fermi et plus particulièrement par l'existence d'une surface de Fermi ouverte dont les nappes sont presque planes.

Plan de cette partie

Avant d'aborder les effets du champ magnétique, nous allons introduire une relation de dispersion modèle dont les caractéristiques essentielles sont censées refléter la physique des conducteurs quasi 1D en particulier des sels de Bechgaard (IV - B.). Puis nous étudions en détail la susceptibilité du gaz d'électrons décrit par cette relation de dispersion, en l'absence de champ magnétique (IV - C.). L'intérêt de cette étude est de comprendre par la suite comment la nouvelle structure de la susceptibilité sous champ se développe à partir du comportement en champ nul. Dans le paragraphe IV - D., nous présentons une étude complète de la susceptibilité sous champ, en développant l'idée nouvelle du nesting quantifié : pour des valeurs quantifiées du vecteur d'onde, la susceptibilité retrouve une divergence logarithmique. La conséquence de ce comportement nouveau est l'existence à basse température d'une cascade de transitions induites par le champ ainsi qu'un comportement inhabituel de l'effet Hall (IV - E).

IV - B. CHOIX D'UNE RELATION DE DISPERSION

Avant d'aborder les effets du champ magnétique, nous décrivons le gaz d'électrons avec une surface de Fermi ouverte, en champ nul. Nous considérons pour cela le modèle le plus simple d'une symétrie orthorombique et d'une relation de dispersion "liaisons fortes" entre premiers voisins. L'énergie électronique s'écrit :

$$E(\vec{k}) = - 2t_a \cos k_x a - 2t_b \cos k_y b - 2t_c \cos k_z c. \quad (\text{IV.2})$$

L'existence d'une surface de Fermi ouverte ou fermée dépend d'une part du remplissage et d'autre part des anisotropies t_a/t_b et t_a/t_c . On s'intéresse à des situations où le remplissage est important et les anisotropies importantes, ce qui conduit à une surface ouverte. Pour référence, nous garderons en mémoire les ordres de grandeur mesurés dans les sels de Bechgaard ; et bien que la théorie que nous allons exposer ne soit pas spécifique de ces composés, nous utiliserons les valeurs des paramètres suivants pour des applications numériques éventuelles [10].

$$\begin{array}{ll} t_a \approx 3000 \text{ K} & a = 3.65 \text{ \AA} \\ t_b \approx t_a/10 & b = 7.7 \text{ \AA} \\ t_c \approx t_b/30 & c = 13.5 \text{ \AA} \end{array}$$

La relation IV.2 est très simple. En linéarisant le premier terme autour du vecteur d'onde de Fermi k_F , on obtient une relation encore plus simple, mieux adaptée aux calculs de susceptibilité que nous développerons. Cette linéarisation est légitime tant que $k_B T$, t_b et t_c sont petits devant t_a . Elle doit être compensée par une modification de la dispersion selon \vec{b} et \vec{c} pour ne pas changer la géométrie de la surface de Fermi. Développons pour cela $E(\vec{k})$:

$$E(\vec{k}) = E_0 + v_F(|k_x| - k_F) + C(|k_x| - k_F)^2 + \dots - 2t_b \cos k_y b - 2t_c \cos k_z c \quad (\text{IV.3})$$

avec $E_0 = - 2t_a \cos k_F a$, $v_F = 2at_a \sin k_F a$, $C = a^2 t_a \cos k_F a$. La surface de Fermi est constituée de deux nappes d'équations :

$$|k_x| \approx k_F + \frac{2t_b}{v_F} \cos k_y b + \frac{2t_c}{v_F} \cos k_z c - \frac{C}{v_F^3} (2t_b \cos k_y b + 2t_c \cos k_z c)^2 \quad (\text{IV.4})$$

Il est facile de voir que la relation de dispersion approchée :

$$E(\vec{K}) = E'_0 + v_F (|k_x| - k_F) - 2t_b \cos k_y b - 2t_c \cos k_z c - 2t'_b \cos 2k_y b - 2t'_c \cos 2k_z c \quad (\text{IV.5})$$

conduit à la même surface de Fermi que la relation de dispersion initiale si :

$$\begin{aligned} t'_b &= - \frac{Ct_b^2}{v_F^2} = - \frac{\cos k_F a}{4 \sin^2 k_F a} \frac{t_b^2}{t_a} \\ t'_c &= - \frac{Ct_c^2}{v_F^2} = - \frac{\cos k_F a}{4 \sin^2 k_F a} \frac{t_c^2}{t_a} \end{aligned} \quad (\text{IV.6})$$

Dans les sels de Bechgaard, la bande est au 3/4 remplie : $k_F = \frac{3\pi}{4a}$. Donc typiquement :

$$t'_b = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{t_b^2}{t_a} \approx 10 \text{ K}$$

$$t'_c = \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{t_c^2}{t_a} \approx 0.01 \text{ K}$$

L'approximation qui consiste à utiliser la nouvelle relation de dispersion IV.5 est licite tant que $t'_b \ll t_b$ et $t'_c \ll t_c$, ce qui est le cas lorsque $t_c \ll t_b \ll t_a$.

Parenthèse sur les sels de Bechgaard

Nous utilisons une relation de dispersion très simple, a priori, par rapport à la situation physique rencontrée dans les sels de Bechgaard. Ceux-ci ont une structure électronique complexe, avec 52 atomes par maille si on ne considère que les cations. 76 bandes électroniques devraient être considérées [94, 95]. La symétrie du cristal est triclinique. Moyennant de nombreuses approximations que nous ne discutons pas ici, Grant montre que le nombre de bandes peut être réduit à deux avec une relation de dispersion qui s'écrit :

$$E(\vec{k}) = 2 [t_{I_3} \cos \vec{k}\vec{b} + t_{I_4} \cos \vec{k}(\vec{a}_0 - \vec{b})] \pm |T(k)| \quad (\text{IV.7})$$

avec

$$T(\vec{k}) = (t_{S_2} + t_{S_1}) e^{-i\vec{k}\vec{a}_0} + t_{I_2} e^{-i\vec{k}\vec{b}} + t_{I_1} e^{-i\vec{k}(\vec{a}_0 - \vec{b})}$$

La signification de chaque paramètre, détaillée en ref. 95, est rappelée sur la figure 30. De l'analyse de ces paramètres, une approximation encore plus forte peut être déduite [95], le couplage dans la direction c étant ici négligé :

$$E(\vec{k}) = 2(t_I \cos \vec{k}\vec{b} \pm t_S \cos \frac{1}{2} \vec{k}\vec{a}_0) \quad (\text{IV.8})$$

où \vec{a}_0 et \vec{b} sont les vecteurs unité de la maille élémentaire triclinique (à cause d'une faible dimérisation, la taille de la cellule unité est doublée : $a_0 = 2a$, a étant la distance moyenne entre molécules TMTSF). Malgré les simplifications introduites, la relation de dispersion IV.8 devrait décrire correctement le voisinage de la surface de Fermi.

Remarque : D'autres auteurs [96, 97] ont montré que cette relation IV.8 est trop simple pour décrire correctement les propriétés de nesting. Deux empilements voisins de molécules sont en fait décalés, ce qui introduit plusieurs intégrales de transfert dans la direction transverse (figure 30). Par conséquent, il faut garder une forme plus complexe de la relation de dispersion. Si on suppose que la dimérisation reste faible, on a [96, 97] :

$$\epsilon(\vec{k}) = \pm (t_{S_1} + t_{S_2}) \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_0}{2} + 2t_{I_3} \cos \vec{k}\vec{b} \pm (t_{I_1} + t_{I_2}) \cos \vec{k}(\vec{b} - \frac{\vec{a}_0}{2}) + 2t_{I_4} \cos \vec{k}(\vec{a}_0 - \vec{b}), \quad (\text{IV.9})$$

la zone de Brillouin ayant été repliée : $\vec{k} \cdot \vec{a}_0 \in (-\pi, \pi)$.

Autour de l'énergie de Fermi, c'est-à-dire autour de $\vec{k} \cdot \vec{a}_0 = \pm \frac{\pi}{2}$, l'énergie peut se réécrire [96, 97] :

$$E(\vec{k}) = (t_{S_1} + t_{S_2}) \cos \frac{\vec{k}\vec{a}_0}{2} + A \cos (\vec{k}\vec{b} + \phi \operatorname{sgn}(\vec{k} \cdot \vec{a}_0)) \quad (\text{IV.10})$$

avec

$$\phi = - \operatorname{arctg} \frac{t_{I_1} + t_{I_2} - 2\sqrt{2} t_{I_4}}{t_{I_1} + t_{I_2} + 2\sqrt{2} t_{I_3}} \quad (\text{IV.11a})$$

$$\text{et } A = 2 \left(t_{I_3}^2 + \left(\frac{t_{I_1} + t_{I_2}}{2} \right)^2 + t_{I_4}^2 + (t_{I_1} + t_{I_2})(t_{I_3} + t_{I_4}) \frac{\sqrt{2}}{2} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.11b})$$

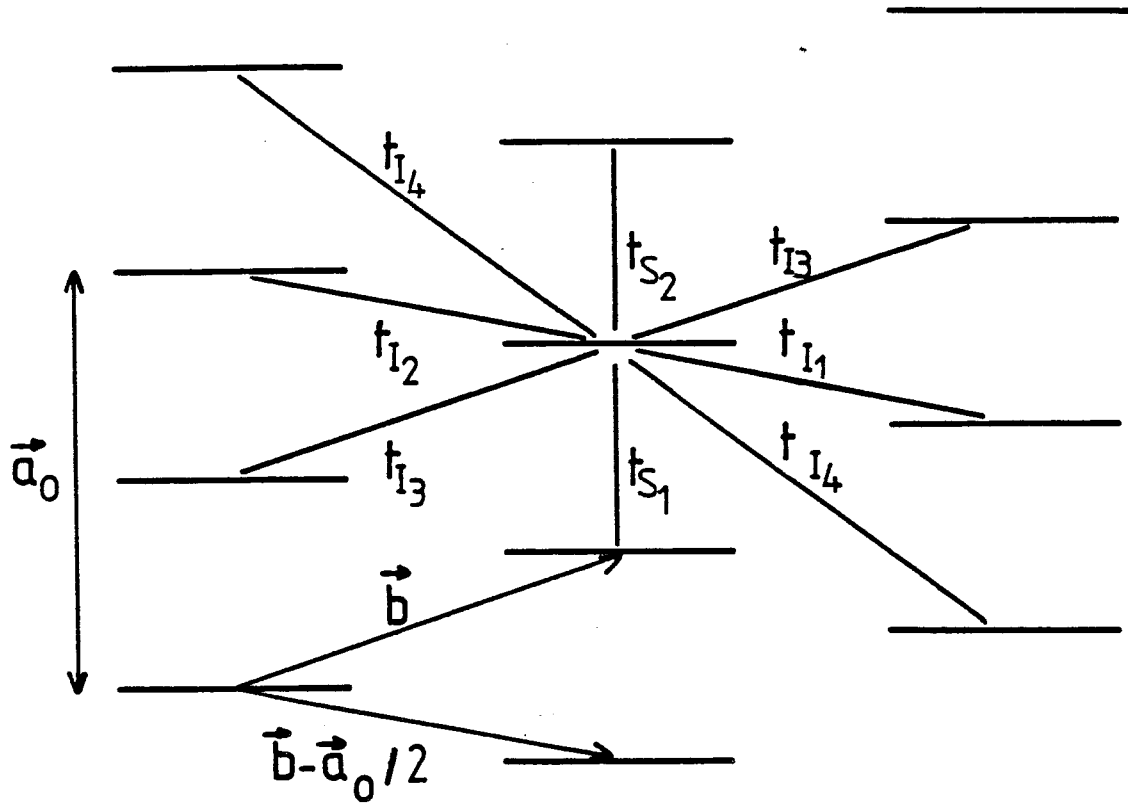


Figure 30

Empilement schématique des molécules de TMTSF, avec les intégrales de transfert dans le plan (a, b) [94-97].

A cause de l'introduction de cette phase ϕ , les propriétés de nesting sont différentes de ce que donnerait la relation de dispersion IV.8. Elles sont aussi différentes de celles que nous allons décrire avec la relation de dispersion modèle IV.5. Néanmoins, nous argumenterons au paragraphe V-F que ce raffinement ne modifie en rien les effets que nous allons analyser et qu'il peut même les rendre plus facilement observables !

La relation de dispersion que nous utiliserons est donc très simplifiée. Mais elle contient les éléments essentiels qui permettent de comprendre semi-quantitativement les effets observés expérimentalement et de décrire les aspects physiques nouveaux que nous allons développer : le rôle des effets orbitaux sur l'instabilité de la phase métallique. Ces effets sont caractéristiques de l'aspect bidimensionnel du gaz d'électrons. Nous étudierons donc, dans la plus grande partie de ce travail, le gaz d'électrons 2D décrit par la relation de dispersion

$$E(\vec{k}) = v(|k_{//}| - k_F) - 2t_b \cos k_{\perp} b - 2t'_b \cos 2k_{\perp} b \quad (\text{IV.12})$$

Dans la suite de cet exposé, on notera le vecteur de nesting 2D de la façon suivante :

$$\vec{Q} = (2k_F + q_{//}, q_{\perp}) \quad (\text{IV.13})$$

Le rôle de la troisième dimension sera discuté ultérieurement (paragraphe IV - D.5)

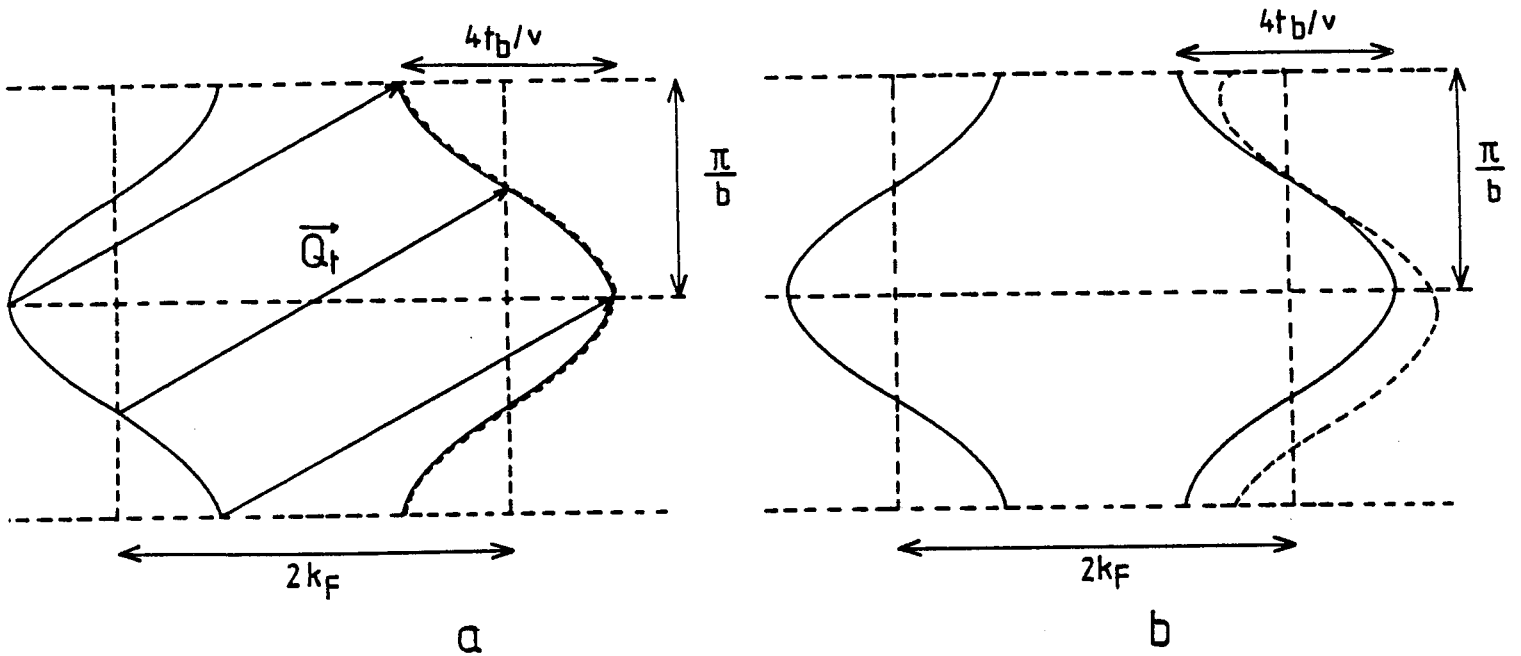


Figure 31 : Surface de Fermi 2D décrite par la relation de dispersion

$\epsilon(\vec{k}) = v (|k_{||}| - k_F) - 2t_b \cos k_{\perp} b$. Le vecteur $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$ superpose exactement l'une sur l'autre les deux nappes de la surface de Fermi : l'emboîtement est parfait (31 a). La susceptibilité présente une ligne L de maxima relatifs (fig. 32) pour l'ensemble des vecteurs \vec{Q} tels que les deux nappes restent tangentes (31 b).

IV - C. SUSCEPTIBILITE ET INSTABILITE DU GAZ D'ELECTRONS EN CHAMP NUL

IV - C. 1. Le nesting parfait, $t'_b = 0$

Lorsque $t'_b = 0$, les deux nappes de la surface de Fermi se superposent exactement pour le vecteur de nesting $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$ [98] (figure 31). Dans ce cas, la susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, T)$ présente une divergence logarithmique, d'une part, à température nulle, en fonction de $\vec{Q} - \vec{Q}_t$, d'autre part, au vecteur d'onde \vec{Q}_t , en fonction de la température. Nous avons calculé $\chi_0(\vec{Q}, T)$ analytiquement.

A température nulle, on trouve, à partir de l'expression I.1, (Appendice D)

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi v b} \left\{ \ln 2k_F - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln |q_{\parallel} - q_b \cos x| dx \right\} \quad (\text{IV.14})$$

avec $q_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2}$. Ainsi que nous le rappellerons au paragraphe IV.- D. 7., l'expression I.1 n'est pas du tout adaptée aux calculs de χ_0 sous champ magnétique. Pour cela, on utilisera le formalisme de la représentation mixte [99] employé par Gor'kov et Lebed [100]. Il était utile d'utiliser aussi cette représentation pour calculer aussi la susceptibilité dans le cas $H = 0$. En anticipant un peu, on calcule $\chi_0(\vec{Q}, T)$ à l'aide de l'expression IV.54. On trouve :

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi v b} \int_d^{\infty} \cos q_{\parallel} x J_0(q_b x) \frac{dx}{x} \quad (\text{IV.15})$$

où d est une coupure à courte distance, typiquement de l'ordre de la distance interatomique mais que Gor'kov et Lebed ne calculent pas. Les expressions IV.14 et IV.15 sont égales et, en les comparant, nous avons montré que (Appendice D) :

$$d = \frac{1}{2\gamma k_F}$$

où $\gamma = e^C \approx 1.781$, C étant la constante d'Euler ($C \approx 0.577$). La susceptibilité à température nulle est égale à (Appendice D) :

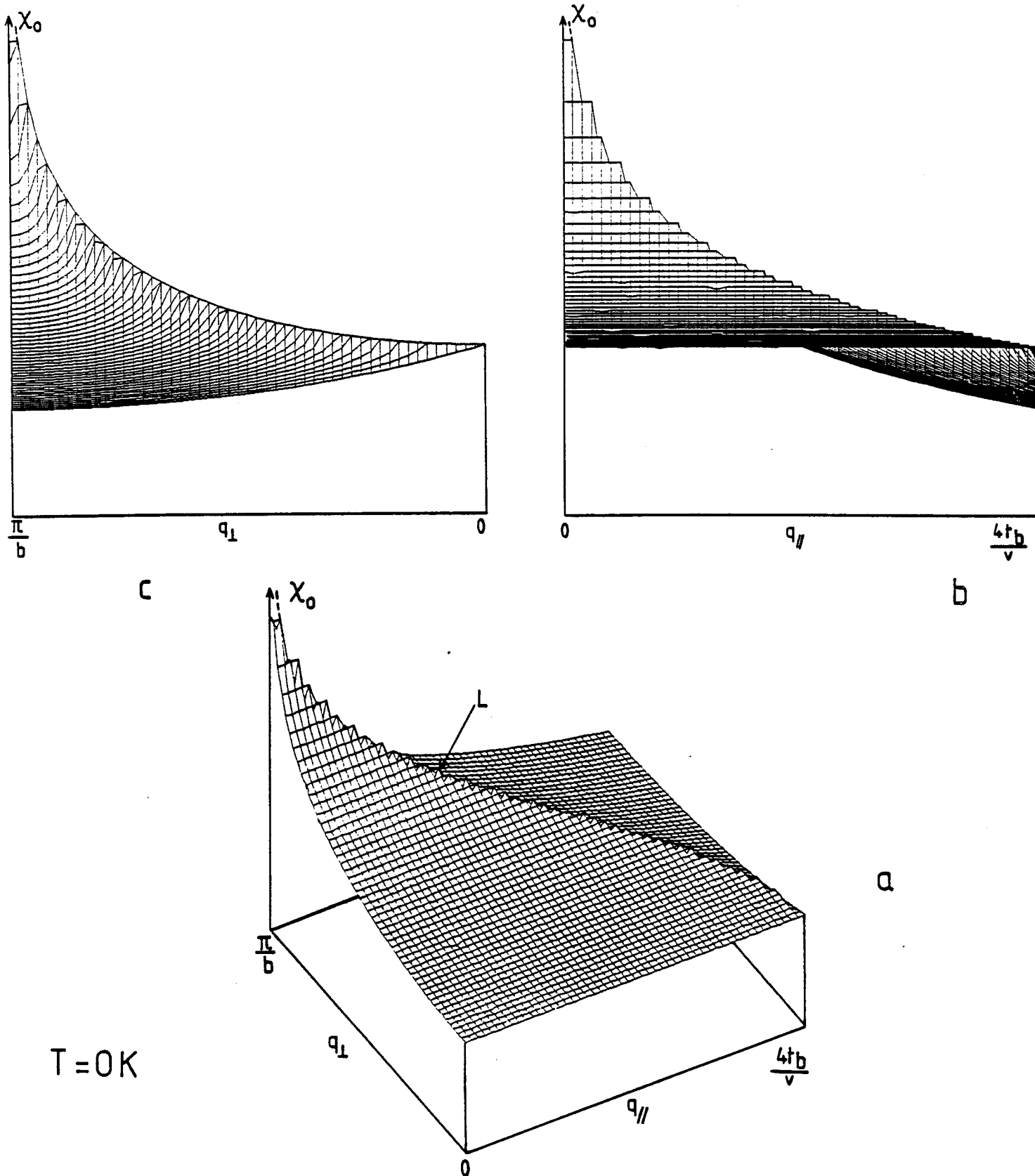


Figure 32 : a) Susceptibilité $\chi_0(\vec{Q})$ du gaz d'électrons sans interaction en fonction des deux composantes q_{\parallel} et q_{\perp} du vecteur de nesting $\vec{Q} = (2k_F + q_{\parallel}, q_{\perp})$, lorsque $t_{\perp}(p) = -2t_b \cos p$. L'emboîtement de la surface de Fermi est parfait pour le vecteur $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$: $\epsilon(\vec{k}) = -\epsilon(\vec{k} + \vec{Q}_t)$. La susceptibilité diverge donc logarithmiquement à ce vecteur d'onde. La ligne L, où la susceptibilité est non analytique, décrit l'ensemble des vecteurs de nesting tels que les deux nappes de la surface de Fermi glissent l'une sur l'autre (figure 31). Les figures b) et c) présentent des coupes de la susceptibilité parallèlement aux axes q_{\parallel} et q_{\perp} (ici $t_b/t_a = 0.1$).

$$\chi_0(\vec{Q}) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi v b} \left(\ln \frac{4k_F}{q_b} - \text{Argch} \frac{q_{//}}{q_b} \right) & \text{si } q_{//} > q_b \\ \frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{4k_F}{q_b} & \text{si } q_{//} < q_b \end{cases} \quad (\text{IV.16})$$

En plus de la divergence logarithmique autour du vecteur d'onde \vec{Q}_t ($q_{//} \rightarrow 0$ ou $q_b \rightarrow 0$), il existe une ligne L où la susceptibilité est non analytique [101] (figure 32). Cette courbe d'équation

$$q_{//} = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} \quad (\text{IV.17})$$

décrit l'ensemble des vecteurs de nesting pour lesquels les deux nappes de la surface de Fermi restent tangentes l'une à l'autre.

Dans un plan $q_{\perp} = \text{cte}$, la susceptibilité est constante tant que $q_{//} < q_b$, puis décroît comme $\left(\frac{q_{//} - q_b}{q_b}\right)^{1/2}$. Dans un plan $q_{//} = \text{cte}$, la susceptibilité est maximum au point $q_{//} = q_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2}$ (figure 32). La position de cette ligne L est importante car c'est autour d'elle que se développera une structure nouvelle sous champ magnétique.

A température finie, la formule V.15 se généralise simplement et la susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}, T) = \frac{1}{2\pi v b} \int_0^{\infty} \cos q_{//} x \ J_0(q_b x) \frac{d x/x_T}{\text{sh } x/x_T} \quad (\text{IV.18})$$

où x_T est une longueur "thermique" : $x_T = v/2\pi T$. Au vecteur d'onde \vec{Q}_t de nesting parfait, la susceptibilité diverge logarithmiquement en température :

$$\chi_0(\vec{Q}_t, T) = - \frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{\pi T d}{v} = - \frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{\pi T}{2\gamma v k_F} \quad (\text{IV.19})$$

et l'écart au nesting parfait supprime la divergence logarithmique en température. De façon approchée,

$$\chi_0(\vec{Q}, T) \approx - \frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{\max\left(\frac{v q_{//}}{2}, \frac{v q_b}{4}, \frac{\pi T}{2\gamma}\right)}{v k_F} \quad (\text{IV.20})$$

La figure 33 montre la structure de la susceptibilité à température finie : les non-analyticités disparaissent, il subsiste une ligne L de maxima relatifs.

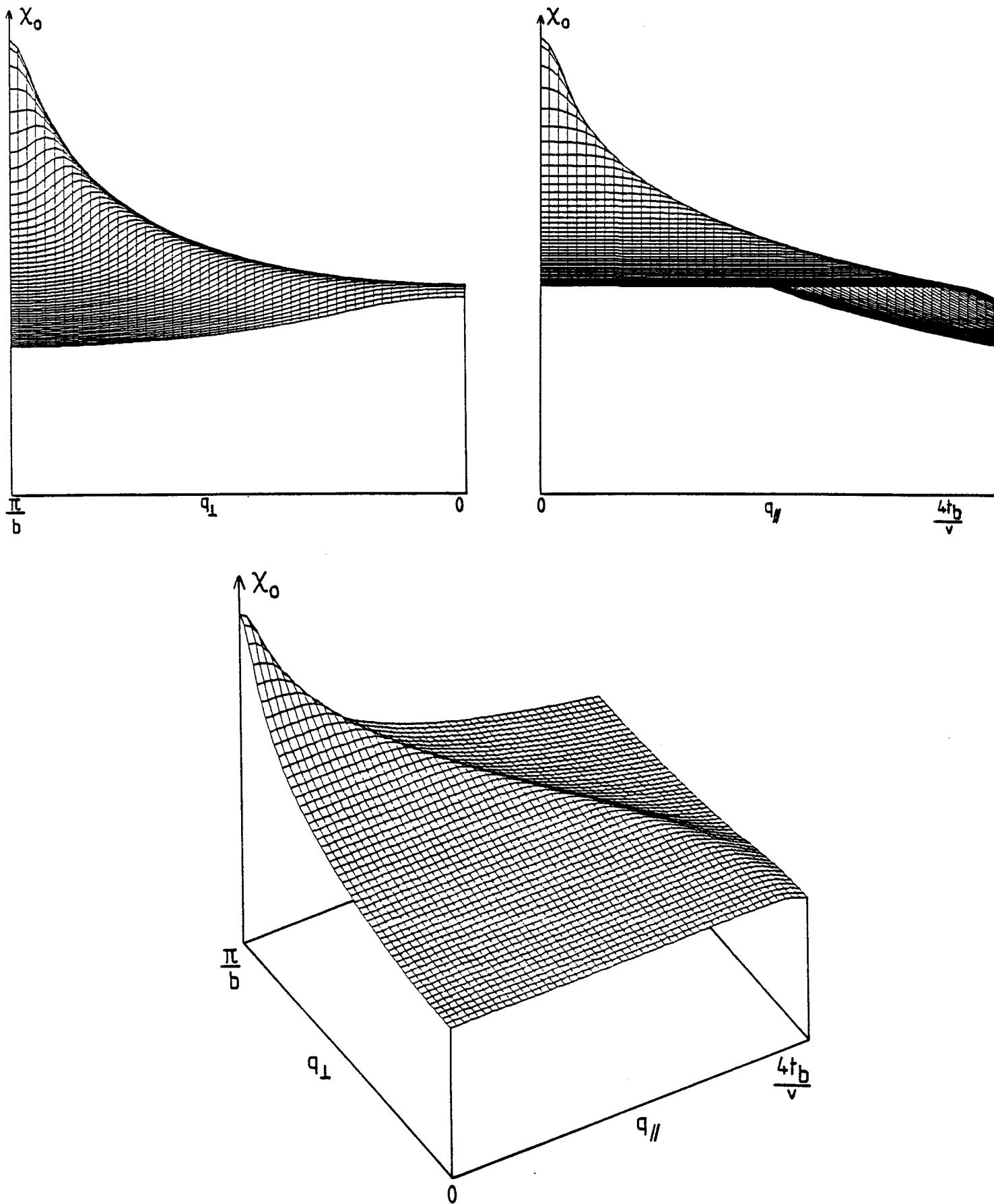


Figure 33 : Susceptibilité $x_0(\vec{Q}, T)$, à température finie, du gaz d'électrons décrit par la relation de dispersion $t_{\perp}(p) = -2t_b \cos p$. La singularité en $(2k_F, \pi/b)$ est supprimée et le maximum varie comme $\ln k_B T$ ($t_b/t_a = 0.1$, $T/t_b = 1/5\pi = 0.0637$).

Puisque $\chi_0(\vec{Q}_T)$ diverge logarithmiquement à basse température, la phase métallique du gaz d'électrons en interaction est toujours instable à suffisamment basse température. Le critère de Stoner IV.1 donne la température d'instabilité :

$$T_C^0 = \frac{2\gamma}{\pi} v k_F \exp - \frac{1}{N(0)I} \quad (\text{IV.21})$$

$N(0) = \frac{1}{2\pi v b}$ étant la densité d'états au niveau de Fermi.

IV - C. 2. Le nesting imparfait, $t'_b \neq 0$

Dans ce cas, les deux nappes de la surface de Fermi ne peuvent plus se superposer exactement. La susceptibilité est maximale pour le vecteur \vec{Q}_0 , différent de $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$, qui superpose le mieux les deux nappes — c'est-à-dire tel que le plus grand nombre de dénominateurs dans l'expression I.1 soient petits — . Par ailleurs, la susceptibilité ne diverge plus à température nulle, quel que soit le vecteur d'onde (figures 34,35).

A température nulle, $\chi_0(\vec{Q})$ s'écrit maintenant (Appendice D) :

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi v b} \left\{ \ln 2k_F - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln |q_{//} - q_b \cos p - q'_b \cos 2p| dp \right\} \quad (\text{IV.22})$$

$$\text{avec } q_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} \quad \text{et } q'_b = \frac{4t'_b}{v} \cos q_{\perp} b$$

Comme dans le cas $t'_b = 0$, $\chi_0(\vec{Q})$ présente une ligne L de non analyticités définie par

$$q_{//} = q_b + q'_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} + \frac{4t'_b}{v} \cos q_{\perp} b \quad (\text{IV.23})$$

Cette ligne se sépare en deux pour un vecteur d'onde \vec{Q}_0 (figure 35). Ces deux lignes sont décrites par

$$\begin{aligned} L_1 \quad q_{//} &= q_b + q'_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} + \frac{4t'_b}{v} \cos q_{\perp} b \\ L_2 \quad q_{//} &= -\frac{q_b^2}{8q'_b} - q'_b = -\frac{1}{2v} \frac{t_b^2 \cos^2 q_{\perp} b / 2}{t'_b \cos q_{\perp} b} - 4 \frac{t'_b}{v} \cos q_{\perp} b \end{aligned} \quad (\text{IV.24})$$

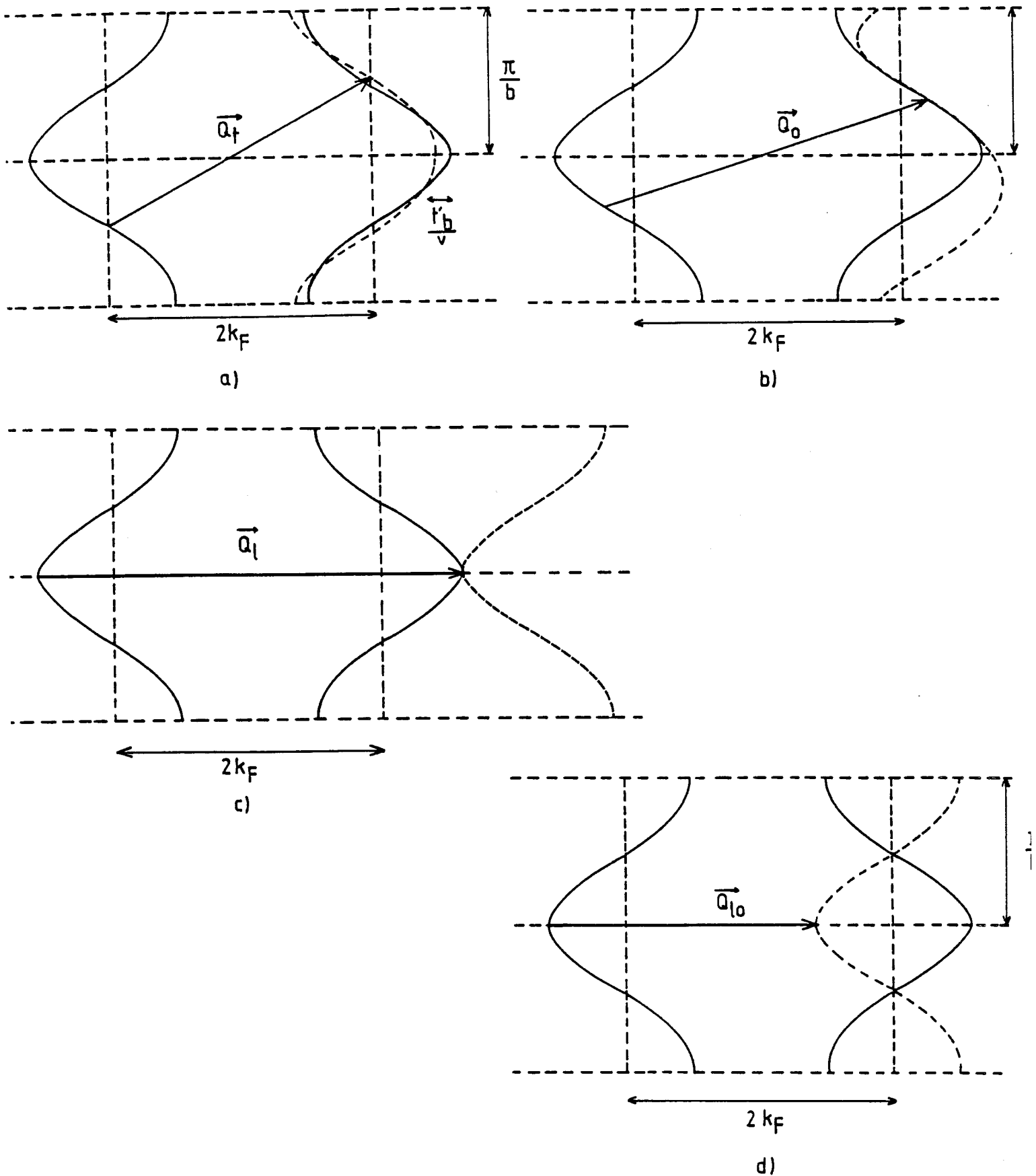


Figure 34 : Lorsque $t_x(p) = -2t_b \cos p - 2t'_b \cos 2p$, le vecteur \vec{Q}_x ne superpose plus exactement les deux nappes de la surface de Fermi (a). A température nulle, le vecteur de meilleur nesting \vec{Q}_0 est celui qui connecte les points d'inflexion (b). Gor'kov et Lebed [100] ont envisagé le nesting au vecteur longitudinal $\vec{Q}_2 = (4(t_b + t'_b)/v, 0)$ (en négligeant t'_b) (c). Le vecteur $\vec{Q}_{2_0} = (2k_F, 0)$ conduit à des poches compensées (d).

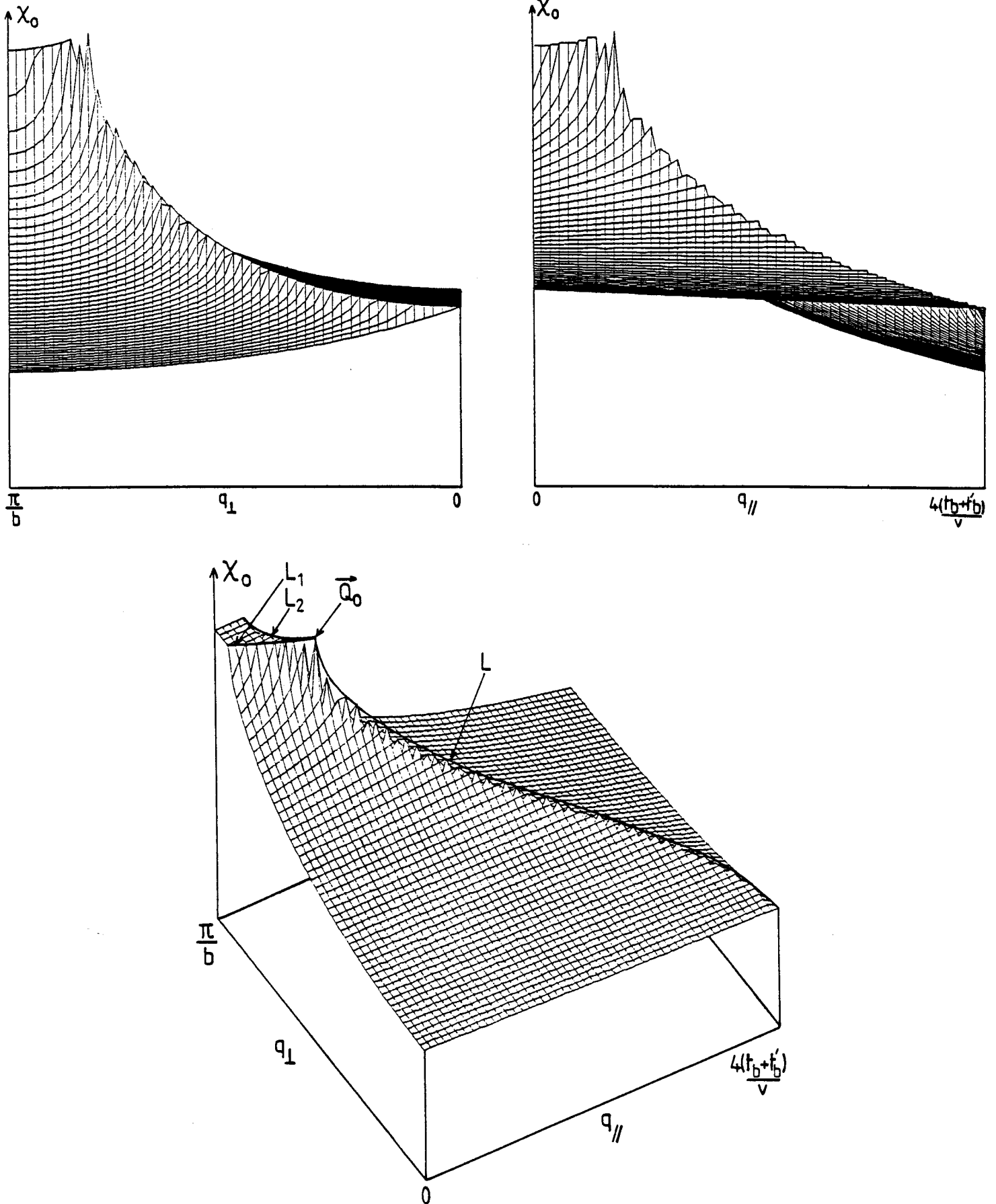


Figure 35 : Susceptibilité $x_0(\vec{Q})$, à température nulle, du gaz d'électrons lorsque $t_{\perp}(p) = -2t_b \cos p - 2t'_b \cos 2p$. $x_0(\vec{Q})$ ne diverge plus, pour aucun vecteur d'onde. Le vecteur de meilleur nesting \vec{Q}_0 est celui qui connecte les points d'inflexion de la surface de Fermi. Les lignes L , L_1 et L_2 décrivent le glissement des deux nappes de la surface de Fermi l'une sur l'autre ($t_b/t_a = t'_b/t_b = 0.1$).

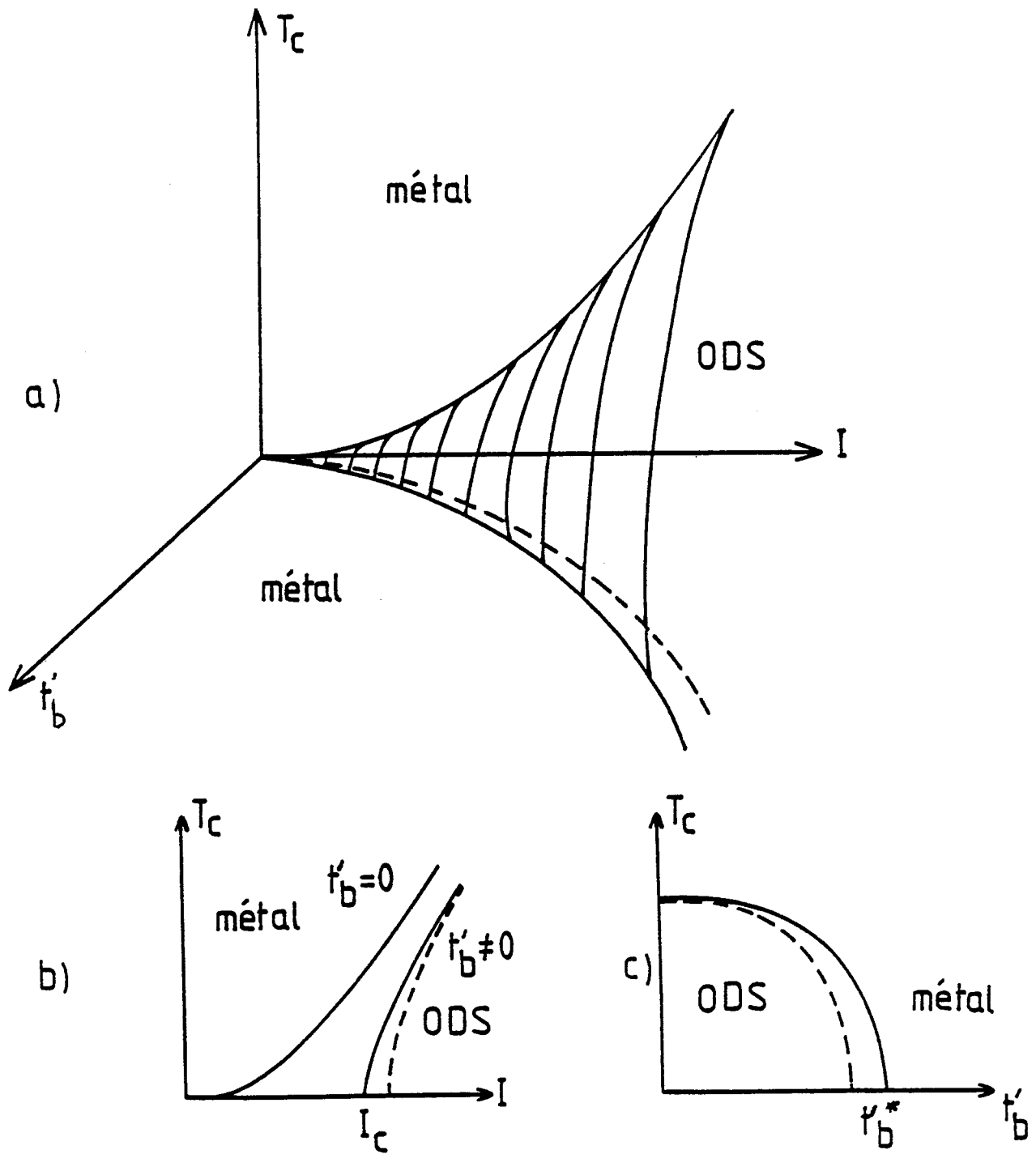


Figure 36 : a) Température T_c d'instabilité de la phase métallique, en fonction du paramètre de Stoner I qui décrit les interactions et de l'énergie t'_b qui décrit l'écart au nesting parfait. Si le nesting est parfait ($t'_b = 0$), la phase métallique est toujours instable à température nulle. Si le nesting est imparfait ($t'_b \neq 0$), la phase métallique n'est instable que si I est supérieure à une valeur critique (notée I_c à $T = 0$) (b). Lorsque I est fixé, la phase métallique est instable si t'_b est inférieure à une valeur critique t'_b^* (c). La phase métallique est plus instable au vecteur \vec{Q}_0 de meilleur nesting qu'au vecteur transverse \vec{Q}_t (tirets).

Les maxima sont plus grands sur la ligne L_2 que sur la ligne L_1 . Ces lignes décrivent l'ensemble des vecteurs d'onde tels que les deux nappes de la surface de Fermi soient tangentes (figure 35). Elles se rejoignent au vecteur \vec{Q}_0 où se situe le maximum absolu de la susceptibilité. C'est le vecteur qui connecte les points d'inflexion de chacune des deux nappes (figures 34, 35). Ses coordonnées $\vec{Q}_0 (2k_F + q_{\parallel}^0, q_{\perp}^0)$ sont données par : $q_b = \frac{4}{3} q_{\parallel}^0$ et $q_b' = -q_{\parallel}^0/3$, c'est-à-dire (Appendice D)

$$\begin{cases} \cos \frac{q_{\perp}^0 b}{2} = \frac{\sqrt{1 + 128r^2} - 1}{16r} \\ q_{\parallel}^0 = \frac{3t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp}^0 b}{2} \end{cases} \quad (\text{IV.25})$$

avec $r = t_b'/t_b$. Typiquement si $r = 1/30$, $q_{\perp}^0 b = 14.8^\circ$ et $q_{\parallel}^0 = 0.097 \times 4t_b/v$. En appendice D, nous avons calculé explicitement $\chi_0(\vec{Q})$ sur la ligne L. En particulier, nous avons trouvé :

$$\chi_0(\vec{Q}_T) = \frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{v k_F}{t_b'} \quad (\text{IV.26})$$

et

$$\chi_0(\vec{Q}_0) = \frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{v k_F}{t_b' |\cos q_{\perp}^0 b|} \quad (\text{IV.27})$$

On vérifie ainsi que $\chi_0(\vec{Q}_0) > \chi_0(\vec{Q}_T)$. La différence essentielle avec le cas du nesting parfait est que ce maximum n'est pas infini à $T = 0$. La phase métallique n'est donc instable à température nulle que si le coefficient de champ moléculaire I est supérieur à la valeur critique I_c (figure 36).

$$I_c = 2\pi v b / \ln \frac{v k_F}{t_b' |\cos q_{\perp}^0 b|} \quad (\text{IV.28})$$

Autrement dit, étant donné le coefficient d'interaction I, la phase métallique n'est instable que si t_b' est inférieur à la valeur critique (Appendice D) :

$$t_b'^c(\vec{Q}_0) = \frac{\pi T_c^0}{2\gamma} \times \frac{1}{1 - 32 \left(\frac{\pi T_c^0}{2\gamma t_b} \right)^2} \quad (\text{IV.29})$$

où T_c^0 est la température d'instabilité lorsque $t_b' = 0$ (eq. IV.21).

Cette valeur critique $t_b^{**}(\vec{Q}_0)$ est légèrement supérieure à la valeur critique qui conditionne l'instabilité au vecteur d'onde \vec{Q}_t et qui est égale à $t_b^{**}(\vec{Q}_t) = \frac{\pi T_c^0}{2\gamma}$ [100]. La raison en est que la phase métallique est moins stable au vecteur d'onde \vec{Q}_0 qu'au vecteur \vec{Q}_t . (Yamaji distingue aussi les deux instabilités aux vecteurs \vec{Q}_t et \vec{Q}_0 . Il nomme les phases ordonnées correspondantes SDW1 et SDW2 [102]).

A température finie, la susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}, T) = \frac{1}{2\pi v_b} \int_d \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \int_0^\pi \frac{dp}{\pi} \cos(q_{//} - q_b \cos p - q'_b \cos 2p) x \quad (\text{IV.30})$$

Dans ce cas comme dans le cas $t_b^i = 0$, l'effet de la température est d'atténuer les singularités de χ_0 . Par ailleurs, des régions où les nappes sont distantes de $k_B T$ contribuent à la susceptibilité : le vecteur d'onde de meilleur nesting $\vec{Q}_0(T)$ n'est plus égal à \vec{Q}_0 , celui qui connecte les points d'inflexion. Lorsque la température augmente, $\vec{Q}_0(T)$ évolue entre \vec{Q}_0 et $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$ [101]. lorsque $T \gg t_b^i$, le vecteur de meilleur nesting est à nouveau \vec{Q}_t : l'effet de t_b^i a été "gommé" par la température.

La relation IV.30 permet de déterminer la variation de la température critique en fonction de t_b^i (Appendice D). Au vecteur d'onde \vec{Q}_t , la variation est de type BCS avec $t_b^{**} = (\pi/2\gamma)T_c^0$ [103]. Mais le vecteur de meilleur nesting $\vec{Q}_0(T)$ est différent de \vec{Q}_t et varie en température. La variation $T_c(t_b^i)$ est schématisée figure 36.

En conclusion, si $t_b^i \neq 0$, la divergence logarithmique à basse température n'existe plus ; le maximum dont la position est fonction de la température $\vec{Q}_0(T)$ varie en gros comme $\ln \max(t_b^i, T)$. Au-delà d'une valeur critique t_b^{**} , la phase métallique reste donc stable même à température nulle.

Nous allons voir maintenant comment une structure nouvelle induite par le champ magnétique se développe à partir de la susceptibilité en champ nul et comment le champ peut restaurer l'instabilité de la phase métallique.

IV - D. INSTABILITE DE LA PHASE METALLIQUE SOUS CHAMP MAGNETIQUE

IV - D. 1. La théorie de Gor'kov et Lebed [100].

Gor'kov et Lebed ont établi le cadre théorique adapté aux calculs de la susceptibilité sous champ magnétique, cadre que nous utiliserons tout au long de ce travail. La formule usuelle qui permet de calculer la susceptibilité (équation I.1) est valable en champ nul, lorsque le vecteur d'onde électronique \vec{k} est un bon nombre quantique. En utilisant le formalisme des fonctions de Green, $\chi_0(\vec{Q}, T, H = 0)$ peut aussi s'écrire (figure 37) :

$$\chi_0(\vec{Q}) = T \sum_{\omega_n} \int \frac{d^2\vec{p}}{(2\pi)^2} G_+(i\omega_n, \vec{p}) G_-(i\omega_n, \vec{p} - \vec{Q}) \quad (IV.31)$$

où les fonctions de Green G_+ et G_- décrivent la propagation d'un électron d'un côté ou de l'autre de la surface de Fermi :

$$G_+ = \frac{1}{i\omega_n - (\epsilon_k - \epsilon_F)}$$

les ω_n sont les fréquences de Matsubara $\omega_n = (2n + 1) \pi T$ [104].

En présence d'un champ magnétique, les deux composantes du vecteur d'onde ne peuvent plus être ensemble de bons nombres quantiques. Les formules précédentes pour le calcul de la susceptibilité ne sont plus valables. Gor'kov et Lebed modifient l'expression IV.31 en utilisant une représentation mixte avec des fonctions de Green, fonctions de l'impulsion dans la direction transverse \vec{b} et fonctions de la position dans la direction de forte conductivité \vec{a} . Ainsi la susceptibilité sous champ s'écrit (figure 37) :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = T \sum_{\omega_n} \int \frac{dp_{\perp}}{2\pi} \int dx' G_+(i\omega_n, p_{\perp}, x, x') G_-(i\omega_n, p_{\perp} - q_{\perp}, x', x) \quad (IV.32)$$

q_{\perp} étant la composante transverse de \vec{Q} . Sous champ magnétique perpendiculaire au plan (\vec{a}, \vec{b}) , $\vec{H} = (0, 0, H)$, l'impulsion \vec{p} est remplacée par $\vec{p} - e\vec{A}$. En choisissant la jauge de Landau $\vec{A} = (0, Hx, 0)$, l'équation du mouvement de G_+ s'écrit [100] :

$$\{i\omega_n + iv \frac{\partial}{\partial x} + vk_F - t_{\perp}(p_{\perp} - eHx)\} G_+(i\omega_n, p_{\perp}, x, x') = \delta(x - x') \quad (IV.33)$$

t_{\perp} est la dispersion dans la direction transverse:

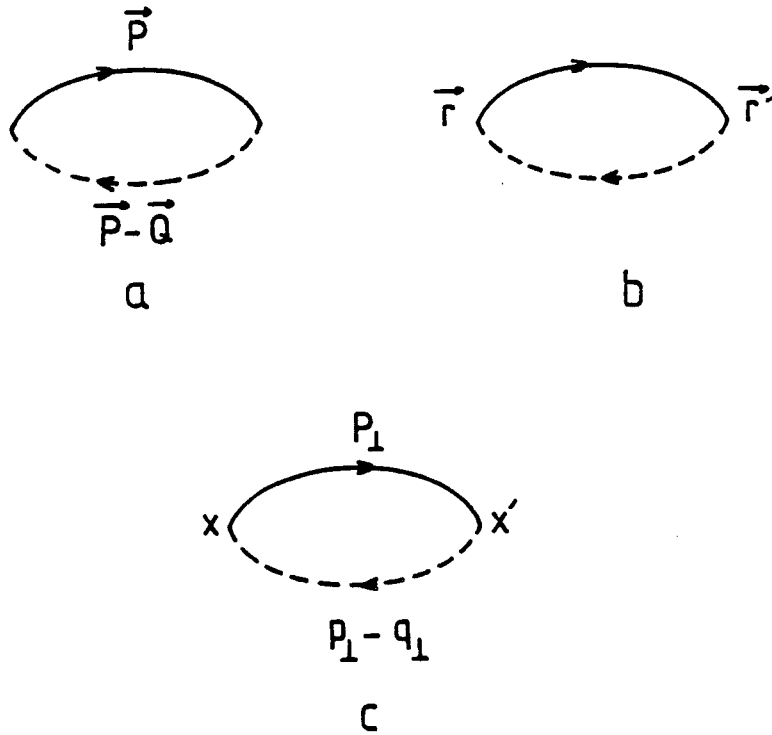


Figure 37

Représentation diagrammatique de la fonction de réponse Onde de Densité
a) dans l'espace réciproque, b) dans l'espace réel, c) en représentation mixte.

$$t_{\perp}(p) = -2t_b \cos p - 2t'_b \cos 2p \quad (\text{IV.34})$$

L'équation IV.33 s'intègre immédiatement :

$$G_+ = \frac{1}{iV} \exp\left\{-\left(\frac{\omega_n}{V} - ik_F\right)(x - x') - \frac{i}{V} \int_{x'}^x t_{\perp}(p - eHbu) du\right\} \quad (\text{IV.35})$$

si $\omega_n(x - x')/v > 0$ et $G_+ = 0$ autrement. De même G_- propage un trou dont la composante longitudinale du vecteur d'onde est $k_F - Q_{//}$, $Q_{//}$ étant la composante longitudinale du vecteur de nesting :

$$G_- = -\frac{1}{iV} \exp\left\{-\left(\frac{\omega_n}{V} - ik_F + iQ_{//}\right)(x - x') - \frac{i}{V} \int_{x'}^x t_{\perp}(p - q_{\perp}b - eHbu) du\right\} \quad (\text{IV.36})$$

si $\omega_n(x - x')/v > 0$. Dans la suite nous notons

$$Q_{//} = 2k_F + q_{//}$$

La susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi bV} \left(\frac{dx/x_T}{shx/x_T} \int dp \cos\{q_{//}(x' - x) - \frac{1}{V} \int_{x'}^x (t_{\perp}(p - eHbu) + t_{\perp}(p - q_{\perp}b - eHbu)) du\} \right) \quad (\text{IV.37})$$

Remarquons que, bien que sous champ la fonction de Green à deux points ne soit plus invariante par translation (elle dépend de x et x' mais pas uniquement de la différence $x - x'$), la grandeur mesurable qu'est la susceptibilité est, elle, invariante par translation.

Gor'kov et Lebed calculent la susceptibilité pour les deux vecteurs suivants :

$$\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$$

et

$$\vec{Q}_l = \left(2k_F + \frac{4t_b}{V}, 0\right)$$

Nesting transverse \vec{Q}_t

Dans ce cas la susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}_t, H, T) = \frac{1}{2\pi bV} \int_d^{\infty} \frac{dx/x_T}{shx/x_T} J_0\left(\frac{4t'_b}{eHv} \sin eHbx\right) \quad (\text{IV.38})$$

$x_T = v/2\pi T$. Gor'kov et Lebed introduisent la coupure d à courte distance. Nous avons démontré que $d = 1/2\gamma k_F$ (IV-C.1.). De façon approchée, cette intégrale peut être séparée en deux parties : $\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \chi_1 + \chi_2$ correspondant à $x < 1/eHb$ et $x > 1/eHb$. Dans le premier cas, le sinus peut être remplacé par son argument et dans le second on moyenne sur les oscillations du sinus. Comme $\langle J_0(z \sin\phi) \rangle = J_0^2(z/2)$ (Appendice E), Gor'kov et Lebed en déduisent :

$$\chi_0(\vec{Q}_t, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \left\{ - \ln \frac{2\gamma dt'_b}{v} - J_0^2\left(\frac{2t'_b}{eHbv}\right) \ln \frac{\pi T}{eHvb} \right\} \quad (IV.39)$$

Le résultat essentiel contenu dans cette expression est que le champ restaure la divergence logarithmique à basse température. L'origine mathématique de cette divergence se comprend bien dans la structure de la formule IV.38. A température nulle et à grande distance, l'intégrale diverge comme :

$$\int \frac{dx}{x} \langle J_0\left(\frac{4t'_b}{eHbv} \sin eHbx\right) \rangle = J_0^2\left(\frac{2t'_b}{eHbv}\right) \int \frac{dx}{x} \quad (IV.40)$$

alors qu'en champ nul :

$$\int \frac{dx}{x} J_0\left(\frac{4t'_b x}{v}\right) = \int \frac{dx}{x^{3/2}} \quad \text{reste finie.} \quad (IV.41)$$

Physiquement, Gor'kov et Lebed interprètent l'origine de la restauration de la divergence logarithmique de la façon suivante : sous champ magnétique, le mouvement électronique dans l'espace réel reste confiné parallèlement à la direction Ox . En effet, on montre facilement que l'équation du mouvement

s'écrit $y = \frac{1}{eHv} t_1 \left(\frac{eHbx}{v}\right)$. Le mouvement est donc plus unidimensionnel, d'où la divergence logarithmique. Nous montrerons que cet argument est insuffisant et que la véritable raison de la divergence logarithmique sous champ est la quantification du mouvement électronique.

D'après le résultat IV.39, la phase métallique du gaz d'électrons en interaction peut devenir instable à suffisamment basse température, lorsque la susceptibilité $\chi(\vec{Q}, H, T)$ diverge :

$$\chi(\vec{Q}, H, T) = \frac{\chi_0(\vec{Q}, H, T)}{1 - I\chi_0(\vec{Q}, H, T)} \quad (\text{IV.42})$$

Par conséquent $T_c(H)$ est donnée par [100] :

$$J_0^2 \left(\frac{2t'_b}{eHvb} \right) \ln \frac{\pi T_c(H)}{eHvb} = \ln \frac{\pi T_c^0}{2\gamma t'_b} \quad (\text{IV.43})$$

où T_c^0 serait la température de transition si t'_b était nul :

$$\ln \frac{\pi T_c^0 d}{v} = - \frac{2\pi vb}{I} \quad (\text{IV.44})$$

Ainsi, la phase métallique est toujours instable à $T = 0$ sauf pour un ensemble discret de valeurs du champ H_k pour lesquelles la fonction de Bessel J_0 s'annule. Gor'kov et Lebed en déduisent le diagramme de phase rappelé figure 38. A 2D, un champ aussi faible soit-il restaure la divergence logarithmique et la séquence de sous-phases s'étend donc jusqu'à $H = 0$, $T = 0$. Le rôle de la troisième dimension sera étudié au paragraphe V-D.5.

Nesting longitudinal \vec{Q}_ℓ .

Selon Gor'kov et Lebed, le vecteur de nesting au vecteur d'onde \vec{Q}_t ne peut expliquer les mesures d'effet Hall [42, 44] car il conduit à un nombre de porteurs trop faible dans la phase condensée. Ils envisagent alors la possibilité d'une condensation au vecteur d'onde $\vec{Q}_\ell = (2k_F + 4t_b/v, 0, 0)$ qui laisse des poches d'électrons ou de trous beaucoup plus grandes (t_b/t'_b fois plus grandes que dans le cas précédent). Dans ce cas, en négligeant t'_b , la susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}, H) \approx \frac{1}{2\pi vb} \left\{ - \ln \frac{4\gamma dt_b}{v} - J_m^2 \left(\frac{4t_b}{eHvb} \right) \ln \frac{\pi T}{eHbv} \right\} \quad (\text{IV.45})$$

avec $m = 4t_b/eHvb$. La susceptibilité est beaucoup plus faible dans ce cas, puisque l'argument de la fonction de Bessel est plus grand (dans un rapport t_b/t'_b). Pour justifier la condensation d'une Onde de Densité de Spin au vecteur \vec{Q}_ℓ , il faut donc invoquer un coefficient de champ moléculaire I non isotrope, tel que

$$I(\vec{Q}_\ell) > I(\vec{Q}_t).$$

Mais Gor'kov et Lebed ne discutent pas ce point.

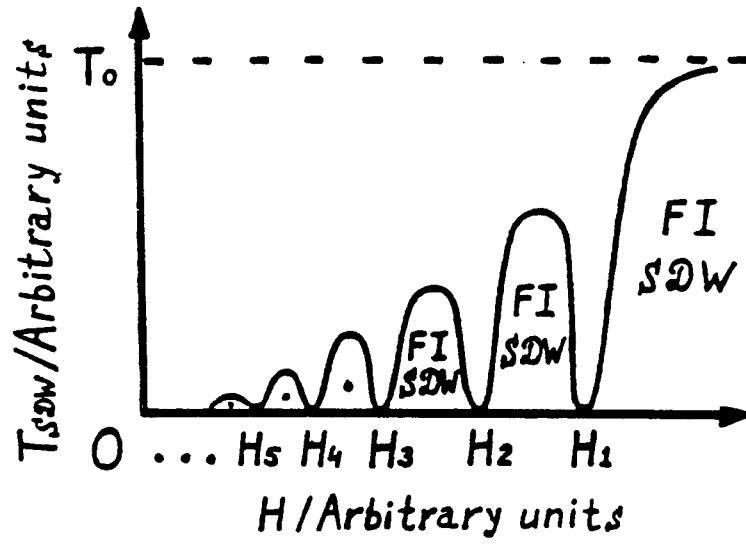


Figure 38

Diagramme de phases proposé par Gor'kov et Lebed [100]

IV - D. 2. Le nesting quantifié

Gor'kov et Lebed ont étudié l'instabilité de la phase métallique pour deux vecteurs de nesting fixés. Ceci suppose que le paramètre I qui décrit les interactions dépende du vecteur d'onde et soit très piqué autour de \vec{Q}_ℓ ou autour de \vec{Q}_t , ce qui n'est pas prouvé. Par ailleurs, ce blocage du vecteur d'onde a pour conséquence la chute à zéro de la température de transition pour certaines valeurs du champ et donc une suite de "réentrances" métal-ODS (figure 38). Si l'interaction n'est pas piquée, le vecteur d'instabilité est celui qui maximise le produit $I(\vec{Q}) \cdot \chi(\vec{Q})$. Dans le cas où le paramètre I ne dépend pas du vecteur d'onde, le vecteur d'instabilité est celui qui maximise la susceptibilité. Il n'y a aucune raison pour que \vec{Q} soit égal à \vec{Q}_t ou \vec{Q}_ℓ (ce que nous avons déjà remarqué en champ nul).

Nous avons donc calculé la susceptibilité en fonction du vecteur de nesting \vec{Q} et cherché le vecteur qui la maximise. Nous avons montré que ce dernier dépend du champ magnétique $\vec{Q}(H)$ de façon à réaliser des conditions fondamentales de quantification. La température d'instabilité qui s'en déduit ne retombe plus à zéro. La théorie que nous avons développée n'est pas un simple raffinement du calcul de Gor'kov et Lebed. Elle contient les idées nouvelles suivantes [105, 106]:

1 - Le vecteur d'onde qui maximise la susceptibilité — c'est-à-dire le vecteur d'onde d'instabilité si I ne dépend pas ou peu de \vec{Q} — est déterminé par la double condition

. Le nesting, c'est-à-dire les détails de la géométrie de la surface de Fermi

. Une condition de quantification liée à la présence du champ magnétique.

Nous avons donné à ce mécanisme nouveau le nom de "nesting quantifié"

2 - La divergence logarithmique de la susceptibilité n'est restaurée que lorsque la condition de quantification est vérifiée.

a - Démonstration du nesting quantifié

On considère un gaz d'électrons 2D avec une relation de dispersion linéarisée dans la direction \vec{a} de plus forte conductivité :

$$\varepsilon(\vec{k}) = v(|k_{//}| - k_F) + t_{\perp}(k_{\perp}b) \quad (IV.46)$$

où t_{\perp} est une fonction périodique : $t_{\perp}(k_{\perp}b \pm 2\pi) = t_{\perp}(k_{\perp}b)$. Nous n'introduisons pas d'autre hypothèse sur la forme de la fonction t_{\perp} . Nous étudions la dépendance en vecteur d'onde de la susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ avec $\vec{Q} = (2k_F + q_{//}, q_{\perp})$. Cette susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = T \sum_{\omega_n} \int \frac{dk_{\perp}}{2\pi} \int dx G_+(i\omega_n, k_{\perp}, 0, x) G_-(i\omega_n, k_{\perp} - q_{\perp}, x, 0) \quad (IV.47)$$

avec les expressions de G_+ et G_- écrites plus haut (eqs. IV.35, 36). Nous en déduisons

$$\begin{aligned} \chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{4\pi b v} \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \int_d^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \{ \exp\{iq_{//}x + \frac{i}{eHvb} (T_{\perp}(p - eHbx) + T_{\perp}(p - eHbx - q_{\perp}b) \\ - T_{\perp}(p) - T_{\perp}(p - q_{\perp}b))\} + \exp\{x \rightarrow -x\} \} \end{aligned} \quad (IV.48)$$

avec $T_{\perp}(p) = \int_0^p t_{\perp}(p') dp'$ et $x_T = v/2\pi T$. $d = 1/2\gamma k_F$. On notera $x_0 = 1/eHb$.

L'effet original du champ magnétique est d'introduire une périodicité spatiale dans les facteurs T_{\perp} , avec la longueur d'onde $\lambda = 2\pi x_0 = 2\pi/eHb$.

χ_0 est maximale s'il y a, dans l'intégrande, une condition de cohérence de phase entre le facteur $\exp iq_{//}x$ et les facteurs $\exp \frac{i}{eHvb} T_{\perp}(2\pi \frac{x}{\lambda})$

Cette condition s'écrit, $\exp iq_{//} \lambda = 1$, c'est-à-dire :

$$\boxed{q_{//} = neHb = n/x_0} \quad n \text{ entier} \quad (IV.49)$$

Cette condition est très générale et ne dépend pas de la relation de dispersion [106]. Lorsque cette condition n'est pas remplie, il y a interférences destructives entre les facteurs oscillants, et la susceptibilité χ_0 diminue. Ces interférences, constructives ou destructives, sont d'autant plus marquées que l'intégrale est calculée sur un grand nombre de périodes, c'est-à-dire que $x_T = v/2\pi T$ (qui coupe l'intégrale à grande distance) est grand. Le "contraste" qui pourrait être défini par $\frac{\chi_{\max} - \chi_{\min}}{\chi_{\max} + \chi_{\min}}$ est donc d'autant meilleur que la température est faible ($x_T \gg \lambda$).

b - Interprétation physique

En l'absence de champ, lorsque le nesting est imparfait, il reste une poche de porteurs qui définit une surface fermée entre les deux nappes de la surface de Fermi (figure 39). L'aire de cette poche est

$$A = \int_0^{2\pi} (q_{//} - t_{\perp}(p_{\perp}) - t_{\perp}(p_{\perp} - q_{\perp}b)) \frac{dp_{\perp}}{b} = \frac{2\pi}{b} q_{//} \quad (\text{IV.50})$$

ce qui, dans l'espace réel, définit une surface (en rétablissant les \hbar) [77] :

$$S = \left(\frac{\hbar}{eB} \right)^2 A$$

Sous champ magnétique le flux à travers cette surface est quantifié

$$B.S = n \frac{h}{e}$$

ce qui donne la condition de quantification du vecteur d'onde

$$\boxed{q_{//} = n \frac{eHb}{\hbar}} \quad (\text{IV.49})$$

Par ailleurs, pour ces valeurs quantifiées du vecteur d'onde, l'aire A est quantifiée

$$\boxed{A = 2\pi n \frac{eH}{\hbar}} \quad (\text{IV.51})$$

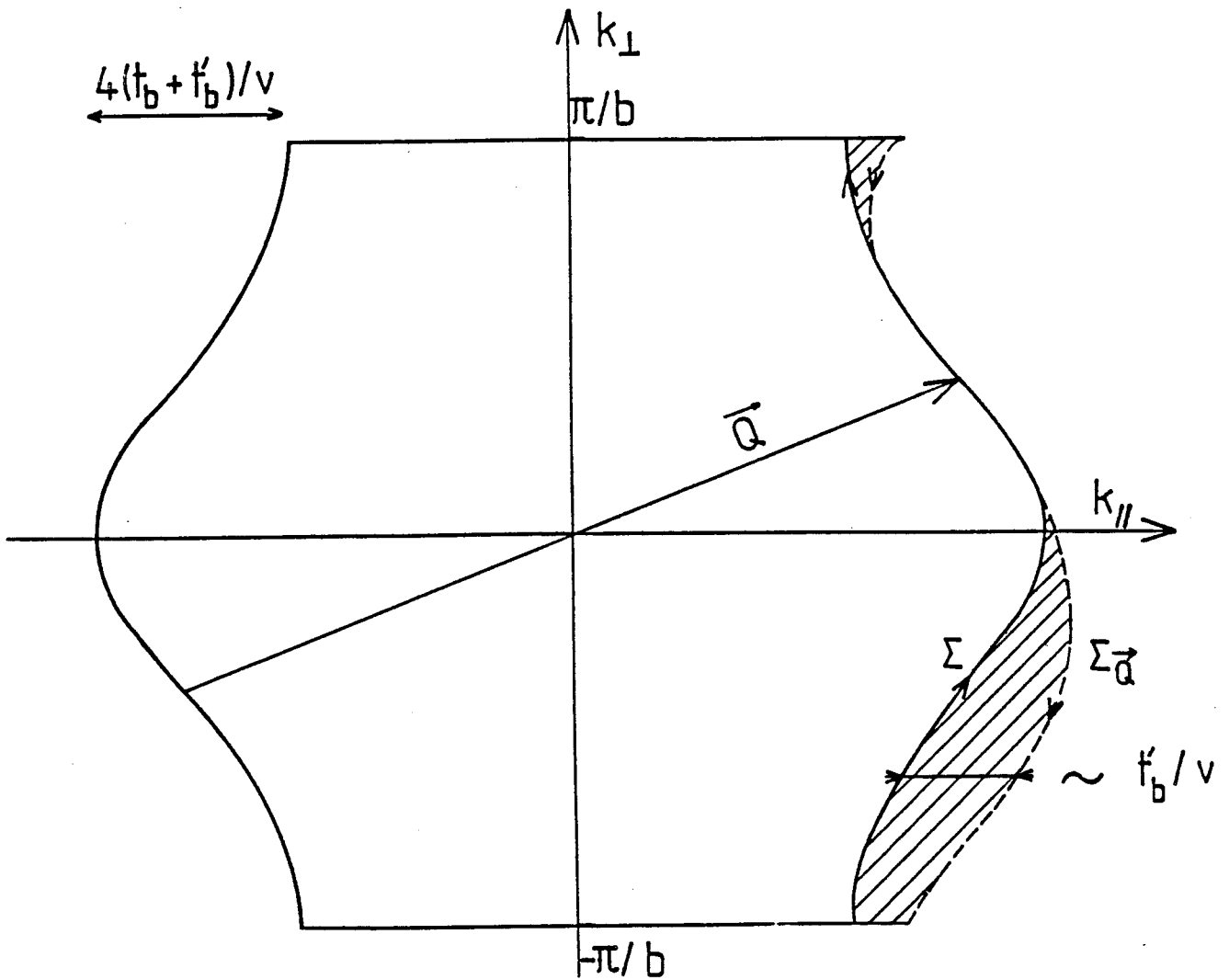


Figure 39

Surface de Fermi ouverte d'un gaz d'électrons bidimensionnel quasi-1D. En champ nul, le vecteur de meilleur nesting relie les points d'inflexion des deux nappes ($\tilde{a} T = 0$ K). Il reste une poche de porteurs de surface A, entre une nappe Σ et l'autre nappe translatée de \vec{Q} , $\Sigma_{\vec{Q}}$. La taille de cette poche est caractérisée par l'échelle d'énergie t'_b . Sous champ magnétique, la susceptibilité est maximale si cette surface est quantifiée : $A = n 2\pi eH/\hbar$.

Ces résultats ont la signification physique suivante. Dans la phase métallique, les orbites étant ouvertes, le mouvement électronique n'est pas quantifié. On envisage maintenant l'instabilité de la phase métallique vis-à-vis de la formation d'une phase qui ne contient plus qu'un petit nombre de porteurs. Géométriquement, ce nombre de porteurs est décrit par l'aire comprise entre une nappe de la surface de Fermi et l'autre nappe translatée du vecteur \vec{Q} (figure 39). Les orbites dans cette phase sont fermées et doivent donc être quantifiées sous champ magnétique. Par conséquent, l'instabilité n'est possible que si elle autorise cette quantification. Le vecteur de meilleur nesting doit donc s'adapter pour réaliser cette condition.

Le nombre de porteurs contenu dans la poche est égal à $N = \frac{A}{4\pi^2}$ (par unité de surface). Ainsi

$$\boxed{N = n \frac{eH}{h}} \quad (\text{IV.52})$$

le nombre de porteurs dans la poche est tel qu'il remplit complètement un nombre entier de niveaux de Landau (la dégénérescence d'un niveau étant $\frac{eH}{h}$). Ainsi le vecteur d'onde d'instabilité varie avec le champ pour que la surface A contienne un nombre entier de niveaux de Landau complètement remplis. Cette condition minimise l'énergie diamagnétique.

La condition de quantification peut aussi être interprétée comme une condition de résonance, de commensurabilité entre les deux fréquences spatiales (ou deux longueurs) caractéristiques du problème. La première caractérise le nesting, c'est l'inverse de $q_{//}$. La seconde est la longueur magnétique $x_0 = \hbar/eHb$ qui joue pour des orbites ouvertes l'équivalent du rayon cyclotron pour les orbites fermées. Cette description du problème rappelle un peu celle de la résonance magnéto-acoustique dans les métaux, quand il y a des trajectoires ouvertes périodiques (dans un plan perpendiculaire au champ). La résonance se produit alors quand la période de la trajectoire ouverte dans l'espace réel coïncide avec un multiple de la longueur d'onde acoustique [8].

$$\frac{\hbar}{eHb} = n\lambda$$

Dans le cas présent, c'est l'écart à $2k_F$ qui introduit la seconde périodicité caractéristique.

Ainsi la condition que nous avons démontrée est très générale et est seulement liée à la périodicité du spectre en énergie dans la direction transverse.

IV - D. 3. Etude de la susceptibilité du gaz d'électrons 2D avec surface de Fermi ouverte sous champ magnétique.

Le calcul complet de la susceptibilité, même avec les relations de dispersion les plus simples, n'est pas possible analytiquement. Nous n'avons pu en calculer des expressions approchées que dans quelques cas. Nous avons évalué les maxima de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ dans certaines limites, lorsque les contributions liées soit à t_b , soit à t'_b sont négligeables. Ces calculs approchés nous ont permis d'établir les idées générales du nesting quantifié [105], mais ne donnaient qu'une idée grossière de la structure de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$. Nous avons donc eu recours à des calculs d'intégration numérique pour décrire en détail les caractéristiques de χ_0 [106]. Nous rappellerons dans cet exposé les estimations analytiques que nous avons pu obtenir.

IV - D. 3. a) Un cas particulier : le nesting parfait, $t'_b = 0$

Nous avons d'abord calculé la susceptibilité dans le cas où

$$t_{\perp}(p) = -2t_b \cos p \quad (IV.53)$$

qui conduit au nesting parfait lorsque $\vec{Q} = \vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$. En présence du champ H, la susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_0^{\infty} \cos q_{\parallel} x J_0(2z \sin \frac{x}{2x_0}) \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \quad (IV.54)$$

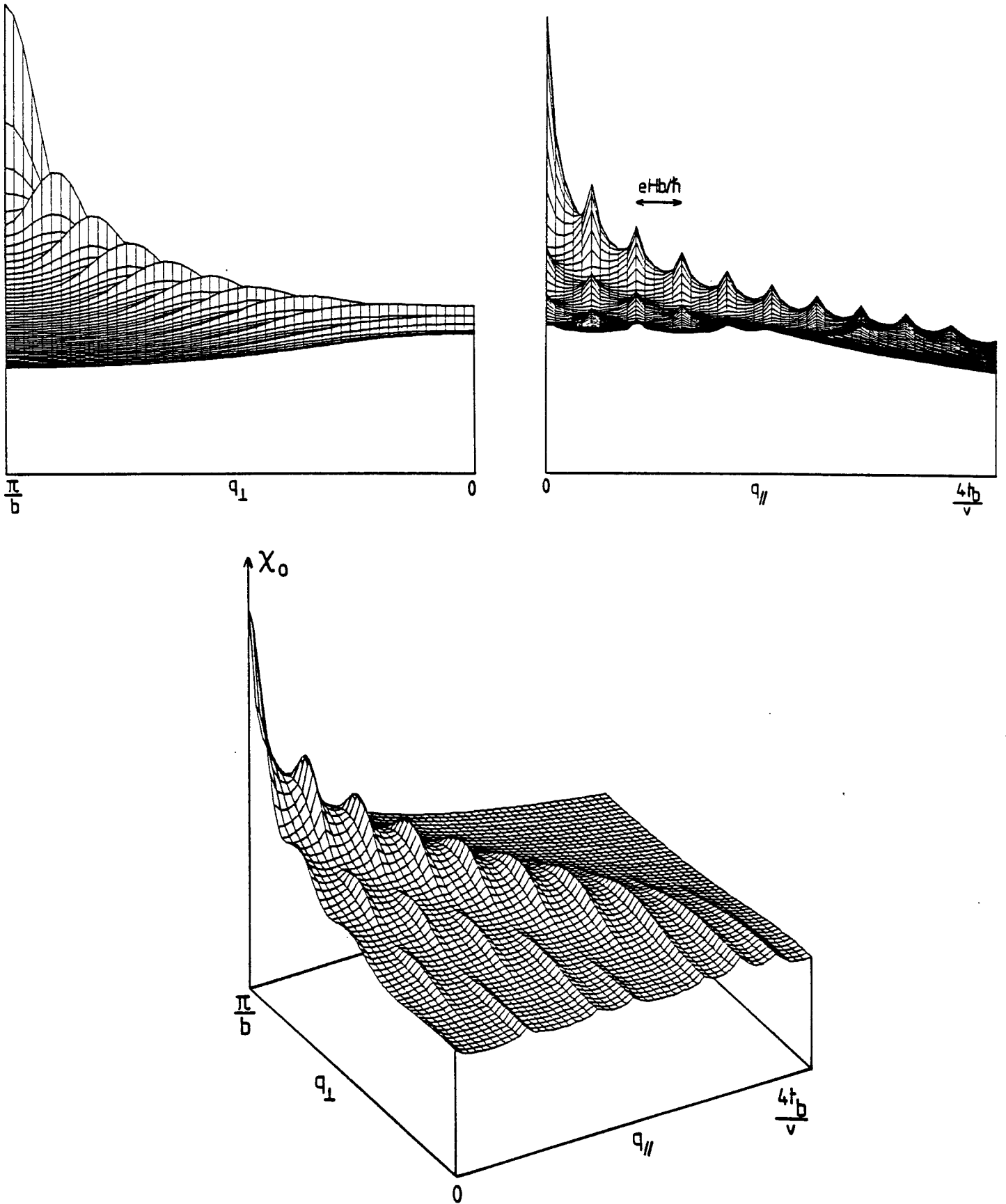
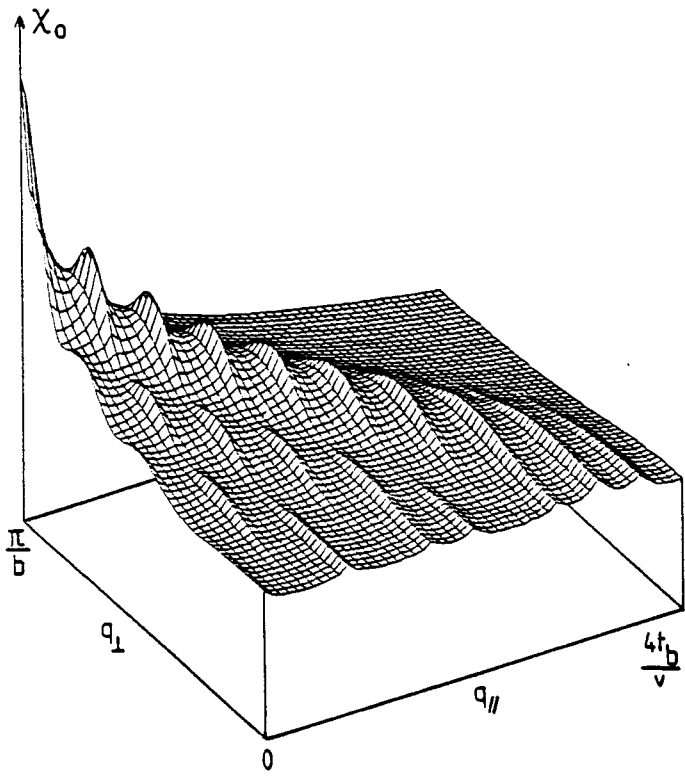
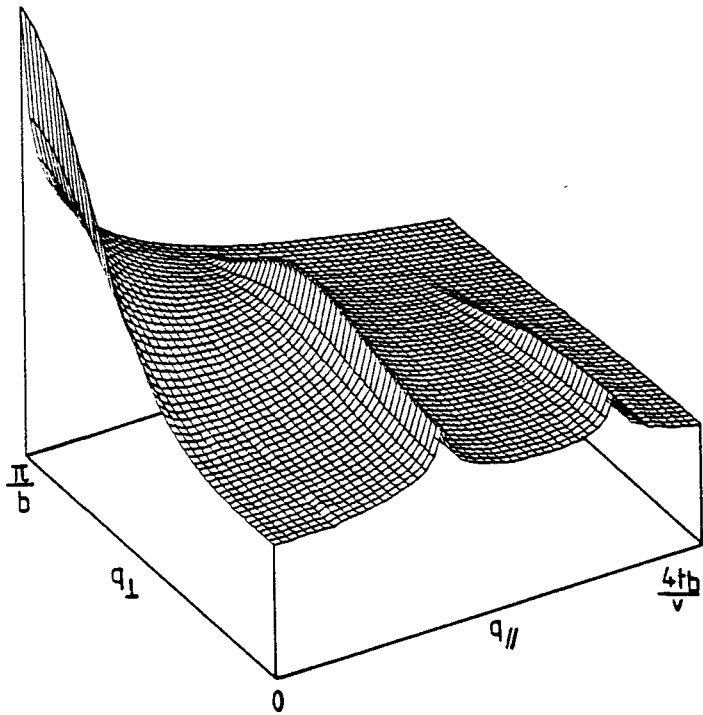
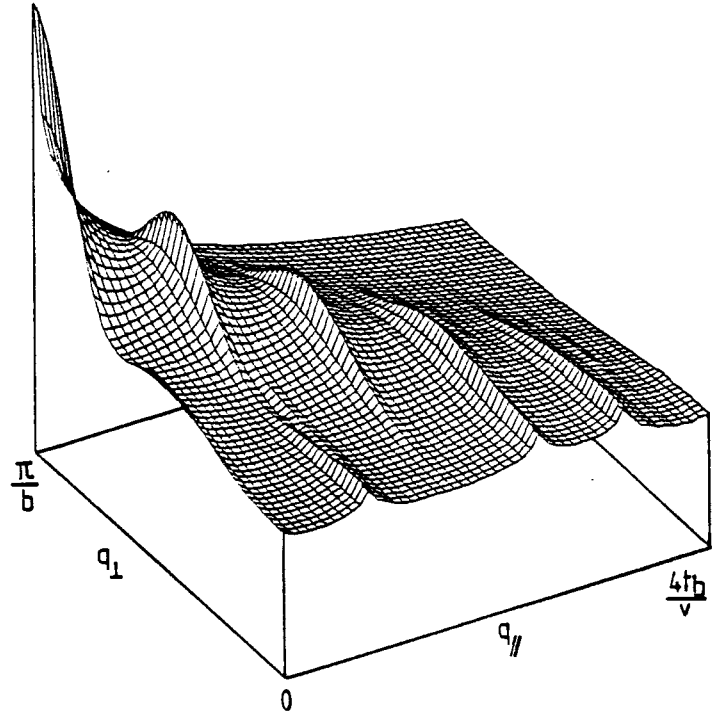


Figure 40 : Susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ en fonction des deux composantes du vecteur d'onde $\vec{Q} = (2k_F + q_{\parallel}, q_{\perp})$, dans le cas $t'_b = 0$. Elle présente des pics pour des valeurs quantifiées de la composante longitudinale : $q_{\parallel} = n eHb/\hbar$. Ces pics se répartissent le long de la ligne L définie en champ nul. Chacun d'eux diverge logarithmiquement à basse température. Mais le maximum absolu est le même qu'en champ nul : $(2k_F, \pi/b)$. ($E_c/t_b = 0.4$, $T/t_b = 1.50 \pi = 0.00637$)

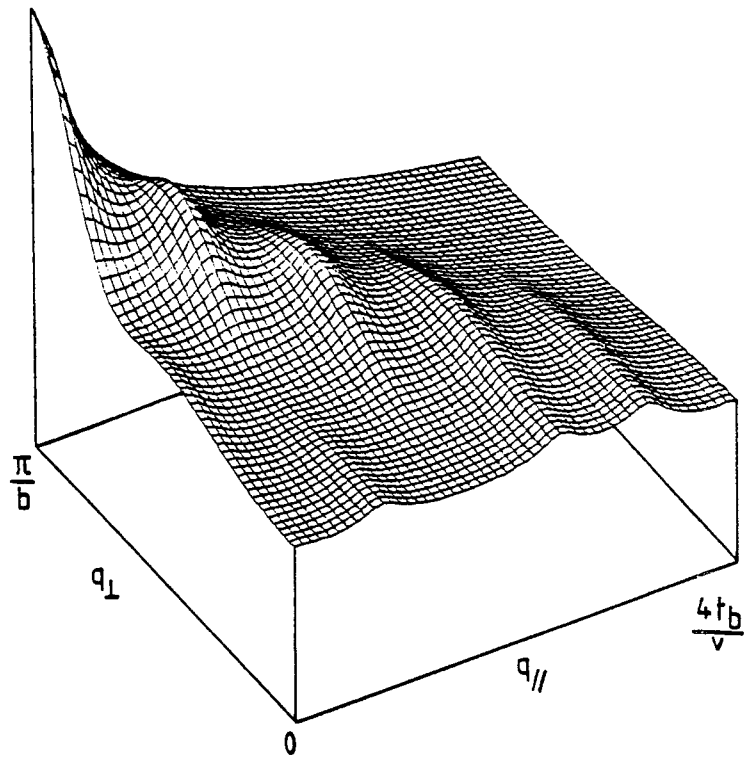
a



b



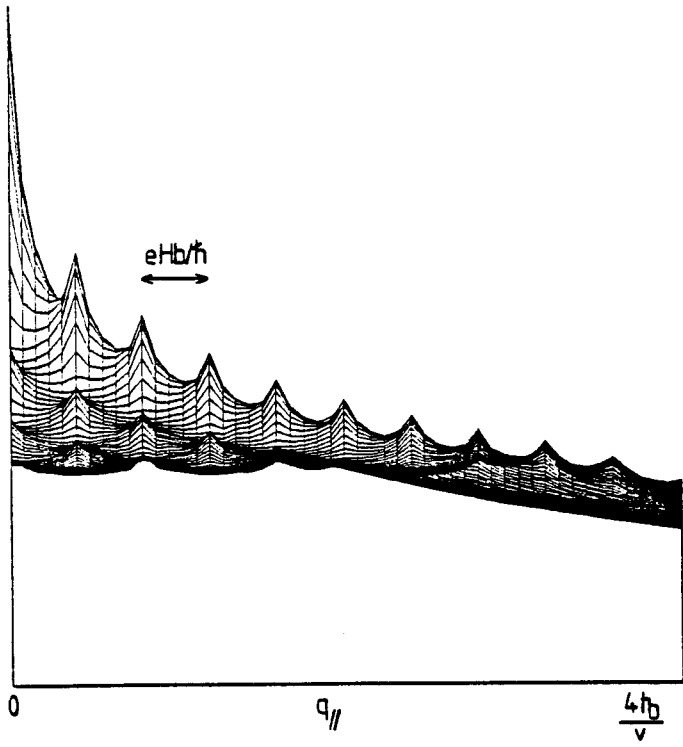
c



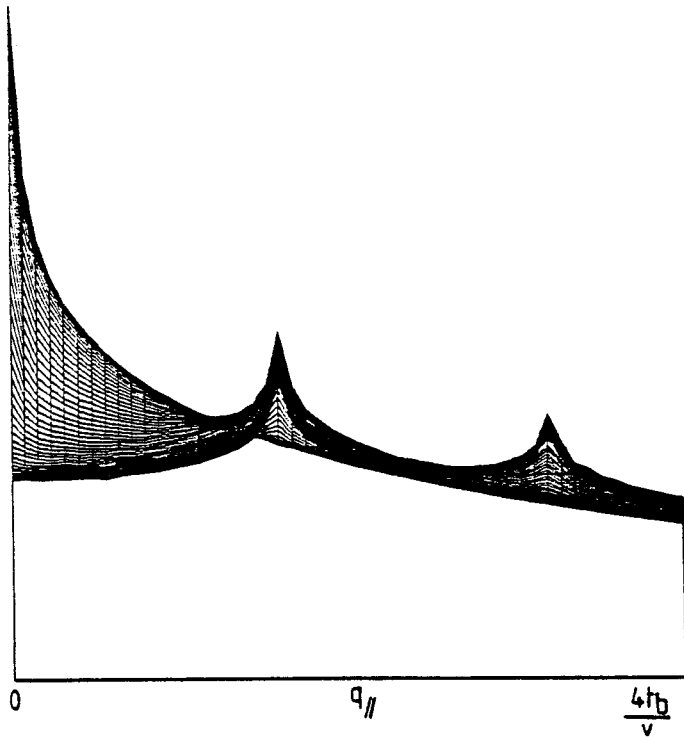
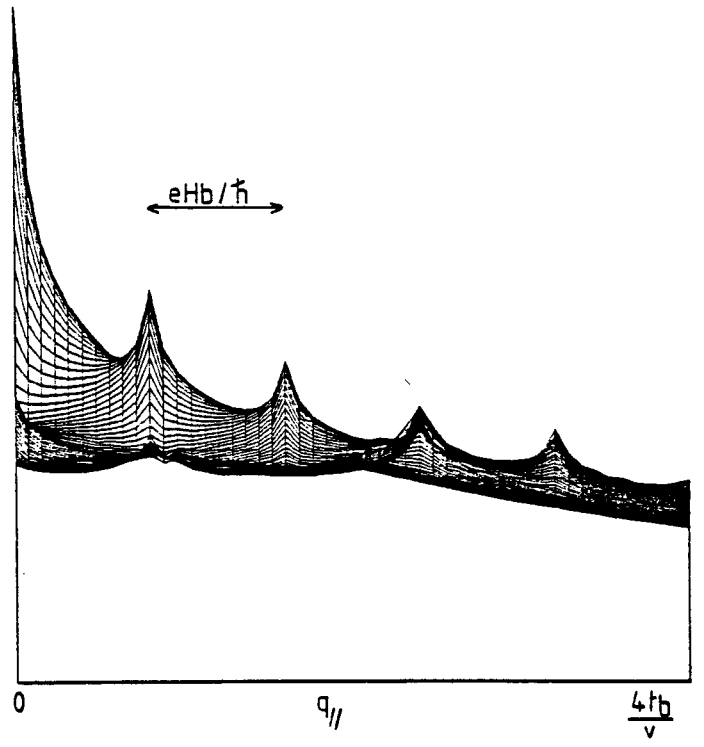
d

Figure 41 : Evolution de la susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ pour des valeurs croissantes du champ magnétique (a : $E_c/t_b = 0.4$, b : $E_c/t_b = 0.8$, c : $E_c/T_b = 1.6$; $T/t_b = 1/50 \pi = 0.00637$). La figure d montre la susceptibilité à plus haute température ($E_c/t_b = 0.8$, $T/t_b = 1/10 \pi = 0.0318$).

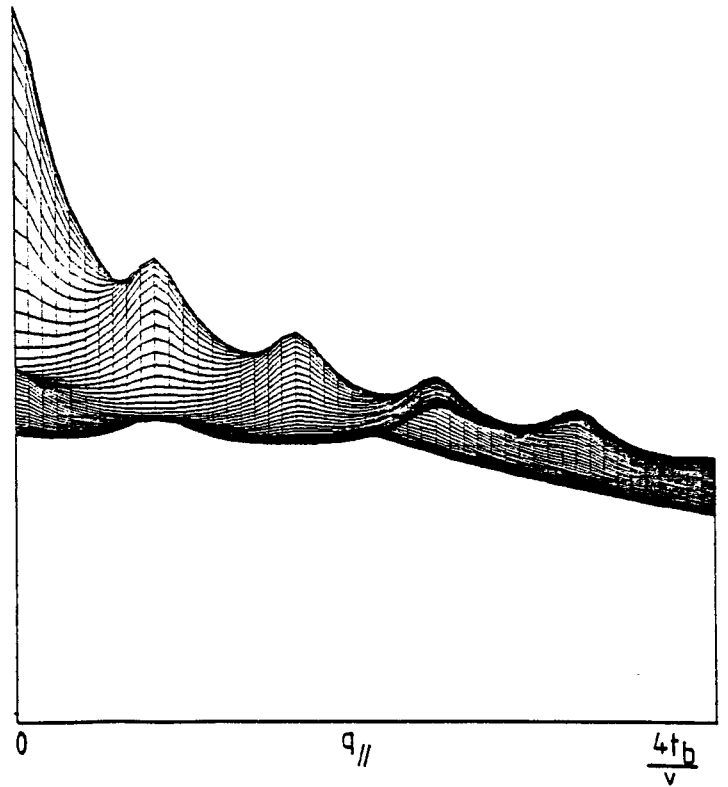
a



b



c



d

Coupes des figures 41 le long de l'axe $q_{//}$. Nous avons vérifié avec un pas plus petit, que, à température finie, la variation de x_0 est quadratique autour de chaque maximum.

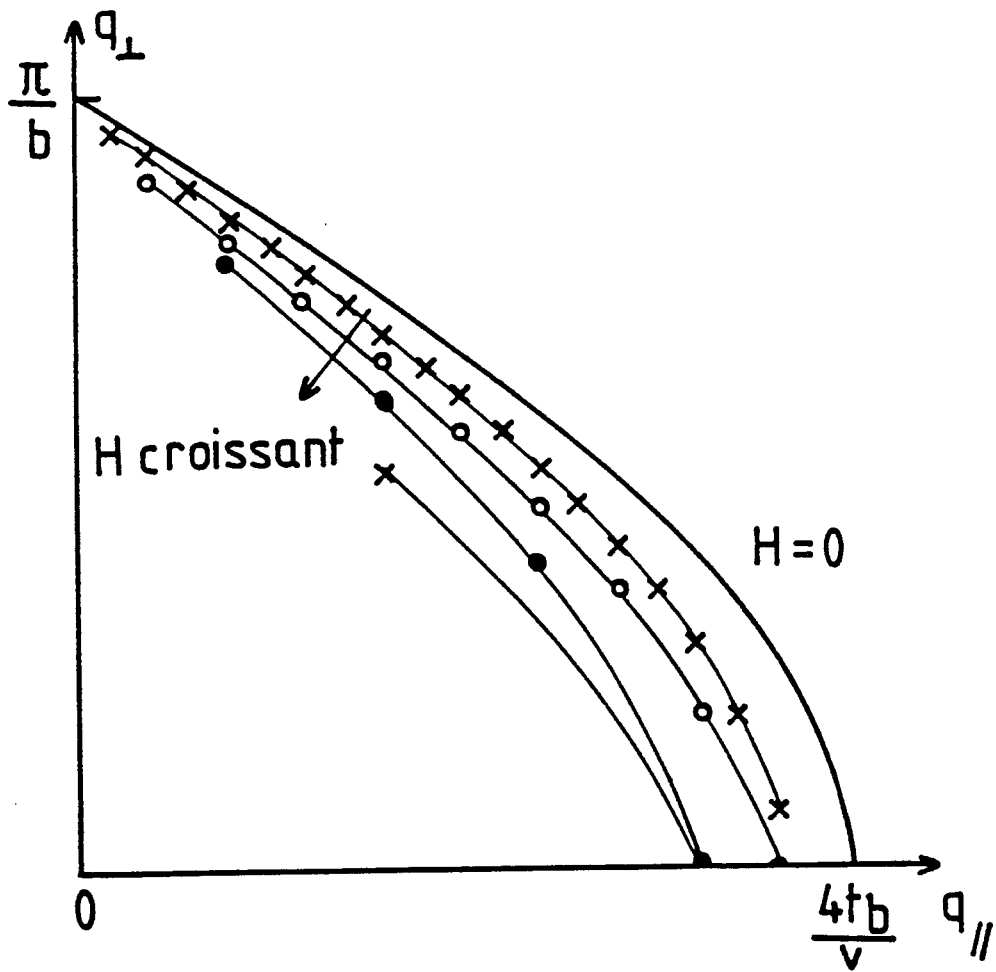


Figure 42 : Position des maxima de la susceptibilité sous champ H , dans le plan $(q_{\parallel}, q_{\perp})$.
En champ faible, les maxima sont proches de la ligne continue L définie en champ nul et s'en écarte quand H augmente : la condition géométrique de tangence des deux nappes de la surface de Fermi devient mauvaise pour décrire le nesting quantifié.

$$\text{avec } z = q_b x_0 = \frac{4t_b}{eHvb} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} \quad \text{et } x_T = v/2\pi T.$$

Nous avons calculé numériquement cette intégrale. Les figures 40 et 41 montrent l'évolution de la susceptibilité lorsqu'un champ est appliqué. Ainsi que nous l'avons prédit, des maxima apparaissent dont la position longitudinale $q_{//}$ est strictement quantifiée $q_{//} = neHb$. Nous avons estimé analytiquement l'amplitude de ces pics. Nous trouvons, lorsque $q_{//} = neHb$,

$$x_0(q_{//} = neHb, q_{\perp}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{4k_F}{q_b} - J_n^2(z) \ln \frac{\pi T}{eHvb} \right\} \quad (\text{IV.55})$$

où J_n est la fonction de Bessel cylindrique d'ordre n . Cette expression est fonction oscillante de z et présente plusieurs maxima correspondant aux maxima successifs de J_n . Cette succession de maxima est bien visible sur la figure 40. La susceptibilité présente son maximum principal (toujours lorsque $q_{//} = neHb$) pour le vecteur d'onde $q_{//}$ tel que $J_n(z)$ atteigne son maximum absolu :

$$z = \frac{4t_b}{eHvb} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} \approx n \left(1 + \left(\frac{3\pi}{4n} \right)^{2/3} \right)^{1/2}$$

Pour un champ donné, il y a donc une série principale de maxima dont nous avons vérifié par ailleurs que la position est proche de la ligne continue L de maxima relatifs en champ nul. L'estimation analytique des coordonnées de ces maxima est très bonne (figure 42).

$$\begin{aligned} q_{//} &= neHb \\ q_{\perp} &= \frac{2}{b} \text{Arcos} \left\{ \frac{neHbv}{4t_b} \left(1 + \left(\frac{3\pi}{4n} \right)^{2/3} \right)^{1/2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{IV.56})$$

La position de ces pics s'écarte de plus en plus de la ligne L lorsque le champ augmente. Ils sont situés sur la ligne L_H d'équation :

$$\frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} = q_{//} \left(1 + \left(\frac{3\pi eHb}{4q_{//}} \right)^{2/3} \right)^{1/2} \quad (\text{IV.57})$$

L'expression IV.54 montre que la divergence logarithmique est restaurée à basse température lorsque $q_{//} = neHb$. Et cette structure en maxima disparaît à haute température, lorsque T devient de l'ordre de $eHvb$. Par ailleurs, nous avons estimé, à $T = 0$, l'évolution de la susceptibilité au voisinage de $q_{//} = neHb = n/x_0$. Nous avons vérifié que la divergence était aussi logarithmique (Appendice E).

$$\chi_0(q_{//} = n/x_0, q_{\perp}, H, 0) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{4k_F}{q_b} - J_n^2(z) \ln \gamma |q_{//} x_0 - n| \right\} \quad (IV.58)$$

En conclusion, la susceptibilité du gaz d'électrons décrit par la relation de dispersion IV.53 présente sous champ une structure nouvelle constituée d'un ensemble de maxima (ou de non analyticités à $T = 0$) à des valeurs quantifiées de $q_{//}$. Néanmoins le vecteur de meilleur nesting est toujours le vecteur transverse \vec{Q}_t . Le vecteur d'instabilité de la phase métallique n'est donc pas perturbé par le champ magnétique. Toutefois cette étude est intéressante car elle est plus simple que dans le cas $t'_b \neq 0$ et elle nous a permis de faire un certain nombre d'estimations analytiques. On s'attend maintenant à ce que le terme $t'_b \neq 0$ détruise le maximum absolu situé à \vec{Q}_t . Le vecteur d'onde de meilleur nesting dépend alors du champ magnétique :

IV - D. 3. b) Le nesting imparfait, $t'_b \neq 0$

Les résultats les plus intéressants sont obtenus avec une relation de dispersion qui supprime le nesting parfait, comme celle que nous avons utilisée

$$t_{\perp}(p) = - 2t_b \cos p - 2t'_b \cos 2p \quad (IV.59)$$

Dans ce cas la susceptibilité s'écrit, à partir de la formule IV.48 :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \cos(q_{//}x - 2z \cos p \sin \frac{x}{2x_0} - 2z' \cos 2p \sin \frac{x}{x_0}) \quad (IV.60)$$

$$\text{avec } z = q_b x_0 = \frac{4t_b}{eHvb} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} \quad \text{et} \quad z' = q'_b \frac{x_0}{2} = \frac{2t'_b}{eHvb} \cos q_{\perp} b.$$

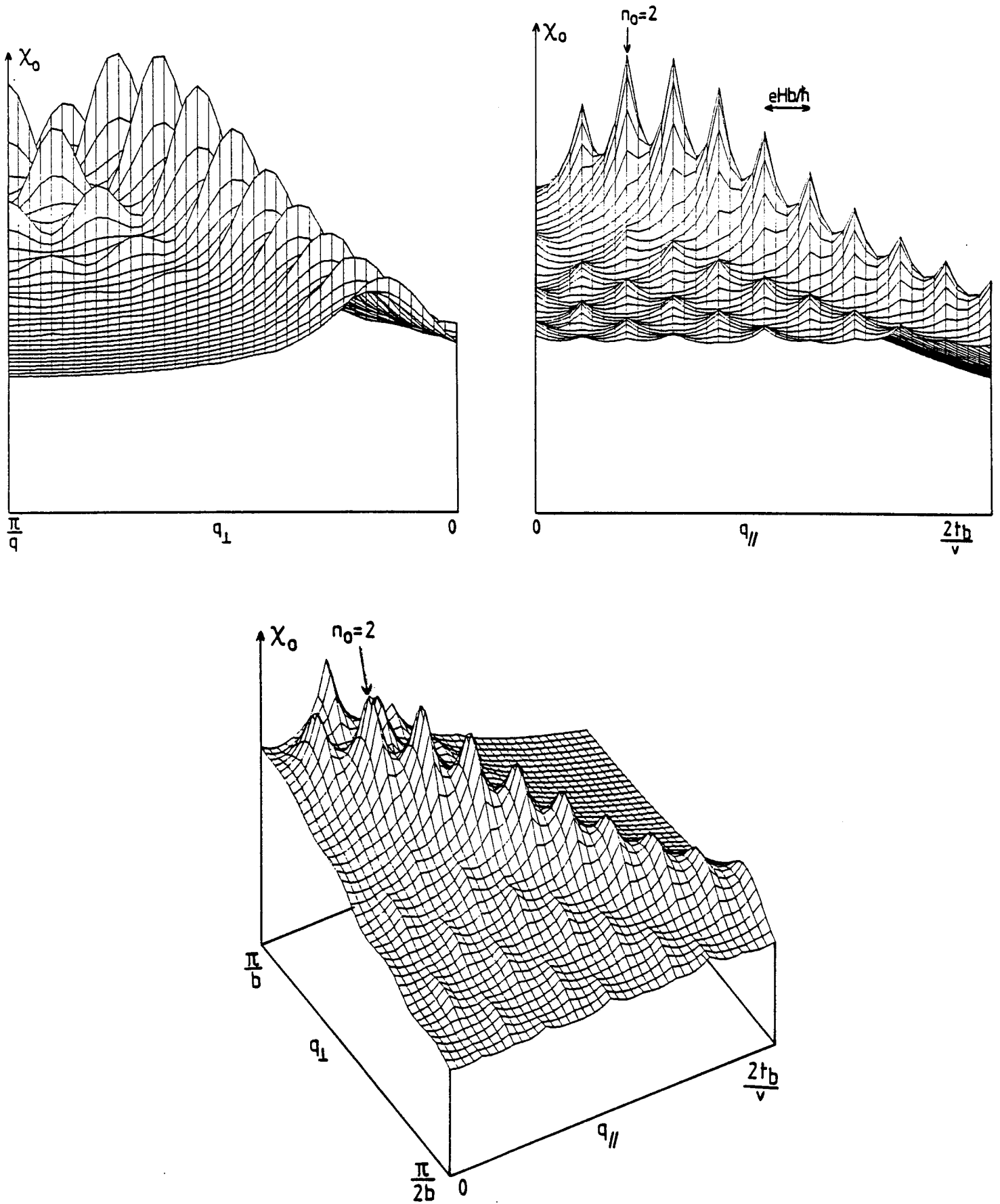


Figure 43 : Susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ lorsque $t'_b \neq 0$. Elle présente des maxima pour des valeurs quantifiées de $q_{\parallel} = n eHb/\hbar$. Le maximum de meilleur nesting est maintenant différent du vecteur \vec{Q}_t et il varie avec le champ magnétique (ici $n_0 = 2$, $t'_b/t_b = 1/5$, $T/t'_b = 1/10\pi$, $E_c/t'_b = 1$).

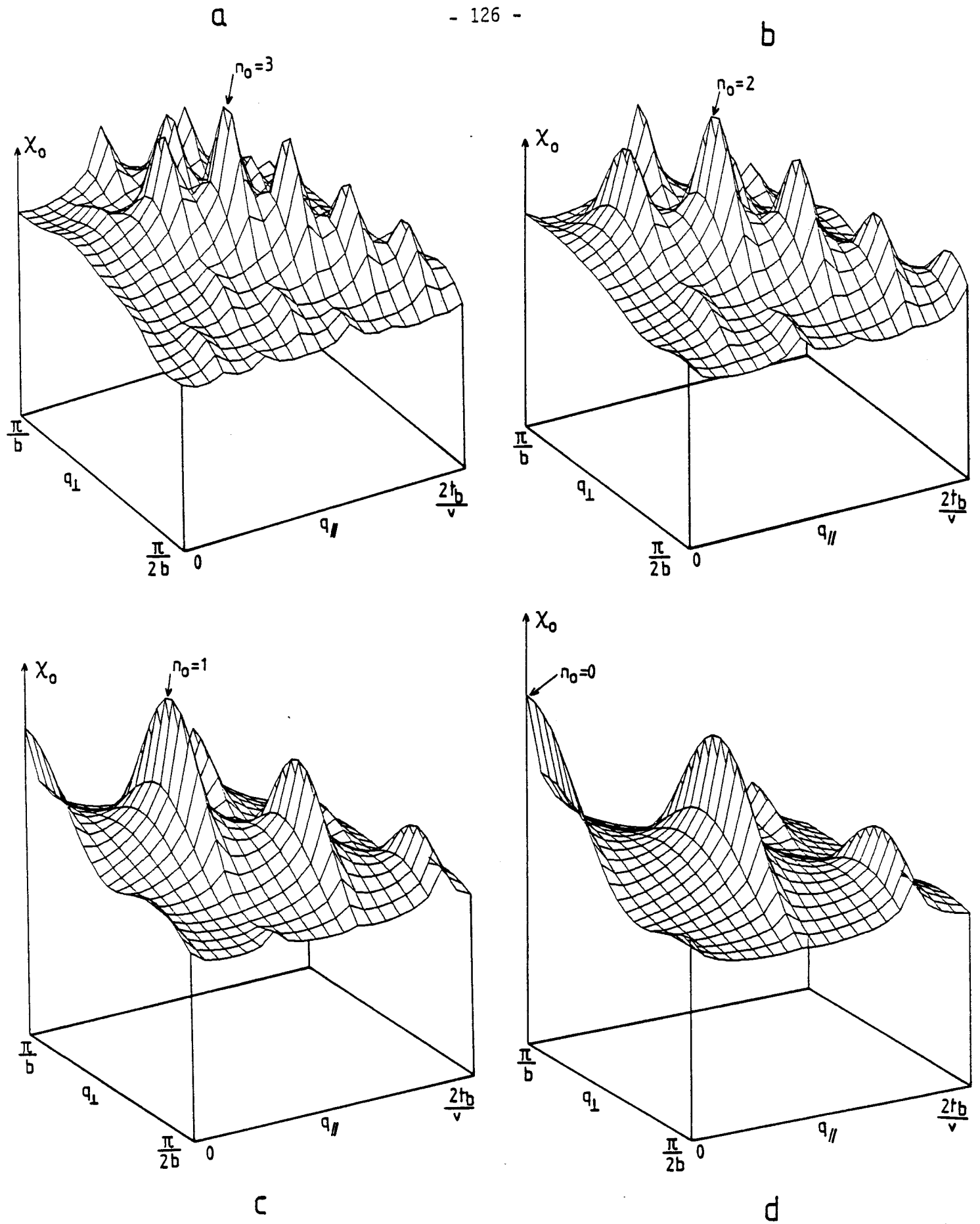


Figure 44 : $x_0(\vec{Q}, H, T)$ pour des valeurs croissantes du champ H.
 ($t'_b/t_b = 0.4$, $T/t'_b = 1/20\pi$, $E_c/t'_b = 0.75$ (a), 1. (b), 1.5 (c), 2. (d))
 Le maximum absolu est indexé par n_0 .

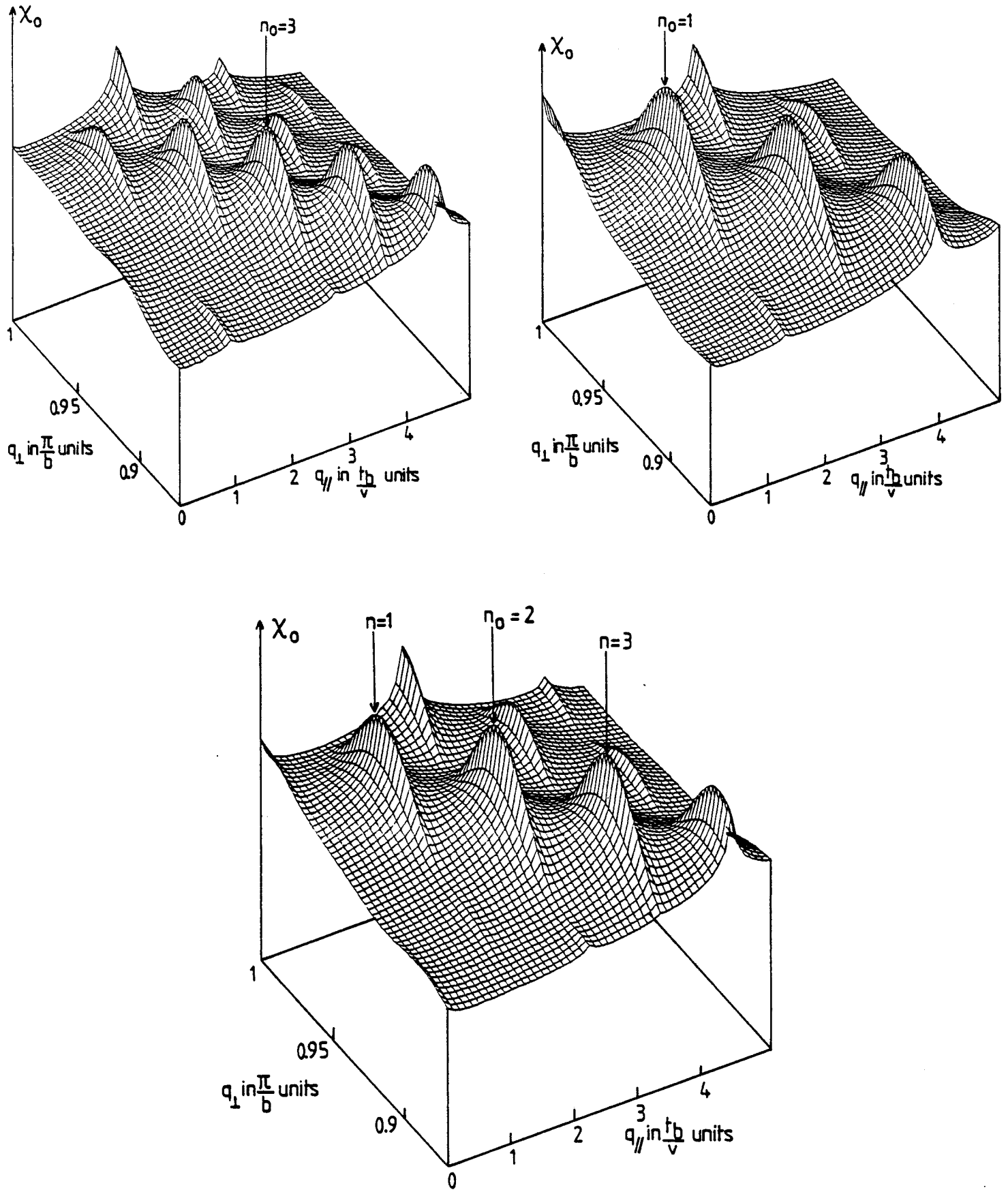


Figure 45 : $x_0(\vec{Q}, H, T)$ pour différentes valeurs du champ. Le maximum absolu est indexé par n_0 ($t'_b/t_b = 1/10$, $T/t'_b = 1/40\pi$; $E_c/t'_b = 1.368$ ($n_0 = 1$), $E_c/t'_b = 1.158$ ($n_0 = 2$), $E_c/t'_b = 0.947$ ($n_0 = 3$))

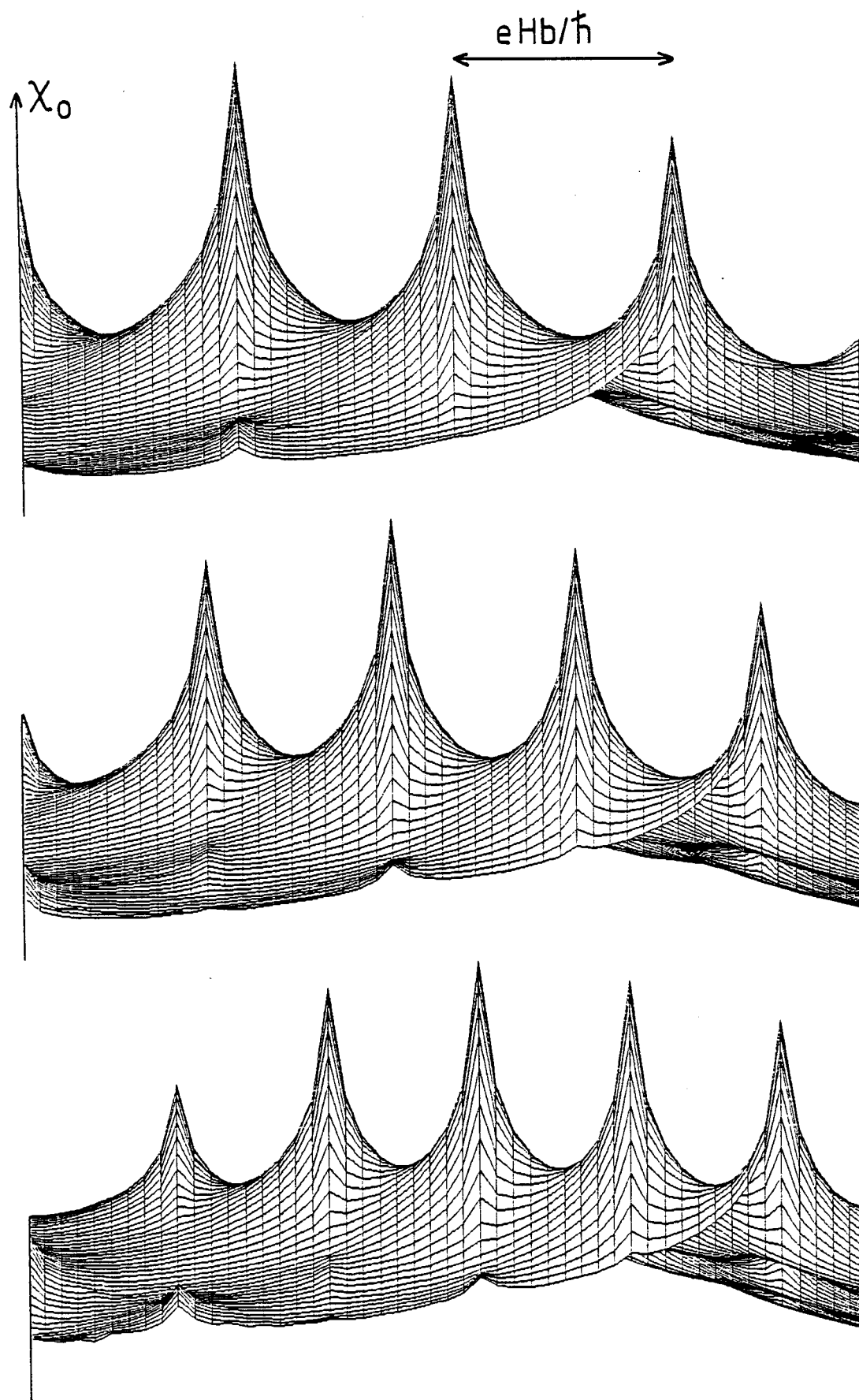


Figure 45 bis : coupes de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ le long de q_y pour des valeurs décroissantes du champ magnétique

La résolution de cette intégrale est beaucoup plus difficile que dans le cas précédent. Des estimations peuvent être faites lorsque $z \gg z'$ ou $z' \gg z$ mais la région physiquement intéressante, celle de meilleur nesting, est telle que $z \approx z'$ et qu'aucun terme ne peut être négligé. Nous avons étudié numériquement cette expression en détail. Le calcul numérique de cette intégrale double est long, d'autant plus que le champ est faible (n grand) et donc que l'intégrande varie plus. Il n'est donc possible d'explorer qu'une partie du domaine de variation de \vec{Q} . Le calcul d'une intégrale dépend de sept paramètres: $T, H, t_b, t'_b, d, q_{//}, q_{\perp}$. Ce calcul numérique est indispensable pour confirmer les points qualitatifs que nous avons d'abord développés avec des approximations analytiques et seulement dans certaines limites éloignées de la région physiquement la plus intéressante [105]. La susceptibilité sous champ présente les caractéristiques suivantes :

. Comme dans le cas précédent, $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ présente une série de maxima dont l'abscisse est quantifiée $q_{//} = nHb$ (figure 43). Comme on s'y attendait, la divergence au vecteur transverse \vec{Q}_t a été coupée par l'introduction du terme t'_b . Le vecteur du meilleur nesting est maintenant différent de \vec{Q}_t et surtout il dépend du champ $\vec{Q}(H)$ avec

$$q_{//} = n_0 eHb$$

Ce résultat confirme le mécanisme du nesting quantifié.

. Pour une valeur fixée du champ, une série principale de maxima s'est développée à partir de la ligne continue L de maxima relatifs en champ nul, et elle s'en écarte quand le champ augmente. Sur les figures 43 - 45, cette série est indiquée par les flèches et chaque maximum est indexé par une valeur du nombre quantique n . On note n_0 la valeur du nombre quantique n qui correspond au maximum absolu. $n_0 = 2$ sur la figure 43.

. la position $q_{//}$ de ces maxima évolue linéairement avec le champ. lorsque celui-ci devient supérieur à une valeur critique, le maximum absolu saute d'une nappe caractérisée par n_0 à la suivante indexée par $n_0 - 1$. Inversement, si H augmente chacun des pics $n_0, n_0 + 1, n_0 + 2 \dots$ devient le maximum absolu.

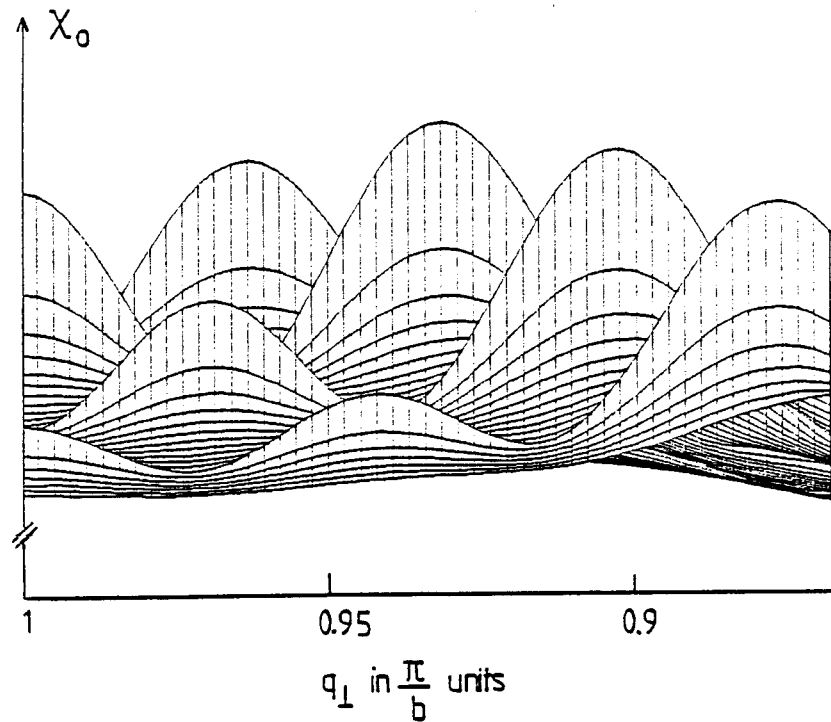


Figure 45 ter : Coupe de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ le long de q_{\perp} ($n_0 = 2$)

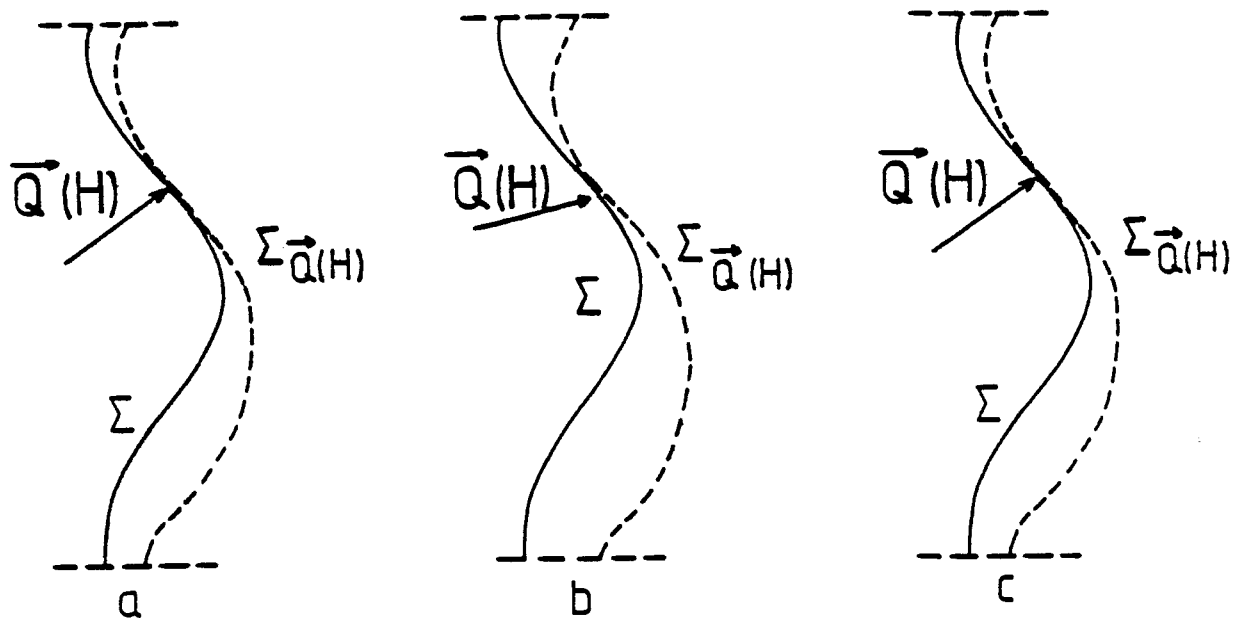


Figure 46 : Mécanisme du nesting quantifié. La surface A comprise entre une nappe de la surface de Fermi Σ et l'autre nappe translatée de \vec{Q} , $\Sigma + \vec{Q}$, est quantifiée et croît linéairement avec le champ magnétique $A = 2\pi neH/\hbar$. Le vecteur de nesting varie pour autoriser cette augmentation (a \rightarrow b). Lorsque le nesting devient trop mauvais, n saute de une unité, pour revenir à un meilleur nesting (b \rightarrow c).

Ce résultat se comprend de la façon suivante : à quantum fixé n_0 , le vecteur d'onde $q_{//}$ varie linéairement avec le champ pour que l'aire Λ , définie par les deux nappes de la surface de Fermi, reste quantifiée : $A = n 2\pi eH/\hbar$. Comme $q_{//}$ grandit, le nesting de la surface de Fermi devient mauvais. Quand il l'est trop, le nombre quantique n_0 décroît d'une unité pour réduire $q_{//}$ (et donc le nombre de porteurs effectifs) (figure 46).

. Les figures 43 -45 montrent d'autres maxima relatifs hors de la série principale et qui ne deviennent jamais maximum absolu. Ils correspondent à un moins bon nesting de la surface de Fermi. Par exemple, le long de la ligne $q_{\perp} = \pi/b$, il n'y a que des pics correspondant à des valeurs de n paires. La raison en est que, pour ces vecteurs de nesting, la poche de porteurs se sépare en deux parties égales. Cette symétrie exclut les valeurs impaires de n . Ceci est confirmé par le calcul analytique, possible lorsque $q_{\perp} = \pi/b$. Nous trouvons en appendice E :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{v k_F}{t_b} - J_m^2(z'(0)) \ln \frac{\pi T}{eHvb} \right\}; \quad q_{//} x_0 = n = 2m \quad (\text{IV.61})$$

avec $z'(0) = -\frac{2t'_b}{eHbv}$. Il est aussi possible d'estimer χ_0 lorsque $q_{\perp} = \pi/2b$.

Dans ce cas,

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{v k_F}{t_b \cos \frac{\pi}{4}} - J_n^2\left(z\left(\frac{\pi}{2}\right)\right) \ln \frac{\pi T}{eHvb} \right\} \quad (\text{IV.62})$$

avec $z\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{4t_b}{eHbv} \cos \pi/4$. Dans les autres cas, le calcul de χ_0 fait intervenir les deux paramètres non nuls $z(q_{\perp}b)$ et $z'(q_{\perp}b)$. Lorsque $z' \gg z$ et $z \ll z'$ il est possible de donner une expression encore plus approximative de χ_0 (Appendice E). Dans la région la plus intéressante, autour du vecteur de meilleur nesting, $z \approx z'$, nous n'avons qu'une estimation très approchée de χ_0 .

. Nous avons montré que chaque pic diverge logarithmiquement à basse température. Ainsi chaque pic présente les caractéristiques du nesting parfait. La restauration de la divergence logarithmique par le champ peut être comprise de la façon suivante : en champ nul, la susceptibilité du gaz d'électrons 2D, $\chi_0(q_{//}, q_{\perp}, 0, T)$ met en jeu deux degrés de liberté continus, les composantes du vecteur d'onde. Par conséquent, la susceptibilité n'est pas

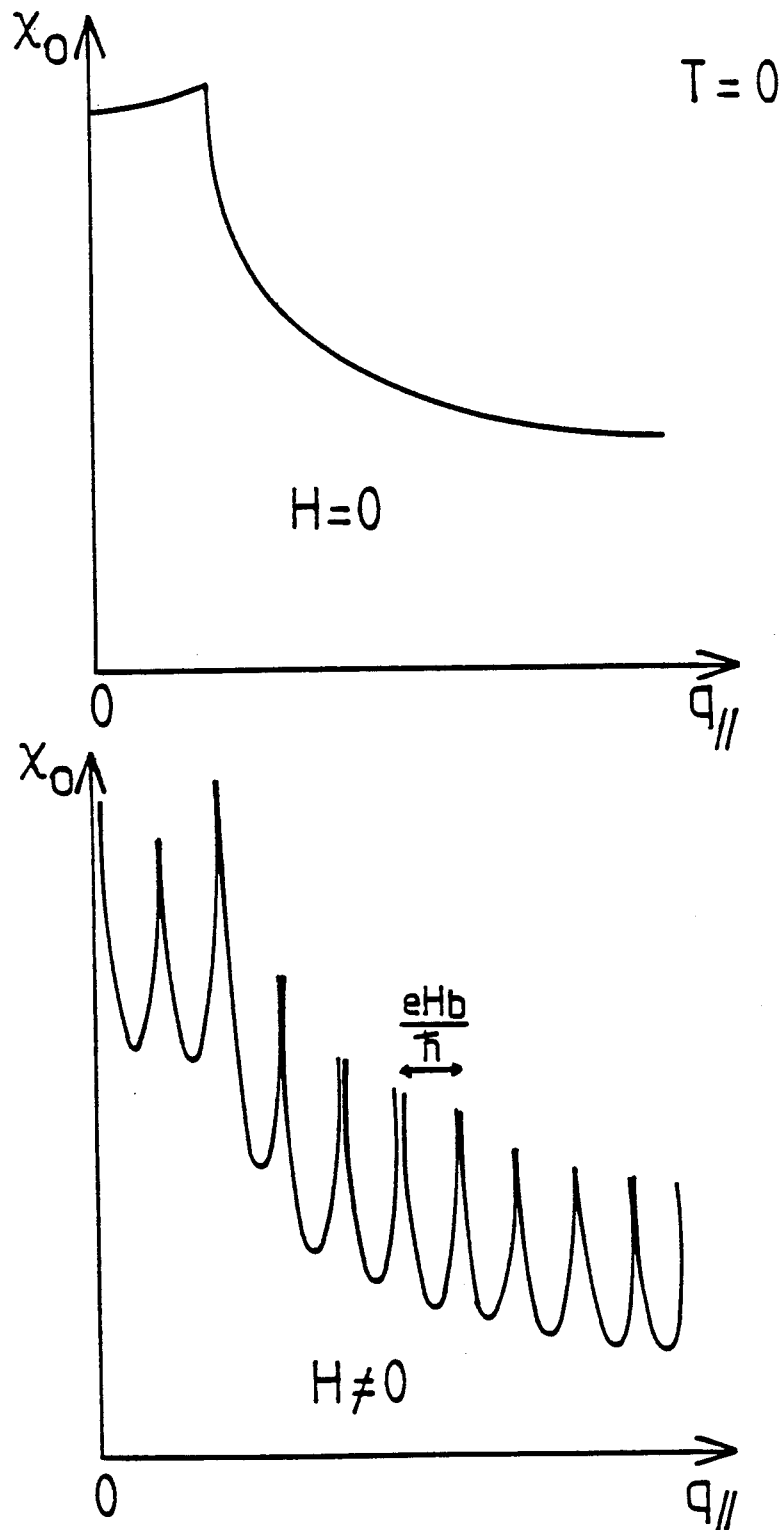


Figure 47 : L'application du champ magnétique sur le gaz d'électrons 2D avec surface de Fermi ouverte bouleverse la structure de $x_0(Q)$. A température nulle, on obtient, dès que le champ H est non nul, un peigne de divergences logarithmiques. Cette "catastrophe" est de même nature que la discrétisation du spectre des électrons libres.

divergente à basse température sauf dans un cas très particulier, celui du nesting parfait. Lorsqu'un champ magnétique est appliqué, le vecteur d'onde n'est plus un bon nombre quantique. A cause de la quantification des orbites électroniques, une seule composante du vecteur d'onde reste un bon nombre quantique [74], l'autre nombre quantique étant maintenant un entier n . Ainsi, pour chaque valeur de n , il ne reste plus qu'un seul degré de liberté continu, de sorte que $\chi_0(n, q_{\perp}, H, T)$ retrouve une divergence logarithmique. Cette "unidimensionnalité" est donc intimement liée à la quantification des orbites électroniques [104].

Par conséquent, à température nulle, le champ magnétique aussi faible soit-il, bouleverse la structure de la susceptibilité puisqu'il induit un "peigne" de divergences logarithmiques (figure 47). Dans le cas 2D que nous étudions pour l'instant, cette structure nouvelle apparaît dès que H est non nul : il n'y a pas de champ seuil.

La restauration de la divergence logarithmique étant due à la quantification des orbites électroniques, cette structure discontinue de $\chi_0(\vec{Q}, H)$ n'est pas étonnante. Elle est exactement de même nature que la discrétisation en niveaux de Landau du spectre des électrons libres par le champ magnétique. (plus généralement, dès que la surface de Fermi est fermée).

. Pour une surface de Fermi ouverte, il est encore possible de définir une fréquence "cyclotron", donc une énergie caractéristique du champ magnétique. $E_c = \hbar\omega_c = \hbar v / x_0 = eHvb$. La période cyclotron ainsi définie est égale au temps mis par l'électron pour parcourir une nappe de la surface de Fermi.

Le "contraste" de la structure que nous avons décrite diminue avec la température (figure 41) et nous avons trouvé que les maxima disparaissent si la température devient supérieure à l'énergie cyclotron, plus précisément si :

$$E_c / k_B T \lesssim 2\pi \quad (1)$$

Cette condition est tout à fait analogue à la condition d'observation des effets quantiques dans les métaux (Effets Schubnikov-de Haas ou de Haas-van Alphen), effets liés à la structure en niveaux de Landau du gaz électronique.

De façon analogue, à cause des impuretés, il y a un libre parcours

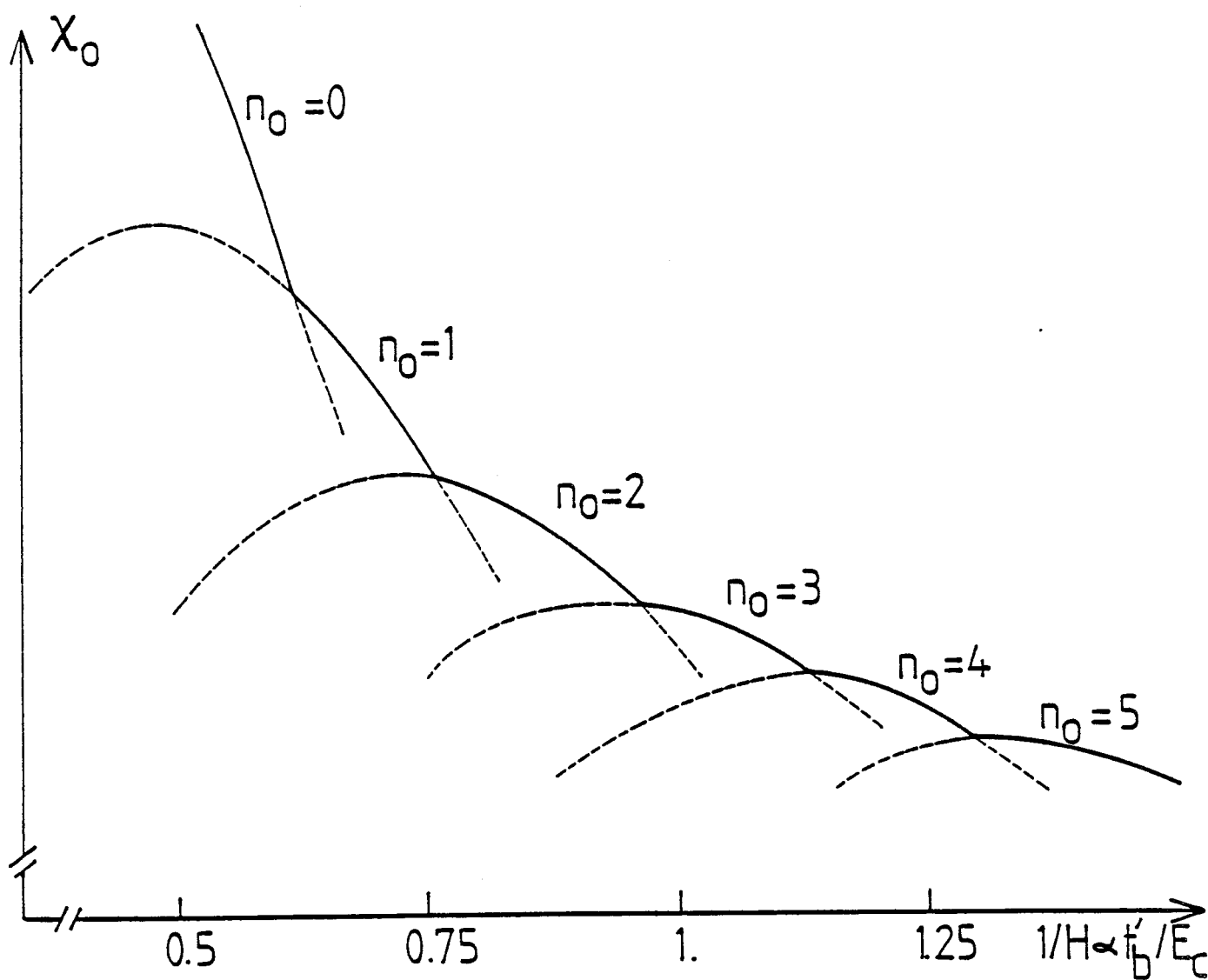


Figure 48

Variation du maximum absolu de $\chi_0(Q, H)$ en fonction de $1/H$ (l'échelle est en unités de t'_b/E_c). C'est une succession de segments caractérisés par des valeurs successives du nombre quantique n_0 . Aux champs de transition entre les différents segments, le vecteur d'onde varie de façon discontinue ($t'_b/t_b = 0.1$, $T/t'_b = 1/40\pi$)

moyen ℓ pour le mouvement des électrons. La susceptibilité s'écrit alors :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d^\infty e^{-x/\ell} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \cos(q_{//}x - 2z \cos p \sin \frac{x}{2x_0} - 2z' \cos 2p \sin \frac{x}{x_0})$$

La structure en pics de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ n'existe que si :

$$\omega_c \tau \gtrsim 1 \quad (2)$$

où $\tau = v/\ell$ est un temps moyen de collision. Ces deux conditions 1 et 2 sont habituelles pour l'observation d'effets quantiques.

IV - D. 3. c. Evolution du maximum de la susceptibilité en fonction du champ magnétique.

Pour chaque valeur du champ, nous avons cherché la valeur du maximum absolu $\chi_0(H, T)$ de la susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$. Sur la figure 48, ce maximum a été tracé en fonction du champ magnétique. La courbe obtenue est une succession de segments, chaque segment étant caractérisé par les valeurs du nombre quantique n_0 . Ce résultat illustre le mécanisme que nous avons développé du nesting quantifié. Remarquons par ailleurs que les petits nombres quantiques sont atteints lorsque l'énergie cyclotron est du même ordre de grandeur que t'_b , énergie caractéristique qui décrit la déviation au nesting parfait :

$$E_c \sim t'_b \longleftrightarrow n = 1$$

Les effets que nous décrivons ici peuvent donc être observables pour des champs magnétiques modérés ($t'_b \sim 10$ K dans les sels de Bechgaard).

IV - D. 3. d) Variation du vecteur de meilleur nesting sous champ magnétique.

Nous savons déjà, de façon rigoureuse, que la composante $q_{//}$ du vecteur d'onde varie linéairement avec le champ, sur un ensemble de droites dont la pente est quantifiée. Pour connaître l'évolution de $q_{//}$ avec le champ, il faut donc connaître la séquence des champs critiques qui séparent les différentes branches de la susceptibilité et pour lesquels le vecteur d'onde saute de la droite n_0 à la droite $n_0 \pm 1$. De la séquence de ces champs critiques, dépend

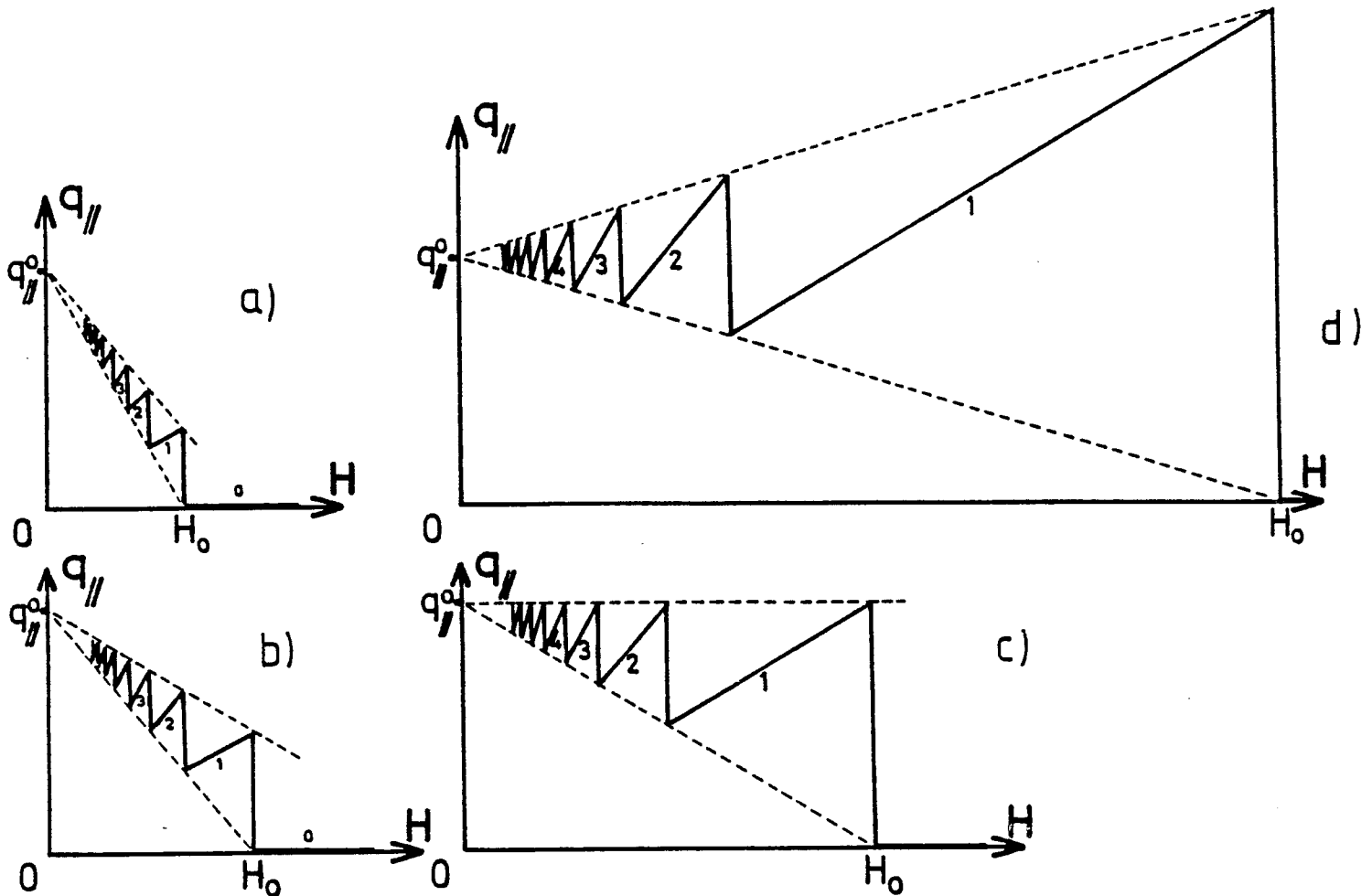


Figure 49

Les différentes évolutions possibles, *a priori*, de la composante longitudinale $q_{||}$ du vecteur de meilleur nesting, en fonction du champ magnétique. $q_{||}$ varie de sa position en champ nul vers $q_{||} = 0$ en champ infini, qui correspond au vecteur $(2k_F, \pi/b)$. Dans chaque sous-phase, cette évolution est linéaire : $q_{||} = n_0 eHb/H$, et discontinue d'une sous-phase à la suivante. Selon la séquence de champs critiques $H_n = H_F/(n+\gamma)$, l'amplitude des oscillations du vecteur d'onde peut être très différente. Elle est présentée ici pour différentes valeurs de γ Dans le modèle que nous avons étudié, c'est la première séquence qui est observée ($\gamma \sim 3$). Le vecteur d'onde ne repasse donc jamais par sa position en champ nul. ($\gamma = 3$ (a), 2 (b), 1 (c), 0.5 (d)).

crucialement l'amplitude des oscillations du vecteur d'onde, comme le montrent les figures 49. Nous avons choisi différentes séquences de la forme

$$H_n = \frac{H_f}{n + \gamma} \quad (\text{IV.63})$$

H_n étant le champ critique qui fait passer de la branche $n + 1$ à la branche n .

Le choix d'une séquence de la forme IV.63 est arbitraire et non démontré. Outre que c'est une forme classique pour ce genre de problème (cf oscillations Shubnikov-de Haas dans les métaux), nous l'avons choisie uniquement à titre indicatif pour montrer les différentes évolutions possibles du vecteur d'onde. Les figures 49 présentent la variation de $q_{//}$ pour diverses valeurs du paramètre γ . Par ailleurs, le champ fondamental H_f est relié à l'aire de la poche en champ nul :

$$H_f = \frac{q_{//}}{eb} = \frac{A}{2\pi e} \quad (\text{IV.64})$$

La connaissance du vecteur de nesting en champ nul, donc de la taille de la poche, détermine ainsi la fréquence des transitions de phase. Enfin si la variation IV.63 est vérifiée, γ exprime le rapport entre le champ fondamental H_f et le champ H_0 pour lequel la phase $n = 0$ est stabilisée. (si l'équation IV.60 n'est vérifiée qu'aux grandes valeurs de n , H_0 est obtenu par extrapolation des champs critiques pour ces valeurs élevées de n) :

$$\gamma = \frac{H_f}{H_0} \quad (\text{IV.65})$$

D'après les calculs numériques de la susceptibilité que nous avons obtenus, nous avons pu déduire l'évolution du vecteur de meilleur nesting et la séquence des champs critiques pour les petits nombres quantiques. Cette évolution est présentée sur la figure 50. Nous avons trouvé que le vecteur d'onde évolue de sa position en champ nul vers le vecteur transverse \vec{Q}_t , sans jamais repasser autour de sa position en champ nul. Par ailleurs, la séquence des premiers champs critiques semble effectivement obéir à une loi de la forme IV.63, avec $\gamma \approx 3$. L'énergie E_f associée au champ H_f est de l'ordre de $5,3 t_b'$ et l'énergie E_0 associée à H_0 est de l'ordre de $1,8 t_b'$. La taille de la poche ainsi déterminée est inférieure à ce que donnerait son estimation à $T = 0$ (ce qui est normal puisqu'à T fini, le vecteur de nesting est compris entre \vec{Q}_t et \vec{Q}_0).

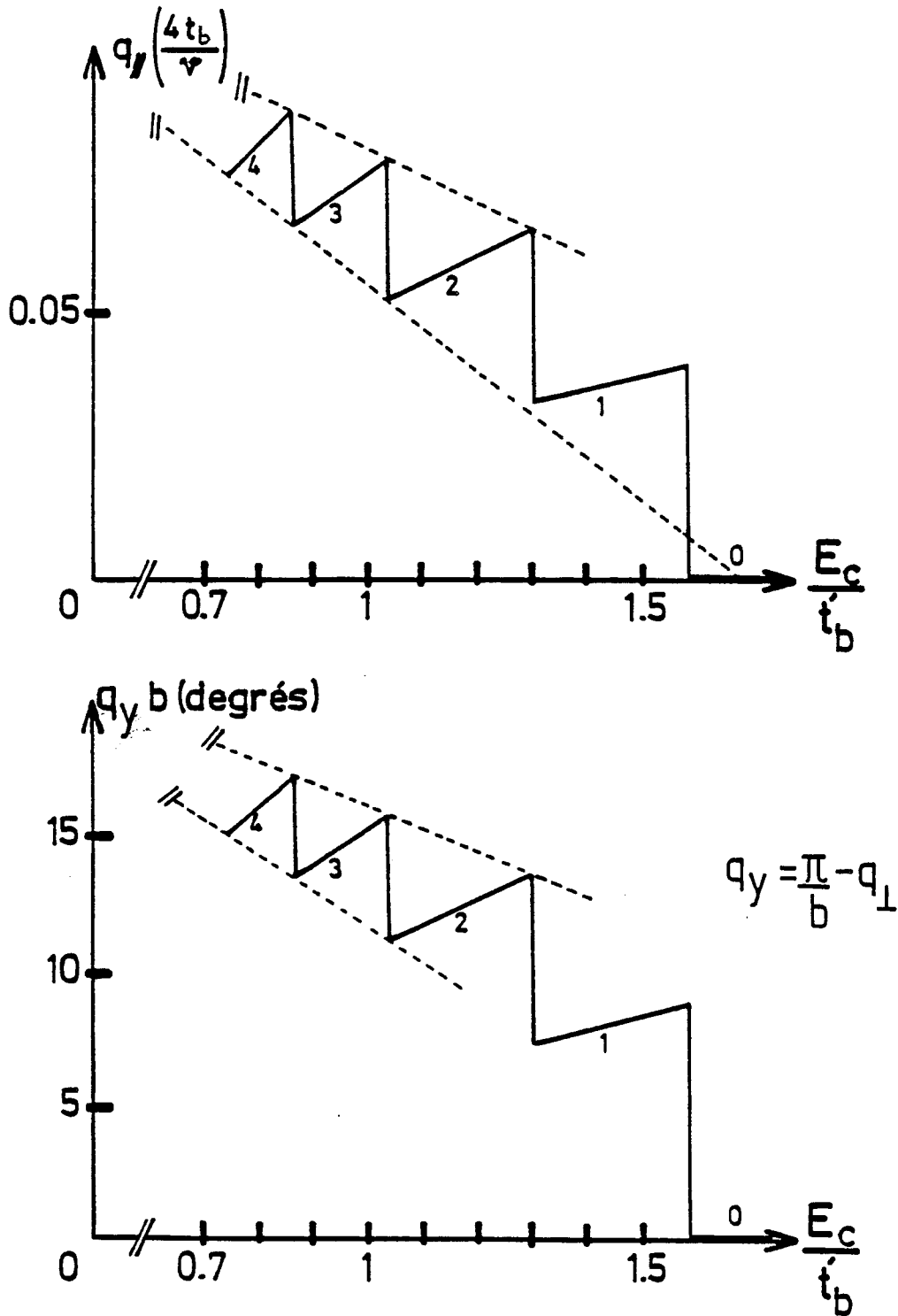


Figure 50

Evolution sous champ des deux composantes du vecteur de meilleur nesting, déduite de notre modèle. La composante $q_{||}$ varie linéairement dans chaque sous-phase. Pour q_{\perp} , la variation linéaire est une approximation. Dès que $n > 2$, les champs critiques semblent varier selon la forme $H_n = H_c / (n + \gamma)$, de sorte que les valeurs extrêmes de $q_{||}$ et q_{\perp} s'alignent sur deux droites (tirets). L'extrapolation de la droite inférieure pour $q_{||}$ définit le champ H_0 .

L'évolution du vecteur de nesting que nous avons trouvée est donc proche de la séquence a) présentée figure 49. Ce résultat a des conséquences intéressantes quant à l'évolution du nombre de porteurs sous champ ($N = q_{//}/2\pi b$) dont on s'attend donc à ce qu'il décroisse d'une phase n à la suivante ($n - 1$) sans jamais repasser par sa valeur en champ nul. Toutefois, nous ne savons pas si cette évolution est propre au modèle et au choix des paramètres que nous avons fait ($t'_b/t_b = 1/10$) ou si au contraire, elle est une caractéristique très générale du nesting quantifié.

IV - D. 3. e) Description semi-classique de la susceptibilité.

La forme la plus générale de la susceptibilité écrite au paragraphe IV-D.2. a la structure suivante :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{4\pi b v} \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \int_d^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} e^{i\phi(p)} \left(e^{-i\phi(p + \frac{x}{x_0})} + e^{-i\phi(p - \frac{x}{x_0})} \right) \quad (\text{IV.66})$$

Le calcul semi-classique de cette expression, au sens des intégrales de chemin de Feynman, consiste à chercher les régions d'intégration où la phase ϕ est stationnaire [108]. Ce sont ces régions qui contribuent essentiellement à la susceptibilité. La condition de phase stationnaire $\phi' = 0$ conduit à

$$v q_{//} = t_{\perp}(p_0) + t_{\perp}(p_0 - q_{\perp} b) \quad (\text{IV.67})$$

Ceci exprime que la contribution essentielle à χ_0 vient de la région où une nappe de la surface de Fermi et l'autre nappe translatée de \vec{Q} se croisent.

Par ailleurs, χ_0 est d'autant plus grande, à $T = 0$, que cette phase, quand elle est stationnaire, varie très lentement c'est-à-dire si $\phi'' = 0$, d'où

$$0 = t'_{\perp}(p_0) + t'_{\perp}(p_0 - q_{\perp} b) \quad (\text{IV.68})$$

Cette seconde condition exprime que χ_0 est maximale si les deux nappes de la surface de Fermi sont tangentes au point d'intersection.

Mais ce résultat est approché. Il est d'autant meilleur que la phase oscille rapidement, c'est-à-dire que $q_{//} x_0 \gg 1$ et donc que :

$$n \gg 1$$

L'approximation semi-classique n'est en effet valable que pour les grands nombres quantiques. La condition de surfaces de Fermi tangentes pour le maximum de x_0 n'est donc exacte qu'en champ nul. Elle correspond à la ligne L de non analyticités que nous avons décrite au paragraphe IV-C.1.

En champ magnétique fini, la structure de la susceptibilité peut se décrire simplement de la façon suivante : elle est maximale lorsque

-1- La surface A est quantifiée

-2- Les deux nappes de la surface de Fermi sont tangentes.

La première condition est exacte, la seconde n'est qu'approchée, d'autant plus que le champ est fort, ainsi que le rappelle la figure 42.

Considérons, à titre d'exemple, la susceptibilité pour la relation de dispersion $t_{\perp}(p) = -2t_b \cos p$. Alors,

$$\phi(p) = x_0 \left(q_{//} p + 2t_b \sin p + 2t_b \sin(p - q_{\perp} b) \right) \quad (\text{IV.69})$$

La ligne L où les surfaces sont tangentes est donnée par $\phi' = \phi'' = 0$, c'est-à-dire

$$q_{//} = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} \quad p_0 = \frac{q_{\perp} b}{2}$$

Autour de cette ligne, la phase se développe de la façon suivante :

$$\phi(p) = q_{//} x_0 p_0 - \frac{n}{6} (p - p_0)^3 \quad \underline{q_{//} x_0 = n \text{ entier}}$$

Ainsi la contribution de l'intégrale à grande distance $x > x_0$ devient

$$\frac{1}{2\pi b v} \int_0^{\pi} \frac{dp}{\pi} \int_{x_0}^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} < \cos \frac{n}{6} (p-p_0)^3 >^2 \quad (\text{IV.70})$$

c'est-à-dire

$$- \frac{1}{2\pi b v} \ln \frac{\pi T}{e H v b} \times \left(\cos \frac{\pi}{6} \frac{\Gamma(1/3) 6^{1/3}}{3(n)^{1/3}} \right)^2 \quad (\text{IV.71})$$

L'expression entre crochets n'est autre qu'une expression approchée de $J_n(n)$ (voir eq. IV.55). Lorsque le champ augmente, cette approximation est de moins en moins bonne.

Ainsi quand le champ augmente, la condition géométrique -2- qui définit les maxima relatifs de χ_0 devient de plus en plus mauvaise. Ceci n'est pas étonnant puisque cette condition géométrique porte sur la surface de Fermi en champ nul, laquelle n'est plus définie lorsqu'un champ magnétique est appliqué, le vecteur d'onde n'étant plus un bon nombre quantique.

IV - D. 4. Ligne d'instabilité de la phase métallique. Transitions vers des phases Onde de Densité de Spin.

Le comportement inhabituel de la susceptibilité $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ sous champ a des conséquences essentielles sur le diagramme de phases du gaz d'électrons 2D décrit par la relation de dispersion IV.59. Nous avons présenté au paragraphe IV-D.3.c. l'évolution de $\chi_0(H, T)$ à température constante. La susceptibilité du gaz en interactions s'écrit, dans le cadre de la théorie du liquide de Fermi :

$$\chi(\vec{Q}, H, T) = \frac{\chi_0(\vec{Q}, H, T)}{1 - I \chi_0(\vec{Q}, H, T)} \quad (IV.42)$$

L'équation de la ligne d'instabilité de la phase métallique est donc donnée par :

$$\chi_0(H, T_c) = \frac{1}{I} \quad (IV.72)$$

où la susceptibilité nue $\chi_0(H, T)$ a été maximisée par rapport au vecteur d'onde. Cette équation définit la ligne de transition métal-Onde de Densité de Spin $T_c(H)$. A partir de la susceptibilité $\chi_0(H, T)$ obtenue à différentes températures, nous avons obtenu la ligne de transition $T_c(H)$ présentée sur la figure 51. Analytiquement, nous n'en avons qu'une expression très approchée, pour les raisons exposées dans le paragraphe IV-D.3.b) et l'appendice E . De l'expression IV.55, nous déduisons :

$$T_c(H) = \frac{eHb}{\pi} \left(\frac{4k_F}{q_b} \right)^{1/\beta_n} \exp - \frac{1}{\beta_n N(o)I} \quad (IV.73)$$

avec $\beta_n = \max J_n^2(z)$, $N(o) = 1/2\pi bv$; $q_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_b b}{2}$ est d'ordre $\frac{t'_b}{v}$. Cette expression définit une densité effective de porteurs au niveau de Fermi, $N_n(o) = \beta_n N(o)$ inférieure à $N(o)$.

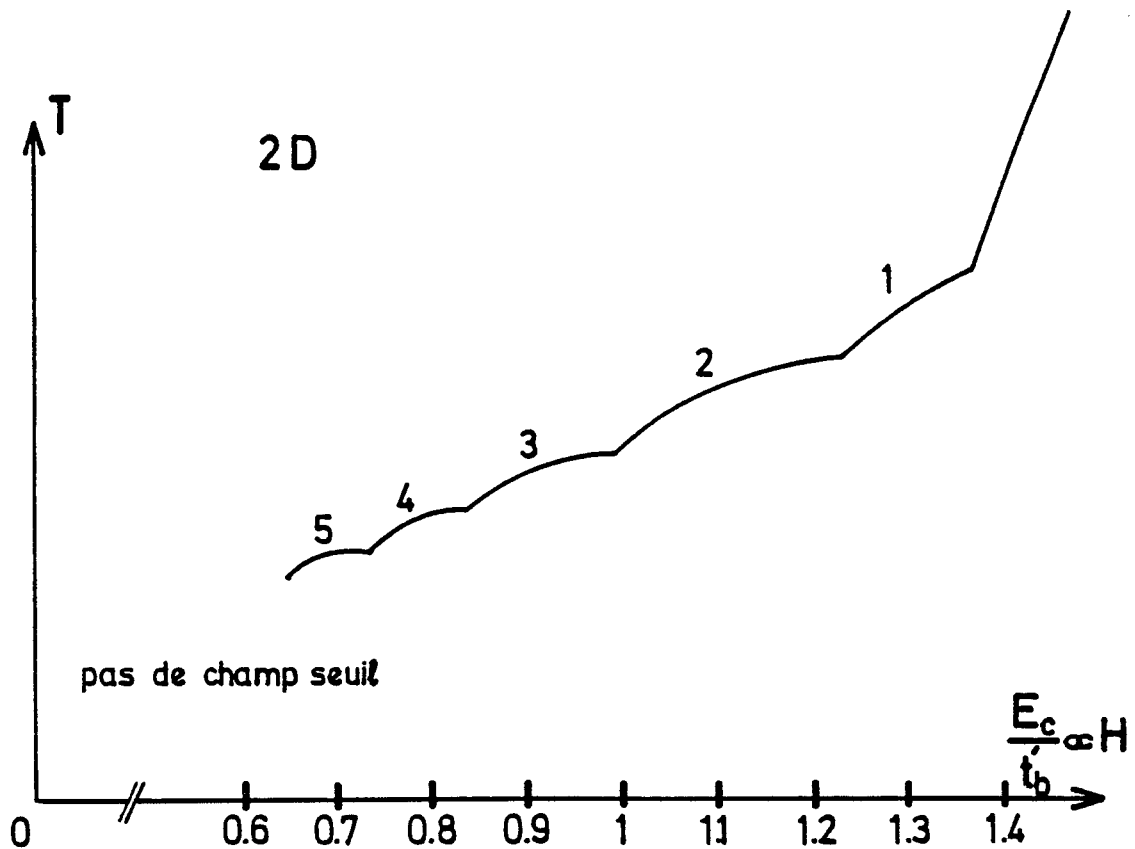


Figure 51

Ligne d'instabilité de la phase métallique, déterminée à partir du critère de Stoner : $1 - I \chi_0(H, T) = 0$, où $\chi_0(H, T)$ est le maximum de la susceptibilité (figure 48). Cette ligne est constituée d'une succession de segments décrits par les valeurs successives du nombre quantique n_0 . Pour le gaz d'électrons 2D, il n'y a pas de champ seuil : cette ligne se prolonge jusqu'à $H = T = 0$.

Ainsi, dans un tel système avec un état fondamental métallique en champ nul, le champ induit une cascade de transitions de phase puisque chaque pic de la susceptibilité diverge logarithmiquement. La ligne de transition $T_C(H)$ décrit l'instabilité de la phase métallique vis-à-vis de la formation d'une succession de phases ordonnées, chacune d'elle étant décrite par une valeur du nombre quantique n_0 . Chaque transition métal-Onde de Densité de Spin est vraisemblablement du second ordre, ce qui doit être confirmé par une étude de la phase condensée. Par ailleurs, puisque le vecteur de nesting $\vec{Q}_0(H)$ varie de façon discontinue d'une phase à l'autre, il est probable que la transition entre chaque phase ODS soit du premier ordre, ce que devrait confirmer une analyse de ces phases ordonnées.

Il faut noter que, dans ce traitement, nous avons supposé que le paramètre I qui décrit les interactions électroniques, est indépendant du vecteur d'onde.

IV - D. 5. Instabilité et nesting quantifié dans le gaz d'électrons tridimensionnel.

Les effets que nous avons décrits sont caractéristiques du gaz d'électrons quasi-1D bidimensionnel. Mais l'introduction d'une dispersion dans une troisième direction peut modifier les résultats que nous venons d'obtenir. Considérons donc le gaz d'électrons décrit par la relation

$$E(\vec{k}) = E_0 + v(|k_{\parallel}| - k_F) - 2t_b \cos k_{\perp} b - 2t'_b \cos 2k_{\perp} b - 2t_c \cos k_z c - 2t'_c \cos 2k_z c \quad (IV.74)$$

Il faut alors envisager un vecteur de nesting tridimensionnel $\vec{Q} = (2k_F + q_{\parallel}, q_{\perp}, q_z)$
La susceptibilité s'écrit maintenant :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \int_0^{\pi} \frac{dp}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{dp_z}{\pi} \cos(q_{\parallel} x - 2q_b x_0 \sin \frac{x}{2x_0} \cos p - q'_b x_0 \sin \frac{x}{x_0} \cos 2p - q_c x \cos p_z - q'_c x \cos 2p_z) \quad (IV.75)$$

$$\text{avec } q_c = \frac{4t_c}{v} \cos \frac{q_z c}{2} \quad \text{et } q'_c = \frac{4t'_c}{v} \cos q_z c.$$

Gor'kov et Lebed ont étudié la susceptibilité pour le vecteur $\vec{Q}_t^{3D} = (2k_F, \pi/b, \pi/c)$:

$$x_0(\vec{Q}_t^{3D}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d^\infty \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} J_0\left(\frac{4t'_b}{v} x_0 \sin \frac{x}{x_0}\right) J_0\left(\frac{4t'_c x}{v}\right) \quad (\text{IV.76})$$

Le dernier facteur rend l'intégrale convergente aux grandes valeurs de x et introduit ainsi un champ seuil H_T pour l'instabilité de la phase métallique au vecteur \vec{Q}_t^{3D}

$$H_T \approx \frac{\pi t'_b}{evb} \ln \frac{t''_b}{t'_b} / \ln \frac{t'_c}{t'_b} \quad (\text{IV.77})$$

t''_b étant la valeur critique de t'_b pour l'observation d'une phase ODS en champ nul.

Mais le vecteur de meilleur nesting n'est pas \vec{Q}_t^{3D} . En champ nul, ses coordonnées sont déterminées par

$$\begin{aligned} q_{//} &= \frac{3}{4} q_b + \frac{3}{4} q_c \\ q'_b &= - q_b/4 \\ q'_c &= - q_c/4 \end{aligned} \quad (\text{IV.78})$$

On en déduit ainsi, puisque $t'_c \ll t_c$

$$\begin{aligned} q_{//}^{3D} &= q_{//}^{2D} + \frac{12t'_c}{v} \\ q_{\perp}^{3D} &= q_{\perp}^{2D} \\ q_z &= \frac{1}{c} \left(\pi - \frac{8t'_c}{t_c} \right) \end{aligned} \quad (\text{IV.79})$$

Par conséquent, en très bonne approximation $\vec{Q}_0(H) = (2k_F + q_{//}, q_{\perp}, \frac{\pi}{c})$

où $q_{//}$ et q_{\perp} sont les composantes bidimensionnelles étudiées jusque là. Le champ seuil au vecteur d'onde $\vec{Q}_0(H)$ est donc plus faible que celui estimé par Gor'kov.

Les effets quantiques que nous avons discutés dans ce chapitre, restent observables si la dispersion introduite dans la direction c reste faible, plus précisément si, d'après l'expression IV.75 :

$$q_c \ll q_{//} \quad \text{et} \quad q'_c \ll q_{//}$$

donc si
$$E_c \gg \max(4t_c \cos \frac{q_z c}{2}, 4t'_c \cos q_z c)$$

Autour du vecteur d'onde de meilleur nesting $q_z \sim \frac{\pi}{b}$, cette condition devient $E_c \gg 4t'_c$. Elle est aisément réalisée.

Ainsi le mouvement électronique est beaucoup plus bidimensionnel dans chaque phase ODS (où l'anisotropie t'_b/t'_c est grande, de l'ordre de 10^3) que dans la phase métallique ($\frac{t_b}{t_c} \sim 30$).

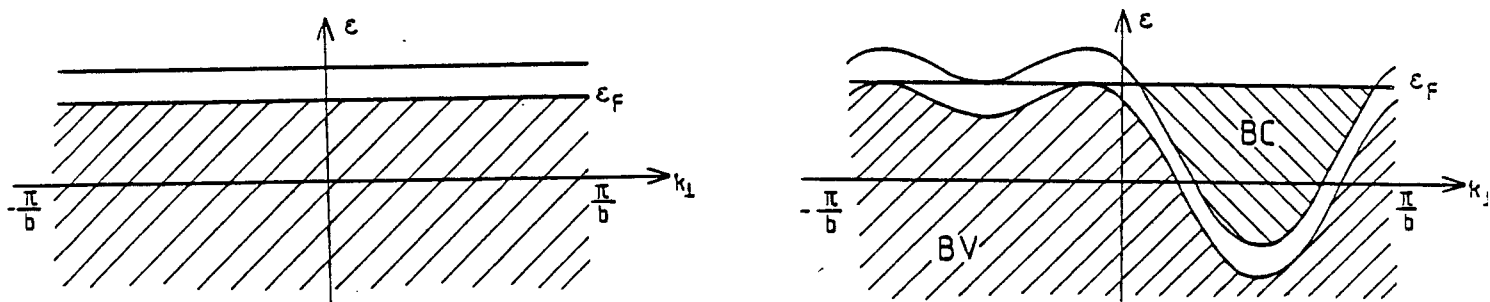


Figure 52 a

Image semi-classique de la structure de la bande électronique dans la phase condensée. Si le nesting était parfait ($t'_D = 0$), la phase ODS serait isolante à cause de la formation du gap au niveau de Fermi. Si ce n'est pas le cas ($t'_D \neq 0$), il reste au-dessus du gap des états itinérants. Sous champ, ces états sont quantifiés en niveaux de Landau. L'énergie est minimale si ces niveaux sont complètement remplis. BC = bande de conduction, BV = bande de valence. [111].

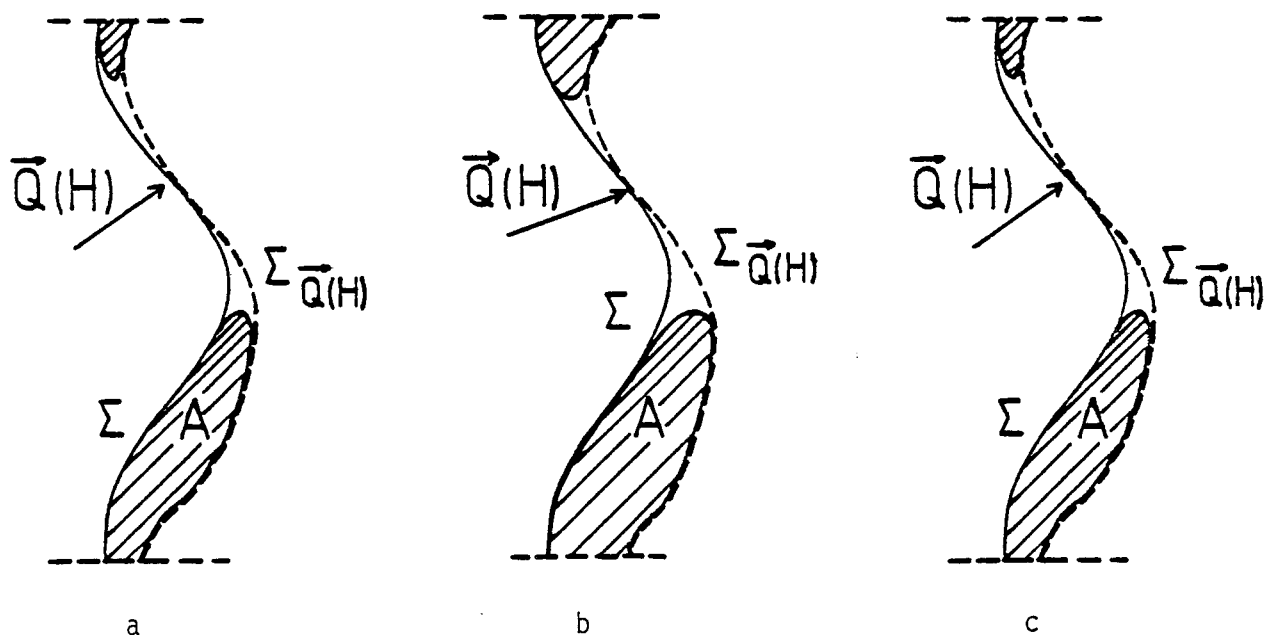


Figure 52 b

Mécanisme du nesting quantifié en-dessous de la ligne d'instabilité. La poche de porteurs est modifiée par la formation du gap ODS. Dans cette poche, le nombre de porteurs croît linéairement avec le champ et le vecteur de nesting varie pour autoriser cette augmentation (a → b). Lorsque le nesting devient trop mauvais, la poche se vide d'un niveau de Landau pour revenir à un meilleur nesting (b → c).

IV - E. DESCRIPTION DES PHASES ORDONNEES

IV - E. 1. Heuristique. Cascade de transitions de phase induite par le champ magnétique.

La condition de quantification et le mécanisme du nesting quantifié que nous avons établis peuvent être prolongés qualitativement dans la phase condensée.

A cause de la formation d'un gap, énergie de condensation d'une paire électron-trou, les états d'énergie situés sous cette bande interdite sont complètement remplis et ne participent donc pas à la conduction. Si le nesting était parfait, le système électronique serait isolant à basse température. Comme il n'est pas parfait, il peut rester, au-dessus du gap, des états remplis qui conduisent le courant et chaque phase ODS est faiblement conductrice à température nulle. Ces états se situent dans la poche comprise entre une nappe de la surface de Fermi et l'autre nappe translatée de \vec{Q} . (figure 52).

A cause du champ magnétique, ces états sont quantifiés en niveaux de Landau. Le vecteur de nesting \vec{Q} ainsi que le gap Δ s'ajustent de telle sorte que, dans la bande de conduction ainsi constituée, il existe un nombre entier n_0 de niveaux de Landau complètement remplis, ce qui minimise l'énergie diamagnétique. Ainsi, dans chacune des phases, caractérisée par une valeur du nombre quantique n_0 , le nombre N de porteurs est égal au produit du nombre n_0 de niveaux de Landau pleins par la dégénérescence d'un niveau de Landau. N varie donc linéairement avec le champ

$$N = n_0 \frac{eH}{h}$$

(Nous extrapolons ainsi le résultat IV.52 dans la phase condensée). Cette variation est tout à fait inhabituelle. Dans un métal ou un semi-conducteur, le nombre de porteurs ne varie pas avec le champ. C'est qu'il existe ici "un réservoir de porteurs" dont le rôle est joué par les électrons de la bande de valence. Ainsi le vecteur d'onde de nesting \vec{Q} varie avec le champ, et la distorsion des bandes qui en résulte revient à faire varier la taille de la bande de conduction au profit de la bande de valence. Dans une sous-phase indexée par n_0 , le vecteur d'onde varie pour autoriser cette augmentation. Si la variation de \vec{Q} devient trop grande, le nesting devient trop mauvais : pour une valeur critique du champ magnétique, le niveau de Landau le plus haut se vide complètement et les porteurs retournent dans la bande de valence. On est donc passé, pour cette valeur

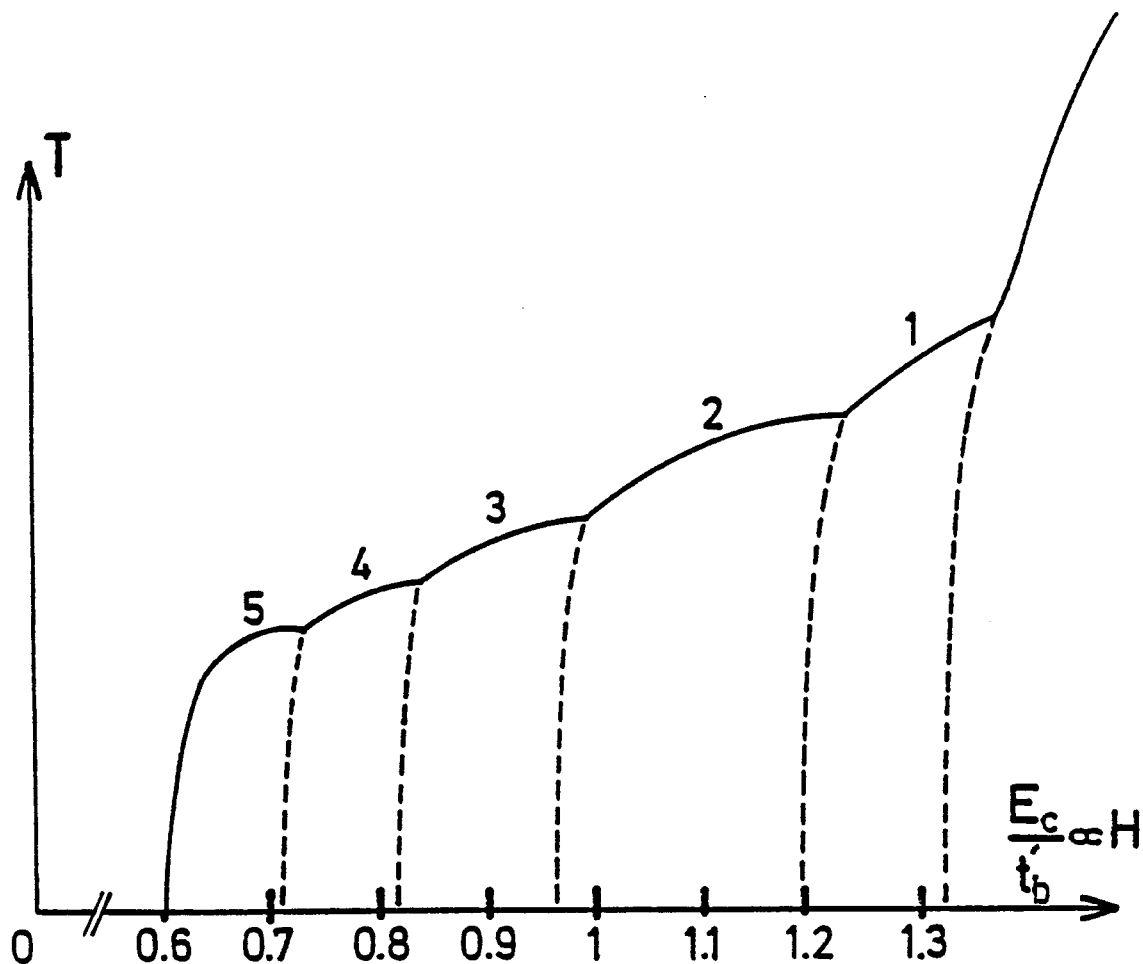


Figure 53

Diagramme de phases du gaz d'électron anisotrope ($t_c \ll t_b \ll t_a$) avec surface de Fermi ouverte, lorsqu'un champ magnétique est appliqué perpendiculairement au plan (a, b). Les nappes successives de la ligne d'instabilité se prolongent à basse température par une succession de sous-phases, chacune caractérisée par une valeur de n_0 , le nombre de niveaux de Landau complètement remplis. Ces sous-phases sont séparées par des lignes de transitions du premier ordre (tirets), liés au saut du vecteur d'onde. A cause du couplage tridimensionnel, il existe un champ seuil.

du champ, à une phase constituée de $n_0 - 1$ niveaux pleins. On obtient ainsi, lorsque le champ augmente, une cascade de transitions entre des sous-phases caractérisées par des valeurs décroissantes de n_0 (figure 53).

IV - E. 2. Théories des phases condensées.

Jusqu'à présent, en calculant la susceptibilité et en appliquant le critère de Stoner, nous n'avons, en toute rigueur, que décrit la ligne de transition $T_c(H)$, même si, qualitativement, les effets décrits peuvent être extrapolés dans la phase basse température. Une description quantitative de cette région nécessite une autre analyse. A cause de la formation d'un gap, paramètre d'ordre de la phase condensée, l'équation du mouvement de la fonction de Green est couplée à celle du gap et la description de la phase condensée devient difficile (Appendice G). En l'absence de champ, une transformation de Fourier découple ces équations et il est possible de décrire la phase ODS sans approximation. Ce n'est plus possible si un champ magnétique est appliqué. Deux approches ont été jusque là envisagées pour décrire les sous phases ODS.

- Il est possible de décrire le voisinage de la ligne de transition $T_c(H)$, d'une part à l'aide d'arguments généraux de thermodynamique et d'autre part en cherchant une dérivation microscopique des équations de Ginzburg-Landau. Le but de cette étude est essentiellement de démontrer que la ligne d'instabilité constituée de différentes branches se prolonge, dans la région ordonnée, par une succession de transitions de phases du premier ordre, liées au saut du vecteur d'onde entre chacune de ces sous-phases (§ IV-E.2.a).

- La description de la phase ordonnée à température nulle a été menée numériquement par Yamaji [109-111]. C'est donc un travail complémentaire du nôtre qui confirme, à $T = 0$, la description que nous avons donnée de la cascade de transitions près de la ligne d'instabilité.

IV - E. 2. a) Voisinage de la ligne d'instabilité $T_c(H)$

La structure de la ligne de transition étant déterminée, il est possible d'en déduire la structure du diagramme de phases en son voisinage. La propriété remarquable de cette ligne de transition est qu'elle est constituée d'un ensemble de segments $T_c^n(H)$, indexés par le nombre quantique n . Puisque deux segments n et $n + 1$ se coupent en un point avec un angle fini (figure 51), un argument général de thermodynamique montre que, de ce point, part une ligne de transitions du premier ordre. Nous développons cet argument en appendice F, en montrant par ailleurs que, si la ligne de transition du premier ordre est quasiment verticale, le saut d'aimantation entre les phases $n + 1$ et n peut être relié à des éléments de la ligne d'instabilité :

$$M_n - M_{n+1} = \Delta M = \frac{\Delta p \Delta C_e \Delta T}{T_c} \quad (\text{IV.80})$$

Δp est la différence de pente des segments $T_c^n(H)$ et $T_c^{n+1}(H)$:

$$\Delta p = \frac{\partial T_c^n}{\partial H} - \frac{\partial T_c^{n+1}}{\partial H} \quad (\text{IV.81})$$

ΔC_e est le saut de chaleur spécifique électronique à la transition du second ordre. ΔT est l'écart en température à la ligne de transition du second ordre.

Le saut d'aimantation est donc positif. En extrapolant à température nulle, on trouve l'estimation suivante :

$$\Delta M \approx \Delta p \Delta C_e \quad (\text{IV.82})$$

D'une phase n à la phase $n - 1$, le nombre de porteurs diminue. Il en résulte une chute de l'entropie électronique. Comme

$$\Delta S = - \frac{dH}{dT} \Delta M, \quad (\text{IV.83})$$

on en déduit que la pente $\frac{dT}{dH}$ de chaque ligne de transition du premier ordre est positive. Par ailleurs, ces lignes de transitions sont verticales à basse température, $T \rightarrow 0$.

La chaleur latente s'exprime aussi en fonction des différentes pentes du diagramme

$$L = - T \frac{dH}{dT} \Delta M = - \frac{dH}{dT} \Delta p \Delta T \Delta C_e \quad (\text{IV.84})$$

L'analyse thermodynamique simple que nous venons de faire permet de déduire des caractéristiques générales du diagramme de phases. Mais pour déterminer plus quantitativement les propriétés du voisinage de la ligne d'instabilité et connaître l'évolution du paramètre d'ordre, il faut connaître le développement microscopique "Ginzburg-Landau" de l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre. Dans chaque sous-phase n , l'énergie libre s'écrit :

$$F_n = -\left(x_0 - \frac{1}{T}\right) \frac{\Delta_n^2}{2} + \frac{b_n}{4} \Delta_n^4 + \dots \quad (\text{IV.85})$$

L'étude du coefficient d'ordre 2, c'est-à-dire de la susceptibilité, a fait l'objet du chapitre précédent. Celle du coefficient d'ordre 4 est beaucoup plus difficile. Avec le même genre d'approximations que celles qui sont utilisées pour estimer x_0 , nous proposons en appendice G une estimation de ce coefficient [108] dont la représentation diagrammatique est rappelée figure 54. On trouve ainsi, en minimisant l'énergie libre :

$$b_n \approx \frac{3}{64\pi b v t_b'^2} \left(\frac{C_1 4t_b'^2 \beta_n^2}{T^2} + \frac{C_2 2t_b' \beta_n}{T} + C_3 \right) \quad (\text{IV.86})$$

avec $\beta_n = \max (J_n^2(x))$ et les ordres de grandeurs suivants :

$C_1 \approx 0.05$, $C_2 \approx 1$, $C_3 \approx 0.5$ (Appendice G). On en déduit :

$$\Delta_n^2 \approx \frac{16 f_n t_b' (T_n - T)}{3(C_1 + C_2 f_n + C_3 f_n^2)} \quad (\text{IV.87})$$

et

$$F_n \approx - \frac{(T - T_n)^2}{3\pi b v c (C_1 + C_2 f_n + C_3 f_n^2)} \quad (\text{IV.88})$$

avec $f_n = T/2\beta_n t_b'$.

Les approximations utilisées sont très grossières et, dans l'état actuel de nos calculs, il n'est guère possible de donner une analyse quantitative de la phase ordonnée par le développement de Ginzburg-Landau. Toutefois, les estimations faites semblent montrer que le coefficient b_n est positif, ce qui confirme le caractère second ordre de chaque transition métal-ODS. Par ailleurs, à l'intérieur de chaque sous-phase, le terme b_n varie peu mais il varie de façon discontinue d'une sous-phase à la suivante.

Il est possible d'avoir une idée approchée de la structure de l'énergie libre dans la phase ODS. Celle-ci s'écrit, en minimisant F_n par rapport au paramètre d'ordre :

$$F_n = - \frac{\left(x_0 - \frac{1}{T}\right)^2}{2b_n} \quad (\text{IV.89})$$

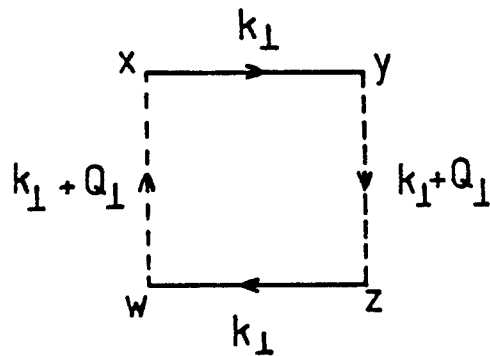


Figure 54 : Diagramme d'ordre 4, en représentation mixte, intervenant dans le développement de Ginzburg-Landau.

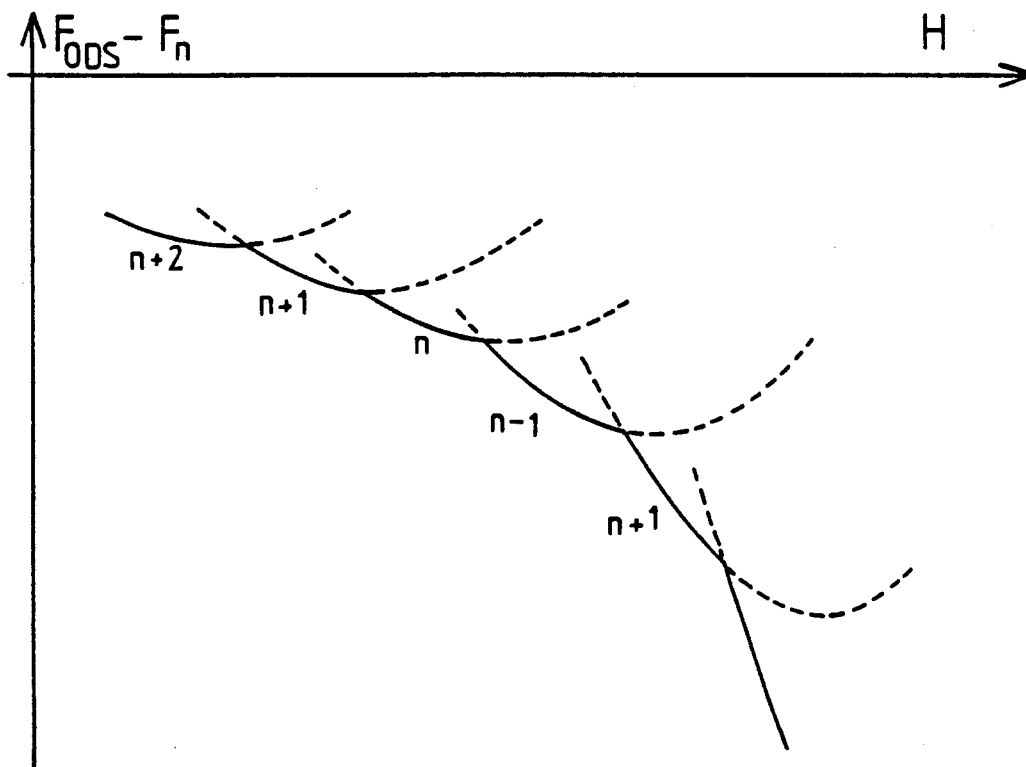


Figure 55 : L'énergie libre de la phase condensée est une fonction $F(\vec{Q}, H, T, \Delta)$ du vecteur de nesting, du champ, de la température et du gap. Cette fonction présente une structure complexe en fonction de \vec{Q} et Δ avec des minima locaux quand la bande de conduction contient un nombre entier de niveaux de Landau complètement remplis. Si on minimise par rapport à \vec{Q} et Δ , $F(H, T)$ a une structure réminiscente de celle de $x_0(H, T)$ (formule IV.86). Le croisement entre deux nappes successives de $F(H, T)$ correspond à une transition du premier ordre.

L'énergie libre est donc composée d'une succession de nappes, chacune décrivant une sous-phase indexée par n. Entre chaque phase l'énergie libre présente une discontinuité de pente, de sorte que chaque transition est du premier ordre (figure 55).

IV - E. 2. b) La théorie de Yamaji

Yamaji a calculé numériquement l'énergie de l'état Onde de Densité de Spin sous champ magnétique et à température nulle [109-110]. La physique est la même que celle que nous avons décrite jusque là, l'abaissement d'énergie étant dû à la quantification des orbites électroniques sous champ. Yamaji écrit l'hamiltonien sous la forme :

$$= \sum_{k,s} C_{k,s}^+ (-2t_a (\cos k_{\parallel} a - \cos k_F a) - 2t_b \cos b(k_{\perp} + ieH \frac{\partial}{\partial k_{\parallel}}) - \mu_B s H - \mu) C_{k,s} \quad (IV.90)$$

$$- \sum_{\vec{k}} (i\Delta (C_{\vec{k}\uparrow}^+ C_{\vec{k}-\vec{Q}\downarrow} + C_{\vec{k}-\vec{Q}\uparrow} C_{\vec{k}\downarrow}) + h.c.)$$

La jauge de Landau $\vec{A} = (0, Hx, 0)$ a été utilisée et l'opérateur x a été écrit en représentation d'impulsion $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial k_{\parallel}}$. $\mu_B H$ est le terme Zeeman, μ le potentiel chimique et Δ le gap de la phase ODS.

En l'absence de champ, si t_b est nul, le nesting parfait est obtenu pour le vecteur de nesting $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$ et le gap a sa valeur BCS :

$$\Delta = 8t_a \frac{\sin^2 k_F a}{\cos k_F a} \exp - \frac{1}{N(0)I} \quad (IV.91)$$

où I est le paramètre d'interaction et $N(0) = 1/2\pi v b = 1/4\pi t_a \sin k_F a$. Lorsque t_b augmente, le nesting au vecteur d'onde \vec{Q}_t devient mauvais et la phase ODS disparaît pour la valeur critique de t_b .

$$t_b^* = (3,53 k_B T_c^0 t_a \sin^2 k_F a / \cos k_F a)^{1/2}, \quad (IV.92)$$

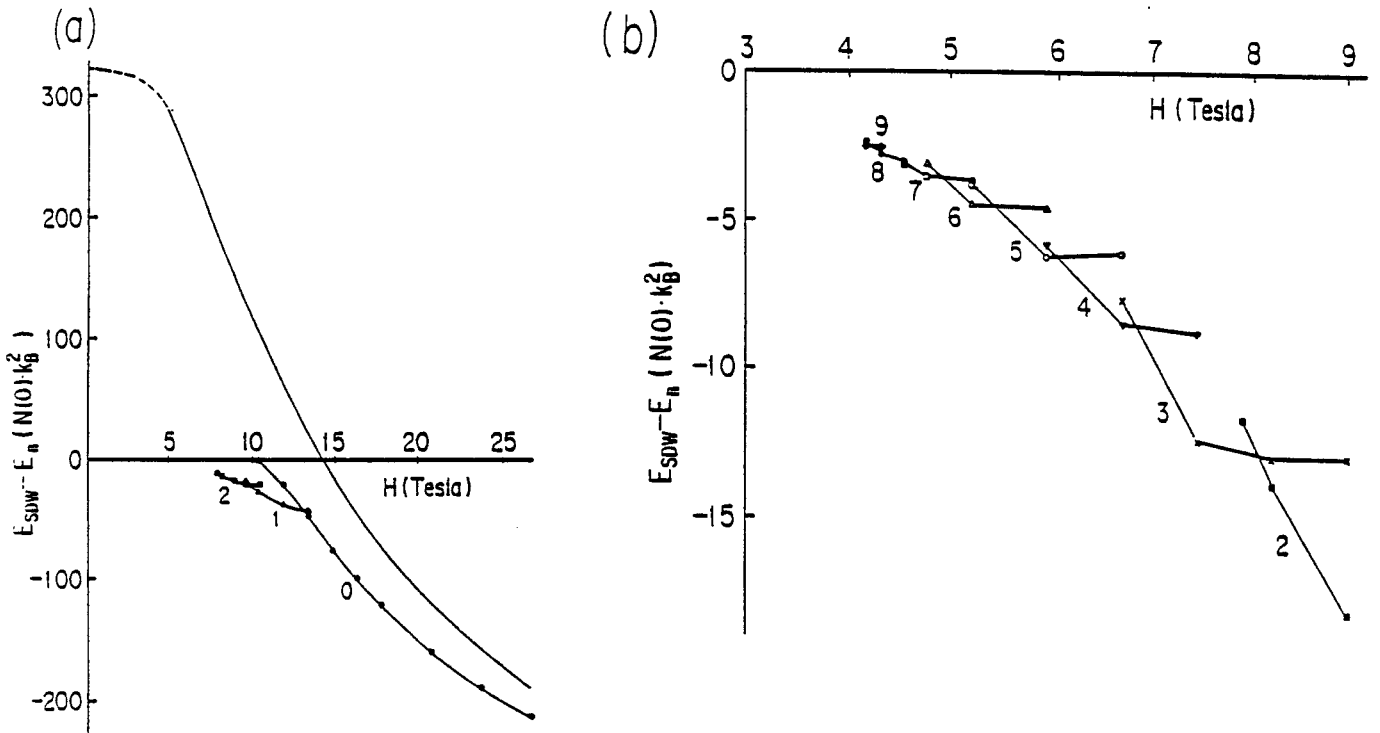


Figure 56

Yamaji [111] calcule, à température nulle, la différence d'énergie $E_{SDW} - E_n$ entre la phase ODS et la phase normale, sous champ magnétique. La variation de cette énergie en fonction du vecteur d'onde présente un ensemble de maxima locaux. La courbe continue de la figure a montre la différence $E_{SDW} - E_n$ pour une valeur fixée de \vec{Q} et Δ . En minimisant par rapport au gap et au vecteur d'onde, Yamaji montre que la variation du minimum absolu en fonction du champ est constituée d'un ensemble de segments caractérisés par les valeurs successives d'un nombre entier (figure a et agrandissement sur la figure b).

T_C^0 étant la température de transition si $t_b = 0$. C'est exactement la valeur que l'on peut déduire de l'analyse du paragraphe IV-C.1., $t_b^{**} = \frac{\pi}{2\gamma} T_C^0$.

(Dans ses calculs, Yamaji linéarise aussi la relation de dispersion, et le paramètre ϵ_0 qu'il introduit pour décrire l'écart au nesting parfait est relié très simplement à notre t_b' : $\epsilon_0 = 2t_b'$. La valeur de t_b^{**} provient donc de l'égalité $\epsilon_0^{**} = \Delta_0$, où Δ_0 est la valeur du gap quand $t_b = 0$). Par ailleurs, cette valeur critique concerne l'instabilité au vecteur \vec{Q}_t , instabilité qu'il nomme SDW 1. La phase SDW 2 décrite par le vecteur d'onde \vec{Q}_0 de meilleur nesting est plus stable [103], ainsi que nous l'avons vu au paragraphe IV.C.2.

En présence d'un champ magnétique, l'effet de l'opérateur $\cos\left(i eH \frac{\partial}{\partial k_{//}}\right)$ sur $C_{\vec{k}}$ donne :

$$\frac{1}{2} (C_{k_{//} - eHb, k_{\perp}} + C_{k_{//} + eHb, k_{\perp}}) \quad (\text{IV.93})$$

car l'opérateur $\exp eHb \frac{\partial}{\partial k_{//}}$ est l'opérateur "translation de eHb " dans l'espace réciproque. Par conséquent, l'opérateur $C_{k_{//}, k_{\perp}}$ est couplé d'une part aux opérateurs $C_{k_{\pm} \pm Q_{//}, k_{\pm} \pm Q_{\perp}}$ à cause du gap (c'est ce que prend en compte la théorie BCS du couplage électron-trou), d'autre part aux opérateurs $C_{k_{//} \pm neHb, k_{\perp}}$ à cause du champ magnétique. Le problème posé est donc celui de la diagonalisation de la matrice de rang infini associée à l'hamiltonien IV.87. L'approximation utilisée par Yamaji consiste à tronquer cette matrice, c'est-à-dire à se limiter aux vecteurs d'onde $k_{//}$ tels que $|k_F| - NeHb < |k_{//}| < |k_F| + neHb$, N étant choisi d'autant plus grand que le champ est faible ($N \approx 50$ pour un champ de 10 T). Les valeurs propres de cette matrice sont périodiques en $1/\chi_0 = eHb$.

Dans un premier temps [109-110], Yamaji a calculé ainsi l'énergie E_{ODS} de la phase ODS en fonction du gap Δ et pour le vecteur d'onde $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$. Il a vérifié que cette énergie est inférieure à celle de la phase métallique E_n .

Depuis notre travail, Yamaji a minimisé l'énergie E_{ODS} par rapport au vecteur d'onde \vec{Q} et au gap considérés comme paramètres variationnels [111]. Ainsi, lorsque \vec{Q} varie, il trouve des minima locaux de l'énergie, qui varient avec le champ magnétique. En cherchant la variation de ces minima avec le champ, Yamaji a obtenu la courbe 56, constituée de différentes branches, chacune d'elles étant indexée par une valeur du nombre quantique n_0 (noté N_{QL} par Yamaji).

L'évolution du minimum absolu en fonction du champ est donnée par l'enveloppe de cette courbe. Lorsque deux nappes se croisent, le minimum absolu est donc transféré d'une nappe à la suivante, ce qui se caractérise par le changement d'une unité du nombre quantique n_0 et par une transition de phase du premier ordre entre les deux sous-phases n_0 et $n_0 \pm 1$.

Ce schéma correspond tout à fait à celui que nous avons trouvé pour l'évolution sous champ de la susceptibilité de la phase métallique. Il confirme, à température nulle, la description que nous avons donnée, au voisinage de la ligne d'instabilité, du mécanisme de la cascade de transitions, à savoir que :

- le nombre quantique n_0 est égal au nombre de niveaux de Landau pleins situés dans la bande de conduction, au-dessus du gap ODS.
- le diagramme de phases est constitué d'une série de sous-phases, chacune étant indexée par une valeur de n_0 .

- le vecteur d'onde $\vec{Q}(H)$ évolue entre le vecteur \vec{Q}_0 en champ nul et le vecteur \vec{Q}_t en champ infini, avec un saut à chaque transition. La séquence de champs critiques que l'on peut déduire de la figure 10 de la référence [111] est la suivante (avec notre définition de H_n et la correspondance $1\text{T} \approx 2\text{K}$) :

$$H_n \approx \frac{7,7 t'_b}{n+3} \quad \text{si} \quad \frac{t'_b}{t_b} = \frac{1}{24} \quad ; \quad H_n \approx \frac{5,8 t'_b}{n+4,3} \quad \text{si} \quad \frac{t'_b}{t_b} = \frac{1}{28} \quad (\text{IV.94})$$

Ces résultats semblent ainsi confirmer la nature de la séquence que nous avons trouvée pour l'évolution du vecteur d'onde et du nombre de porteurs sous champ.

- En champ fort, le nombre quantique $n_0 = 0$ est favorisé, de sorte que $\vec{Q}(H) = \vec{Q}_t$, ce que nous avons déjà démontré. Le système est alors isolant à $T = 0$.
- Yamaji ne peut conclure sur l'existence ou non d'un champ seuil à deux dimensions.

IV - E. 3. L'effet Hall

Dans un métal ou un semi-conducteur, où le nombre de porteurs N ne varie pas avec le champ, la résistance de Hall, rapport de la tension transverse sur le courant longitudinal, est donnée par l'expression

$$R_H = \frac{H}{Ne} \quad (\text{IV.95})$$

dans le cas simple d'une bande quadratique [112]. Or, dans chaque phase ordonnée du système électronique que nous venons de décrire, le nombre N de porteurs varie linéairement avec le champ — $N = neH/h$ (eq. IV.52) — de sorte que, dans une phase indexée par le nombre quantique n_0 , on s'attend à ce que, à température nulle, la résistance de Hall reste constante et sous-multiple d'une constante fondamentale :

$$R_H = \frac{h}{n_0 e^2} \quad (\text{IV.96})$$

Cet argument semi-classique montre que la variation de la tension de Hall avec le champ devrait donc présenter une succession de paliers (figure 57).

Ce résultat soulève la question suivante : ces paliers sont-ils de même nature que ceux de l'effet Hall quantifié observé d'une part dans les transistors MOS (Metal-Oxyde-Semiconductor) [113] et d'autre part dans les hétérojonctions de semi-conducteurs GaAs-Al_xGa_{1-x}As [114] ou InP-In_xGa_{1-x}As [115] ? A l'interface de deux semi-conducteurs, les électrons restent confinés comme dans un puits et réalisent un système quasi-bidimensionnel. En champ nul $E = E_j + E(k_x, k_y)$. La division en sous-bandes j très espacées trouve son

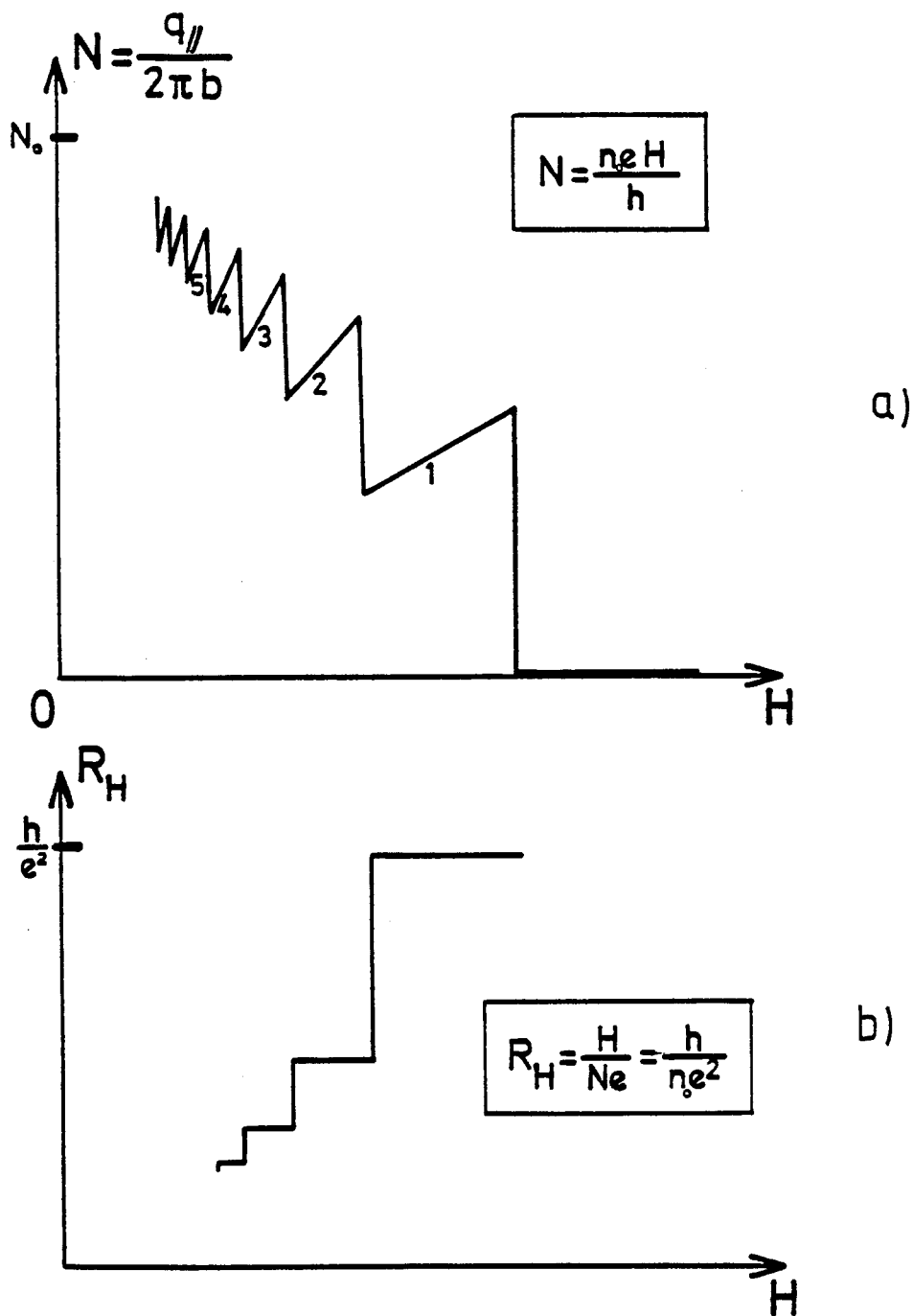


Figure 57 : a) Dans chaque sous-phase ODS, le nombre de porteurs N varie linéairement avec le champ magnétique : $N = n_0 e H / h$

b) On s'attend ainsi, si tout processus d'excitation tunnel ou thermique est négligeable, à obtenir un palier d'effet Hall sans chaque sous-phase.

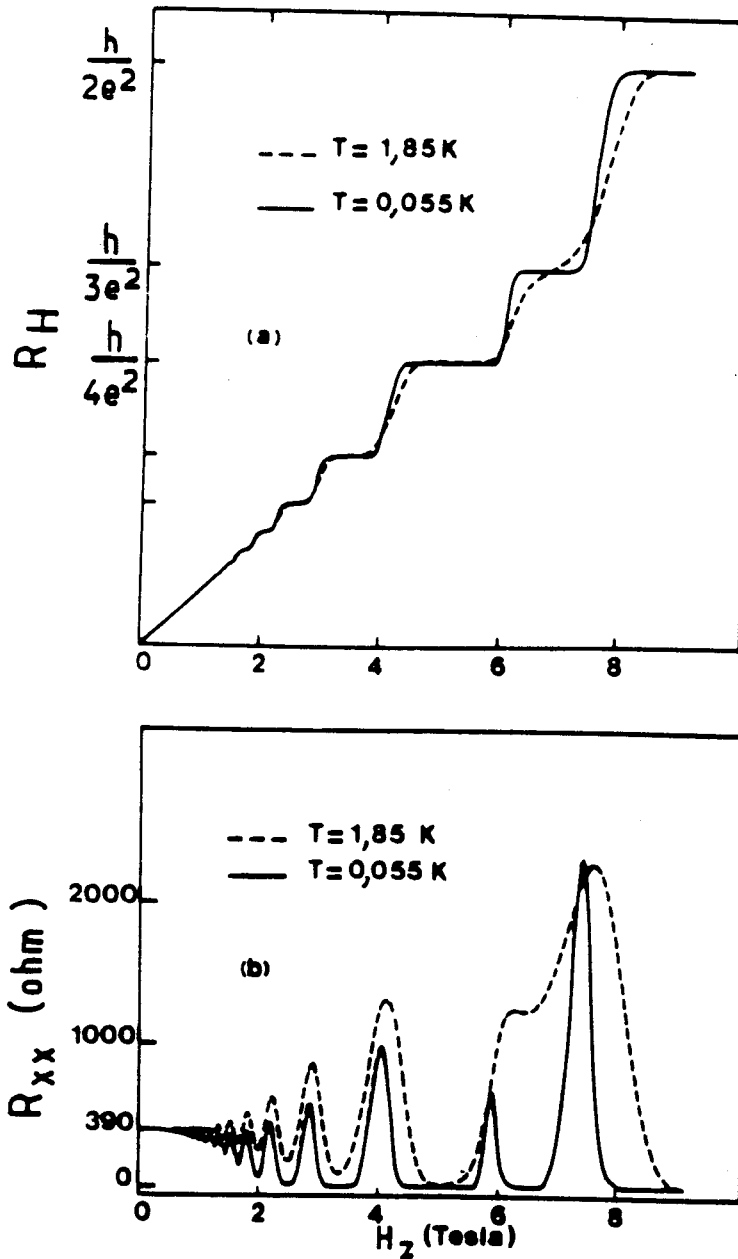
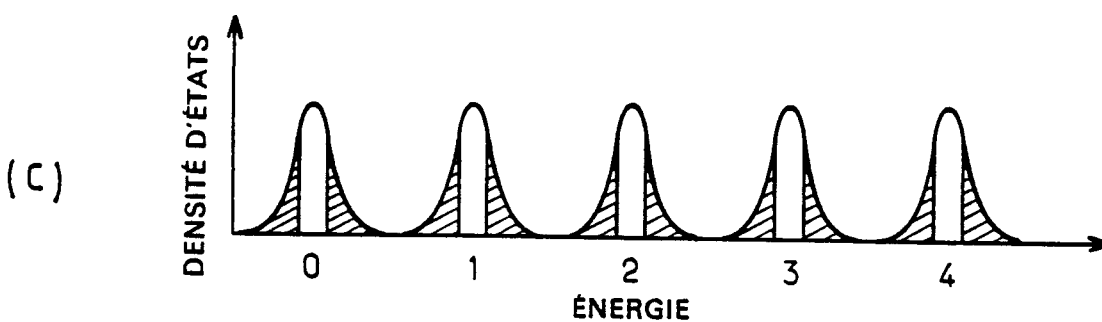


Figure 58 : Résistance de Hall R_H (a) et magnétorésistance R_{xx} (b) dans une hétéro-jonction $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-InP}$ à différentes températures. R_H présente des paliers dont la hauteur est quantifiée : $R_H = h/ne^2$. A basse température, les paliers s'élargissent et la magnétorésistance s'annule chaque fois que R_H présente un palier (A. Briggs et coll., Phys. Rev. B 27, 6549 (1983))

c) A cause des impuretés, les niveaux de Landau sont élargis en bandes par l'effet du désordre. Les états de queue de bande (hachurés) sont localisés.



origine dans le confinement du gaz d'électrons dans un puits très profond le long de la direction perpendiculaire à l'interface. Dans ces structures, à fort champ et basse température, l'effet Hall est rigoureusement quantifié : la résistance R_H est constituée d'une succession de plateaux à des sous-multiples de $h/e^2 = 25812,8 \Omega$ (figure 58) :

$$R_{xy} = R_H = \frac{h}{ne^2} \quad (\text{IV.97})$$

Par ailleurs, la magnétorésistance transverse au champ R_{xx} tend à s'annuler à basse température pour les valeurs du champ correspondant aux plateaux d'effet Hall (figure 52). Rappelons que la conductivité σ_{xx} s'annule aussi puisque

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (\text{IV.98})$$

Par ailleurs,

$$\sigma_{xy} = \frac{\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (\text{IV.99})$$

est égale à $\frac{1}{\rho_{xy}}$ lorsque $\rho_{xx} = 0$.

Dans ces systèmes, il a été montré que l'existence des plateaux de Hall est due aux impuretés contenues dans l'échantillon [9, 116]. A cause de ces impuretés, les niveaux de Landau sont élargis en bandes. Dans les queues de bandes, les états sont localisés par le mécanisme d'Anderson [117]. (figure 58) La conséquence essentielle est de maintenir le niveau de Fermi dans un gap des états étendus, lorsque H varie. Dans ce cas, la conductivité σ_{xx} , qui dépend de la mobilité des électrons au niveau de Fermi est nulle. Par contre, la résistance de Hall reste égale à h/ne^2 , comme si tous les états d'un niveau de Landau conduisaient (qu'il soient étendus ou localisés) [116]. La raison profonde de ce paradoxe a été invoquée par Laughlin [118]. Elle est liée à l'invariance de jauge de l'électrodynamique qui impose que, si $\sigma_{xx} = 0$, — c'est-à-dire si l'énergie de Fermi est dans un gap d'états étendus — la résistance de Hall soit alors strictement quantifiée.

Les conditions d'observation de l'effet Hall quantifié sont donc :

- l'existence d'un gaz d'électrons bidimensionnel ($\hbar \omega_c \ll \Delta E_j$),
- un petit nombre d'électrons de conduction, de l'ordre de $\frac{eH}{h}$ par unité de surface, c'est-à-dire de l'ordre de quelques 10^{11} e/cm².
- l'existence d'un "réservoir" d'électrons dont le rôle est joué par les états localisés.

Ces conditions ne sont pas réalisées dans la phase métallique du système que nous avons décrit : il y a trop d'électrons et le système n'est pas assez bidimensionnel. En revanche, elles peuvent l'être dans chacune des phases Onde de Densité de Spin :

- l'introduction de la troisième dimension dans le système que nous avons étudié se traduit pas un élargissement des niveaux de Landau de l'ordre de $t'_c \approx t_c^2/t_a$ et non pas de l'ordre de t_c (si le nesting est tridimensionnel). La condition $t'_c \ll E_c$ peut être facilement remplie. En somme dans les phases ODS le critère de bidimensionnalité n'est pas $t_c \ll t_b$ mais $t'_c \ll t'_b$, condition réalisée plus facilement.

- la densité électronique dans la phase métallique est grande, de l'ordre de $2 \cdot 10^{14}$ e/cm² dans le plan ab des sels de Bechgaard. Mais dans la phase condensée, cette densité est réduite d'un facteur de l'ordre de $t'_b/2vk_F$. Elle est de l'ordre de quelques 10^{11} e/cm², ce qui correspond à un petit nombre de niveaux de Landau si le champ est de l'ordre de 10 T.

- le rôle du réservoir est joué ici par les électrons de la bande de valence selon le processus que nous avons décrit au paragraphe IV-E.1. Le mécanisme du nesting quantifié est tel que la phase ordonnée contienne toujours un nombre entier de niveaux de Landau complètement remplis et bloque ainsi le niveau de Fermi entre deux niveaux.

Toutefois, le système que nous étudions présente des différences importantes avec ceux dans lesquels se manifeste l'effet Hall quantifié. Dans ces derniers, la structure de la bande ne varie pas avec le champ. Ici la structure de la poche de porteurs évolue avec lui, ce qui conduit en particulier à l'existence de transitions de phases du premier ordre entre chaque palier d'effet Hall. Ces phases ont des énergies très voisines et, de plus, la bande de

conduction est aussi très proche en énergie de la bande de valence, "le réservoir". Par ailleurs, dans l'effet Hall quantifié "ordinaire", le désordre est nécessaire pour l'observation des plateaux. Ici le désordre ne peut que nuire à l'observation des effets du nesting quantifié.

Tous ces éléments nouveaux n'ont pas encore été étudiés en détail mais il est probable que l'excitation thermique (ou tunnel : rupture magnétique) de ces faibles barrières d'énergie modifie de façon importante les effets attendus. Nous verrons que dans les sels de Bechgaard, une telle explication doit être recherchée.

CHAPITRE V

APPLICATION DE LA THEORIE DU NESTING QUANTIFIE AUX SELS DE BECHGAARD

ET EXPERIENCES RECENTES

*Toute connaissance de la réalité vient de
l'expérience et aboutit à elle.*

A. Einstein.

V - A. INTRODUCTION

Nous avons volontairement séparé l'étude théorique du gaz d'électrons 2D anisotrope sous champ, des résultats expérimentaux obtenus dans les sels de Bechgaard et qui ont été le moteur de ce travail. Il y a dans ces composés des aspects spécifiques ainsi que des détails qui n'ont pas été pris en compte dans notre théorie (en premier lieu, la forme exacte de la surface de Fermi) et qui expliquent des comportements quantitativement différents de ceux prédits par le modèle simple que nous avons développé. Autant que possible, nous essaierons de cerner ces aspects spécifiques, au fur et à mesure que nous discuterons les résultats expérimentaux. Néanmoins tous ceux-ci peuvent être décrits au moins qualitativement dans le cadre de notre théorie.

Nous discutons maintenant les expériences décrites au chapitre II en exposant aussi les travaux expérimentaux les plus récents qui confirment nos résultats.

Les conditions générales d'observation des effets du nesting quantifié semblent être réalisées dans les expériences dont nous avons rappelé les résultats au chapitre II :

- Typiquement la température est de l'ordre de 1K ou inférieure et le champ magnétique évolue entre 5 T et 10 T. L'énergie E_C , de l'ordre de 10 K à 20 K est donc assez grande devant l'énergie thermique pour observer des effets quantiques $E_C/k_B T > 2\pi$. (Si $t_a \approx 3000$ K, la "masse effective" $m^* = \hbar v_b = \hbar^2/2t_a$ absin $k_F a$ est égale à 0,75 m_e . Par conséquent, à 1 Tesla correspond une énergie E_C égale à 1,8 K).

- Le libre parcours moyen est grand : la mobilité μ est de l'ordre de $2 \cdot 10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ dans la phase métallique [10] et de l'ordre de $10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ dans la phase ODS [119], ce qui conduit respectivement à $\omega_C \tau = \mu H \approx 1$ et $\mu H \approx 50$ pour un champ de 5 teslas.

- La condition de bidimensionnalité est réalisée puisque $t_c \approx 10$ K et $t'_c \approx 0.01$ K.

- L'énergie typique qui décrit l'écart au nesting parfait dans ces composés est de l'ordre de $t'_b \sim 10$ K. Un champ modéré, de l'ordre de quelques teslas, est donc suffisant pour observer des effets quantiques (n petit)

Il semble par ailleurs que les propriétés électroniques des sels de Bechgaard soient très sensibles aux détails de la surface de Fermi. En effet, dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ trempé comme dans le $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, l'ordre ODS est très sensible à la pression et disparaît dès que $P \sim 3$ kbar. D'après une estimation de F. Creuzet et coll. [120], à cette variation de pression correspond une variation relative de t'_b , de l'ordre de 10 %. Par conséquent, il semble qu'une distorsion de la surface de Fermi de l'ordre de 1 K suffise à changer l'état fondamental du gaz électronique. Cette échelle d'énergie est remarquablement faible pour des propriétés électroniques.

Outre la pression, l'ordre des anions qui apparaît dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ lentement refroidi perturbe la forme de la surface de Fermi. L'ordre d'anions introduit une modulation de vecteur d'onde $(0, \frac{\pi}{b}, 0)$ et le potentiel dû aux anions modifie la surface de Fermi puisqu'il introduit de nouvelles réflexions de Bragg et double la cellule unité dans la direction b. La relation de dispersion 2D (eq. IV.12) est modifiée (figure 59) :

$$E_{2D}(\vec{k}) = v_F(|k_{//}| - k_F) + \frac{t(k_{\perp}) + t_1(k_{\perp} - \frac{\pi}{b}) \pm \sqrt{(t_1(k_{\perp}) - t_1(k_{\perp} - \frac{\pi}{b}))^2 + 4E_G^2}}{2} \quad (\text{V.1})$$

de sorte que, si $t_{\perp}(k_{\perp}) = -2t_b \cos k_y b - 2t'_b \cos 2k_y b$:

$$E_{2D}(\vec{k}) = v_F(|k_{//}| - k_F) \pm \sqrt{4t_b^2 \cos^2 k_y b + E_G^2} - 2t'_b \cos 2k_y b \quad (\text{V.2})$$

La dispersion dans la direction \vec{c} n'est pas modifiée. Le gap E_G ainsi introduit modifie de façon importante la nature du nesting qui est moins bon. Un gap même faible peut donc restaurer la phase métallique. Ceci explique pourquoi l'état fondamental est ODS dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ trempé alors qu'il est métallique dans le même échantillon lentement refroidi.

On ne peut donc s'attendre à décrire en détail la structure fine de certains résultats expérimentaux. Néanmoins, le mécanisme du nesting quantifié permet de comprendre les caractères généraux de l'ensemble de ces résultats.

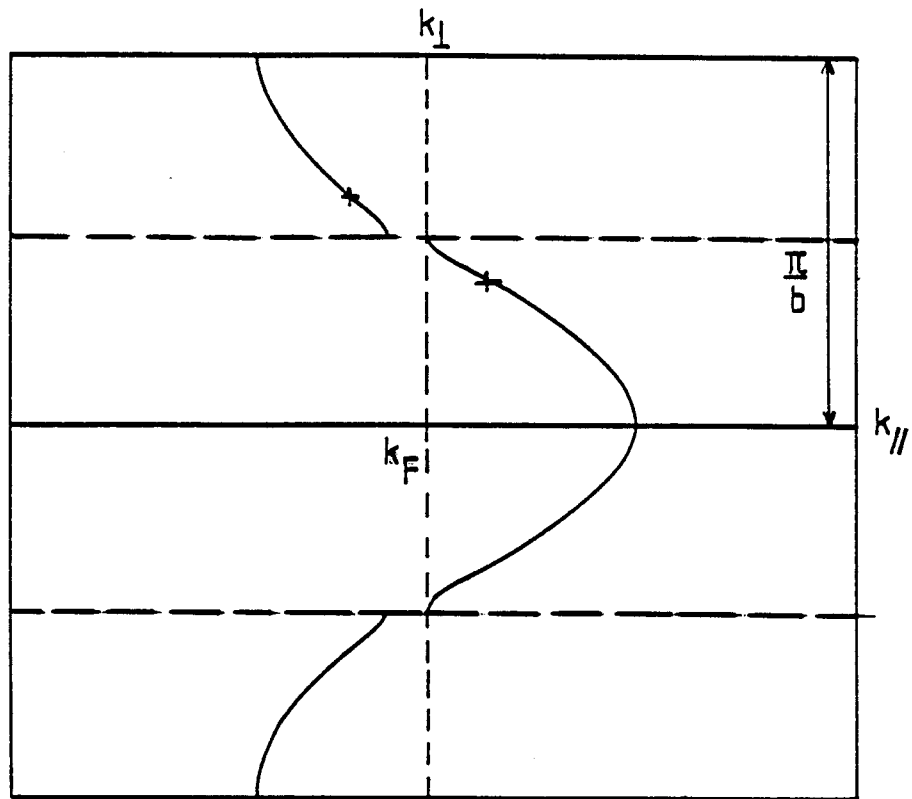


Figure 59

La formation d'un gap dû aux anions perturbe la surface de Fermi. En particulier, celle-ci présente un nouveau point d'inflexion. Si le gap est suffisamment grand, les propriétés de nesting doivent se trouver modifiées.

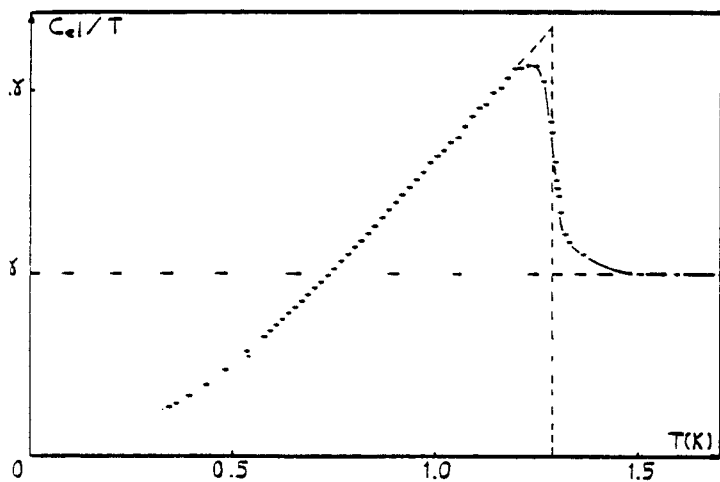


Figure 60

Chaleur spécifique électronique C_{e1}/T en fonction de T pour un champ $H = 6,1$ T appliqué le long de l'axe c'' , dans le $(TMTSF)_2ClO_4$ lentement refroidi [121, 122].

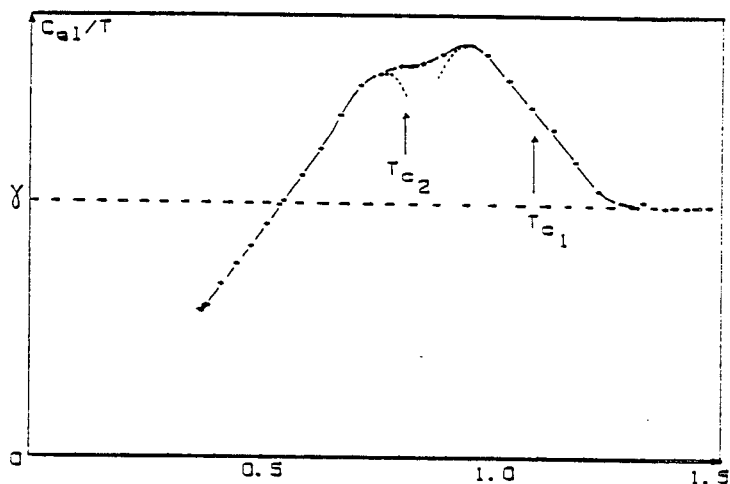


Figure 61

C_{e1}/T en fonction de la température T pour un champ $H = 5,35$ T parallèle à c'' [121, 122].

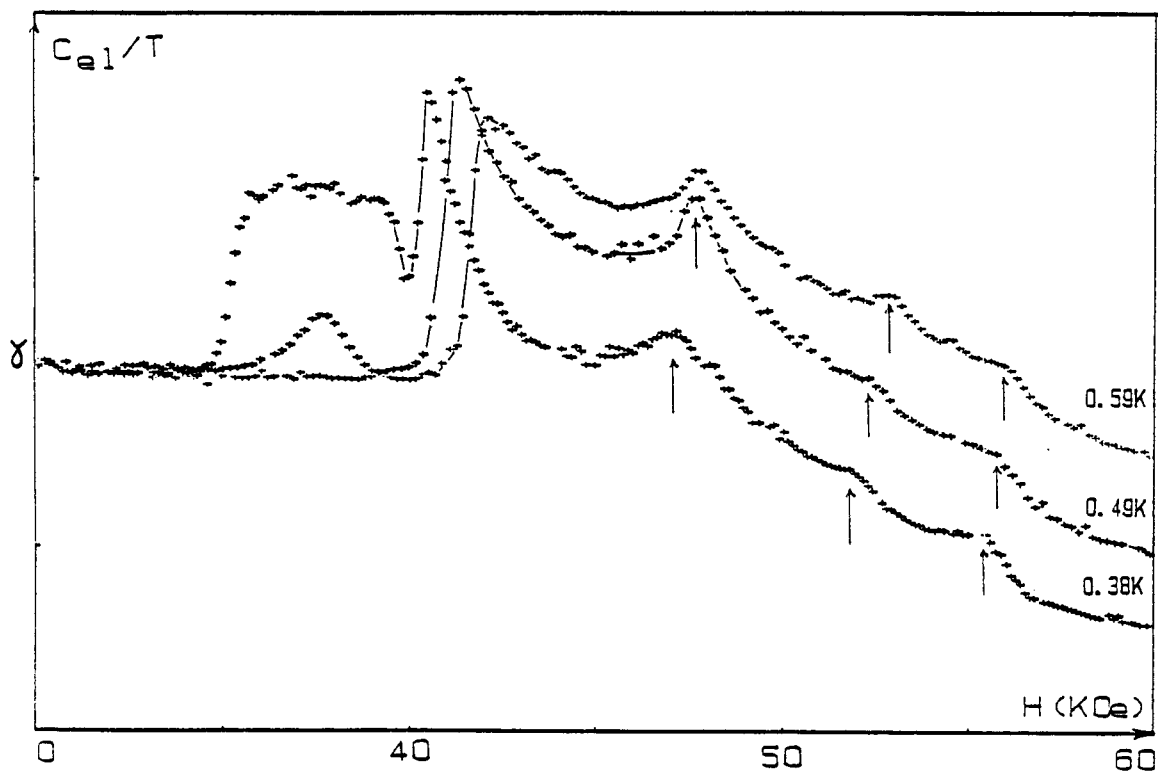


Figure 62 : C_{e1}/T en fonction du champ magnétique H pour différentes températures [121, 122]. Les anomalies sont interprétées par Pesty et coll. comme la signature de transitions de phase.

V - B. DISCUSSION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

V - B. 1. Chaleur spécifique

Les mesures de transport (magnétorésistance et effet Hall) rappelées au chapitre II suggéraient fortement l'existence d'une série de transitions de phases lorsque le champ augmente. Notre théorie donne une explication naturelle à cette cascade de transitions. Mais l'existence d'une telle cascade devait être confirmée par une mesure thermodynamique. Elle l'a été par les mesures de chaleur spécifique effectuées dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ par P. Garoche et F. Pesty. Leur expérience a établi les résultats suivants [121, 122] :

- Pour certaines valeurs du champ supérieures au champ seuil de 3,5 T, la chaleur spécifique électronique C_e présente une anomalie de type BCS caractérisant une transition du second ordre avec ouverture d'un gap. Notons toutefois que le saut de chaleur spécifique à la transition $\Delta C_e/C_e$ semble dépendre du champ et s'éloigner de sa valeur BCS (1,43) d'un facteur qui peut atteindre 2 (figure 60).

- Pour d'autres valeurs du champ, C_e présente une structure plus complexe qui semble être due à la succession de plusieurs transitions de phases (figure 61).

- La structure du diagramme de phases a pu être mieux comprise grâce à une technique originale qui consiste à mesurer la chaleur spécifique à température constante, en faisant varier le champ. La variation de $C_e(H)$ est présentée sur la figure 62 pour plusieurs températures. Au-delà du champ seuil, on constate ainsi l'existence de plusieurs anomalies qui signalent une succession de transitions. Par ailleurs, le "fond continu" diminue quand le champ augmente. Ceci se comprend qualitativement, d'une part par la diminution du nombre de porteurs sous champ, d'autre part par l'ouverture du gap qui augmente à température constante, et enfin par l'augmentation de l'écart entre niveaux de Landau qui rend de plus en plus difficile l'excitation thermique des porteurs.

Ce double balayage, en température et en champ, permet de déduire le diagramme de phases température-champ rappelé sur la figure 63. Ce diagramme est proche de celui obtenu par Kajimura et coll. [41] déduit des oscillations de magnétorésistance et où il n'était pas encore question de transitions de phases.

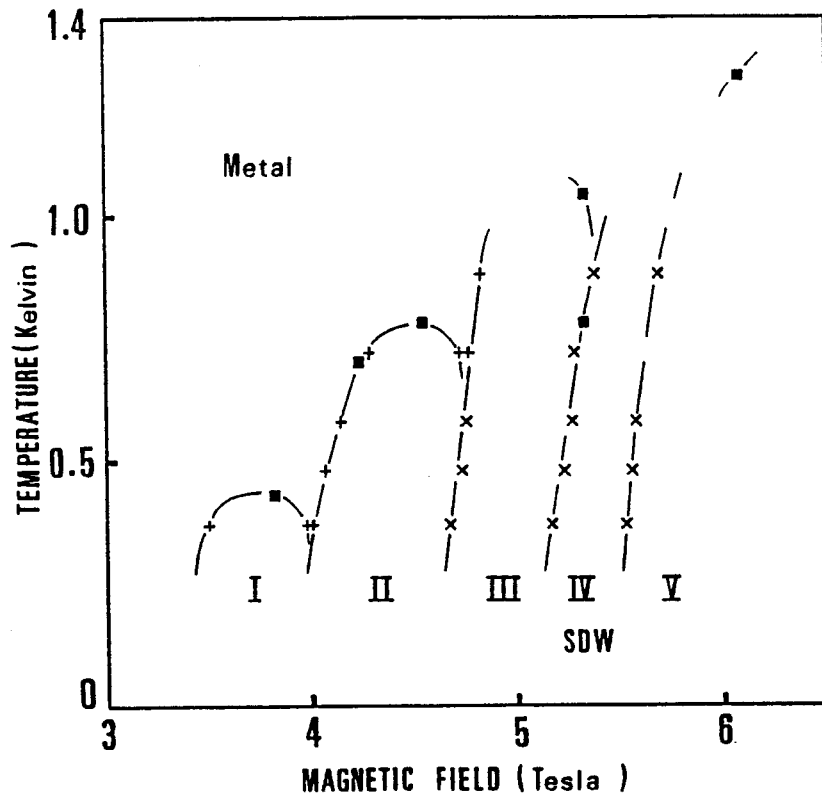


Figure 63 : Diagramme de phases de $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ sous champ magnétique déduit des mesures de chaleur spécifique [121, 122].

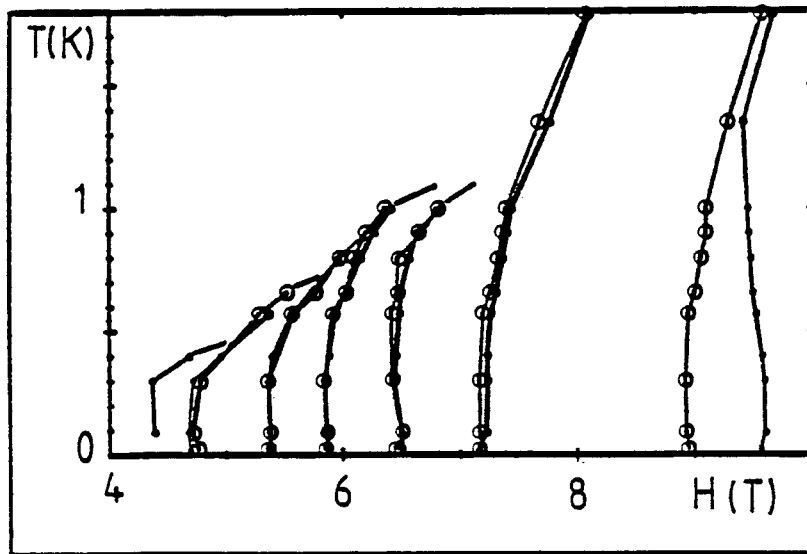


Figure 64 : Diagramme de phases déduit des mesures de magnétorésistance [41].

Mais les mesures de C_e sont mieux appropriées pour connaître la région haute température du diagramme, en particulier la structure de la ligne de transition métal-ODS (ce que permettent plus difficilement les expériences de transport puisque les oscillations de magnétorésistance disparaissent sur cette ligne de transition).

- L'hystérésis des transitions entre sous-phases et la chaleur latente n'ont pas encore été évaluées précisément mais, selon Garoche et Pesty, les résultats préliminaires semblent confirmer que ces transitions sont du premier ordre.

Le diagramme de phases ainsi obtenu expérimentalement est très voisin de celui que nous avons établi théoriquement. Il semble que, expérimentalement, il puisse y avoir, à température donnée, une réentrance partielle de la phase métallique entre deux phases ODS, réentrance que nous n'avons pas trouvée dans notre théorie. Toutefois, il est probable que cette réentrance dépende des détails du modèle et, si elle se confirme expérimentalement, qu'elle puisse être expliquée, par exemple, par une structure de la relation de dispersion légèrement différente de celle que nous avons utilisée.

V.- B. 2. Mesures de transport

V - B. 2. a) Magnétorésistance

Dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$, les mesures de magnétorésistance transverse [41] ont permis d'établir un diagramme de phases assez complet, voisin de celui déduit des mesures de chaleur spécifique (figure 64). Il est tentant d'essayer d'en évaluer plus quantitativement certaines caractéristiques. Le champ fondamental H_f qui caractérise la fréquence des transitions est de l'ordre de 23 T. Cette valeur correspond à une poche de porteurs dont la surface $A = A_{ZB} \times eabH_f/\pi\hbar$ est de l'ordre de 0,3 % de l'aire A_{ZB} de la zone de Brillouin, et à une composante $q_{//}$ du vecteur d'onde de l'ordre de $2 \cdot 10^{-2} \times 4\pi/v$. Cette proportion de porteurs se comprend si le vecteur de l'Onde de Densité de Spin est le vecteur de meilleur nesting. Les mesures d'effet Hall (rapport des paliers) ainsi que les arguments développés au paragraphe V-D montrent que le dernier champ de la cascade de transitions serait de l'ordre de 8 à 10 T. Le rapport H_f/H_0 serait donc de l'ordre de 2 à 3, ce qui indiquerait que la séquence de champs de transitions ainsi que les oscillations du vecteur d'onde ont une allure voisine de celle que nous avons trouvée dans notre modèle (IV-D.3.d). Ainsi le vecteur d'onde de nesting sous champ oscillerait sans jamais repasser par sa position

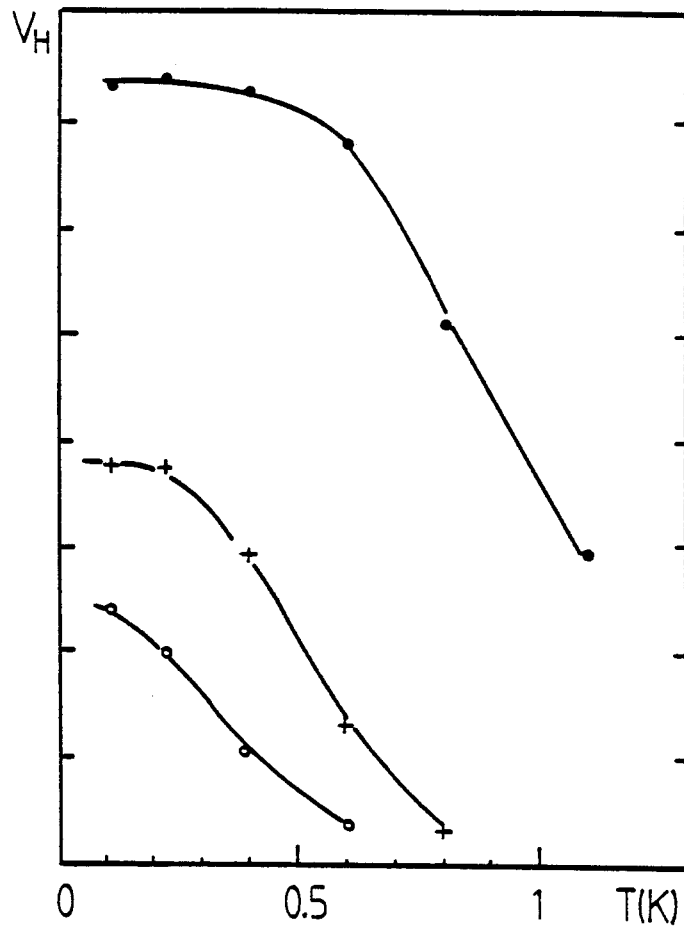


Figure 65

Evolution en température des plateaux d'effet Hall, dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$, lentement refroidi (d'après Ribault)

en champ nul (séquence a de la figure 49). Le nombre de porteurs diminue ainsi d'une phase n à la phase $n - 1$.

Notons par ailleurs que la fréquence caractéristique de la cascade de transitions varie peu avec la température, ce qui semble indiquer que la taille de la poche de porteurs dans chaque phase ODS n'est que peu réduite par la formation du gap ODS.

En ce qui concerne le sel $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ sous pression, la situation est moins claire puisque des fréquences différentes semblent avoir été observées. Selon Piveteau et coll., à basse température, le champ fondamental H_f est de 21,7 T, du même ordre de grandeur que dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ [123]. Mais, selon Kwak et coll., le champ H_f qui caractérise les oscillations à plus haute température et à plus haut champ est plus grand, de l'ordre de 76 T [21].

V - B. 2. b) Effet Hall

Chaque sous-phase étant caractérisée par une valeur du nombre quantique n_0 , nous en avons déduit que, dans chacune de ces sous-phases, la tension de Hall devait être quantifiée.

Les mesures effectuées par Ribault et coll. [42] dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ montrent qu'en effet la tension de Hall au-dessus du champ seuil présente une structure en paliers (figures 12,13). Toutefois, bien que cette structure soit tout à fait inhabituelle, elle ne présente pas pour autant la remarquable régularité des plateaux de Hall observés dans les hétérojonctions de semi-conducteurs. En particulier, la hauteur des plateaux augmente avec la température (ce qui n'est pas le cas dans l'effet Hall quantifié où, à haute température, la position centrale du plateau encore mal formé ne varie pas avec T) et se sature à basse température (figure 65). La hauteur des trois derniers plateaux semble ainsi converger vers des valeurs qui sont dans des rapports voisins de $\frac{1}{3}$, $\frac{1}{2}$, 1. Mais cette évaluation reste très approchée. Par ailleurs, à plus faible champ, la hauteur de chaque plateau n'a pas atteint sa saturation. Il semble ainsi difficile d'observer une séquence de plateaux successifs dans des rapports simples comme dans les hétérojonctions. De plus, la magnétorésistance ne s'annule pas et c'est là une différence importante avec l'effet Hall quantifié. Ces différences ont probablement pour cause les raisons invoquées au paragraphe IV-E.3.

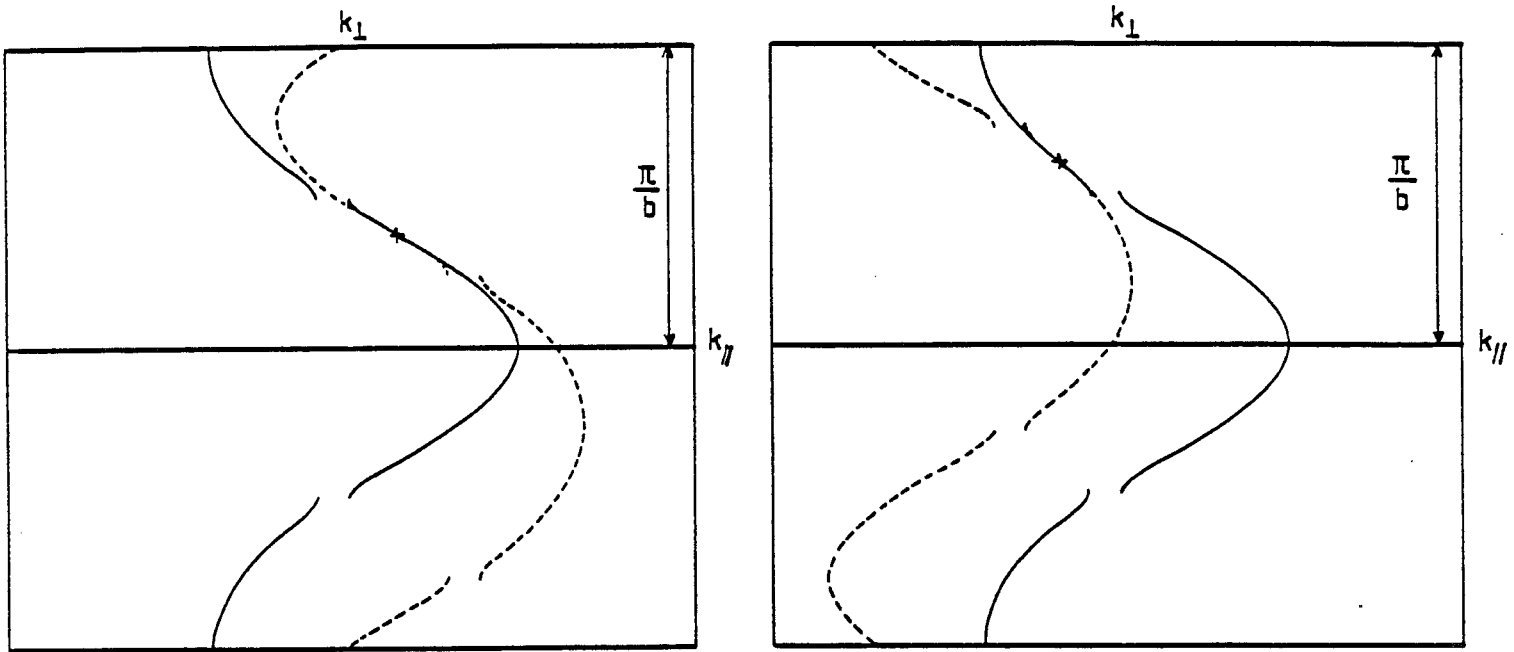


Figure 66

La formation d'un gap dû à l'ordre des anions est une cause possible pour le changement de signe de l'effet Hall. A cause des deux points d'inflexion, il y a deux vecteurs de "bon nesting". A ces deux vecteurs, correspond une poche de porteurs de signe différent.

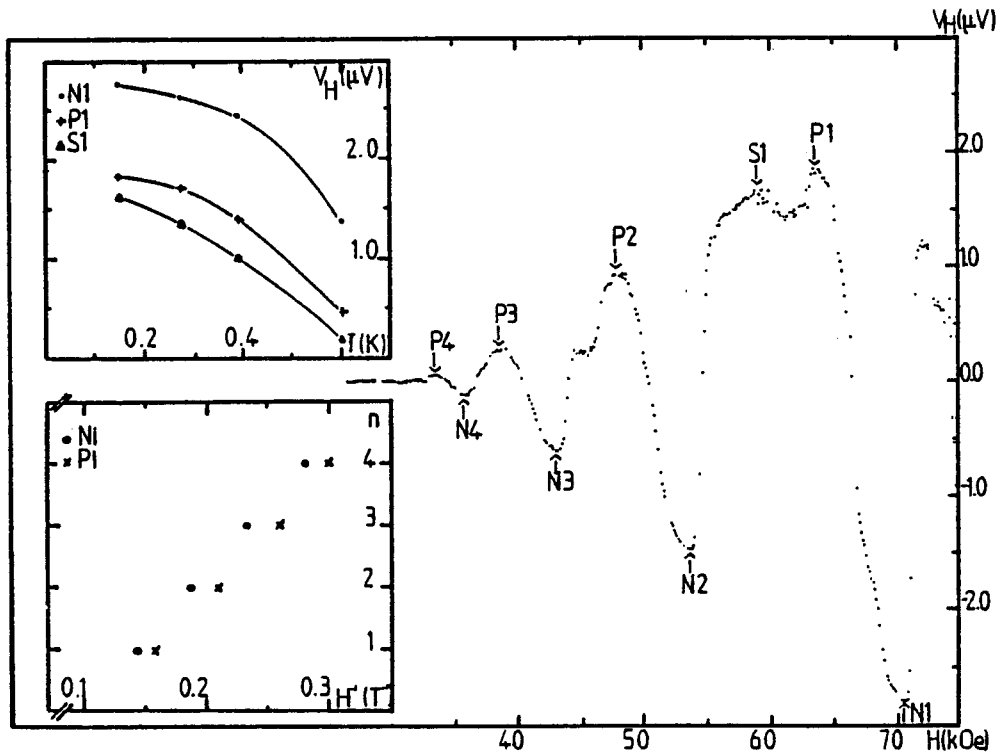


Figure 67 : Variation de la tension de Hall avec le champ magnétique, dans le $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ sous pression $P = 10.5 \text{ kbar}$ [123].

Dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ très lentement refroidi, Ribault a observé un changement de signe de l'effet Hall avec des plateaux négatifs moins bien formés [46] (figure 13). Quelle peut-être la raison de ce changement de signe ? Il résulte d'une modification des propriétés électroniques liée à la vitesse de refroidissement et donc probablement à l'ordre des anions. Or, nous avons vu que cet ordre d'anions induit des modifications de la surface de Fermi, à savoir la formation d'un gap dans la direction b. Une explication naturelle pour comprendre ces changements de signe est donc que l'apparition de ce gap modifie les propriétés de nesting et conduit tantôt à une poche d'électrons, tantôt à une poche de trous dans la phase ODS. La figure 66 montre comment un tel mécanisme est possible.

Cette explication simple ne peut être invoquée dans $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, pour comprendre les changements de signe de l'effet Hall qui ont été aussi observés récemment dans ce composé [123, 124]. La structure de la tension de Hall y est voisine de celle observée dans le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ très lentement refroidi, quoique les paliers soient ici moins bien marqués. Deux aspects distincts restent à comprendre:

- le changement de signe de l'effet Hall (figure 67). Les anions PF_6^- sont centrosymétriques. Il n'y a donc pas dans ce sel d'ordre des anions pour perturber la structure de la surface de Fermi comme dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$. Il est probable que la géométrie de la surface de Fermi soit telle qu'il existe deux vecteurs de meilleur nesting dont la coordonnée q_{\parallel} est positive pour l'un et négative pour l'autre. Remarquons que, avec la relation de dispersion que nous avons utilisée ($t'_b \neq 0$), la susceptibilité n'est pas beaucoup plus faible pour des valeurs négatives de q_{\parallel} (figure 68). Sous champ, nous avons obtenu pour $q_{\parallel} < 0$ ($n < 0$) des maxima de la susceptibilité dont l'amplitude est toujours légèrement inférieure à celle des maxima à $n > 0$ (figure 69). Nous pensons qu'une légère perturbation de la surface de Fermi devrait permettre de comprendre, sous champ, l'existence de deux cascades de phases alternées correspondant l'une à des électrons, l'autre à des trous. (figure 69).

- les plateaux mal formés. Nous n'avons pas de théorie quantitative pour comprendre cet aspect. Il est probable qu'il soit dû, comme la non annulation de la magnétorésistance, aux excitations thermiques des électrons de la bande de valence ou des autres sous-phases ainsi qu'au désordre.

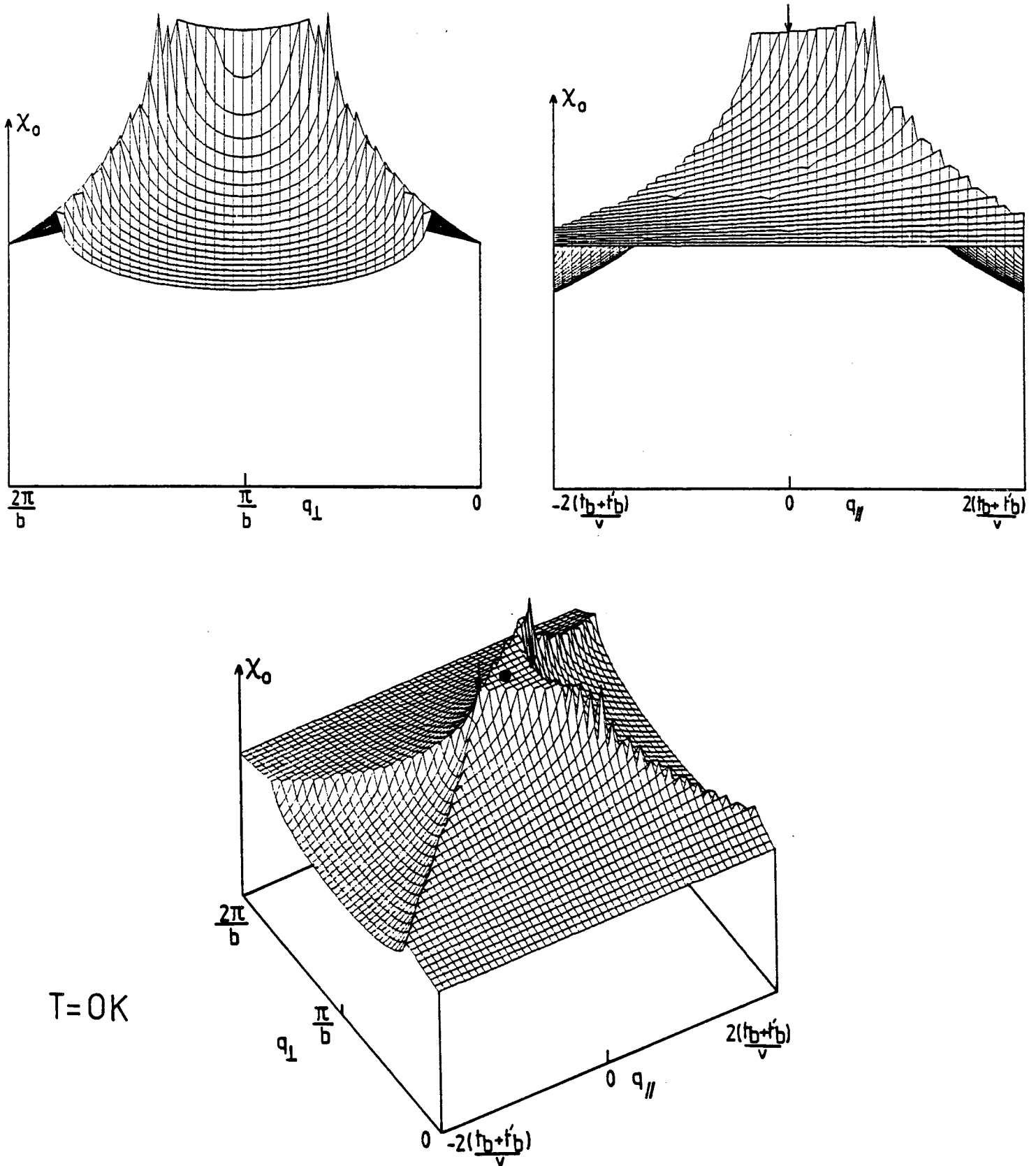


Figure 68 : Susceptibilité $\chi_0(\vec{Q})$ en champ nul en fonction des deux composantes du vecteur de nesting $\vec{Q} = (2k_F + q_{\parallel}, q_{\perp})$ lorsque $t'_b \neq 0$. χ_0 n'est pas beaucoup plus faible pour les valeurs négatives de q_{\parallel} que pour les valeurs positives. Le point indique la position du vecteur $(2k_F, \pi/b)$.

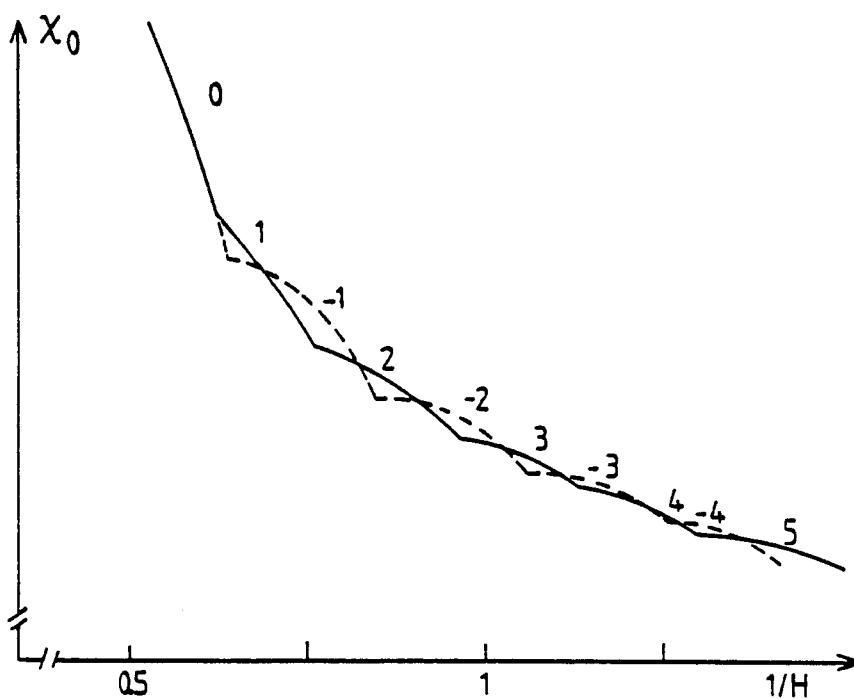
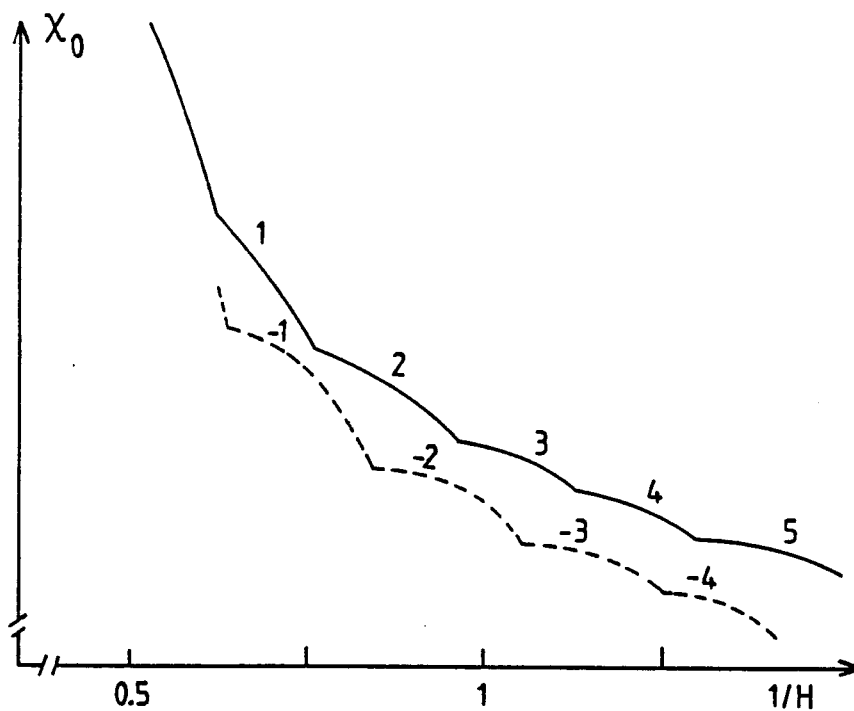


Figure 69 : a) Pour la relation de dispersion que nous avons utilisée $t_1(p) = - 2t_b \cos p - 2t'_b \cos 2p$, la susceptibilité sous champ magnétique est plus grande pour les valeurs positives de n (trait plein) que pour les valeurs négatives (tirets, schématique).

b) Nous suggérons qu'il existe des relations de dispersion telles que deux nappes de $x_0(H)$ correspondant à des valeurs positives et négatives de n , puissent se chevaucher. Ceci conduit à des sous-phases ODS caractérisées par des porteurs de signes opposés.

V - B. 3. Aimantation

Récemment, Naughton et coll. ont mesuré l'aimantation (ainsi que la magnéto-résistance) du sel $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ recuit [119]. La dépendance en champ et en température des anomalies observées ont aussi confirmé l'existence d'une cascade de transitions de phases. Ainsi, à 60 mK, ces auteurs trouvent une série de discontinuités de l'aimantation de plus en plus grandes lorsque le champ passe de 3 à 8 T. (figure 70). Le saut d'aimantation est positif, ce qui se comprend dans l'analyse thermodynamique que nous avons faite au paragraphe IV-E.2.b). Ces sauts correspondent exactement aux changements de pente de la magnéto-résistance. Le saut d'aimantation entre sous-phases est actuellement la confirmation la plus directe du caractère premier ordre de chaque transition.

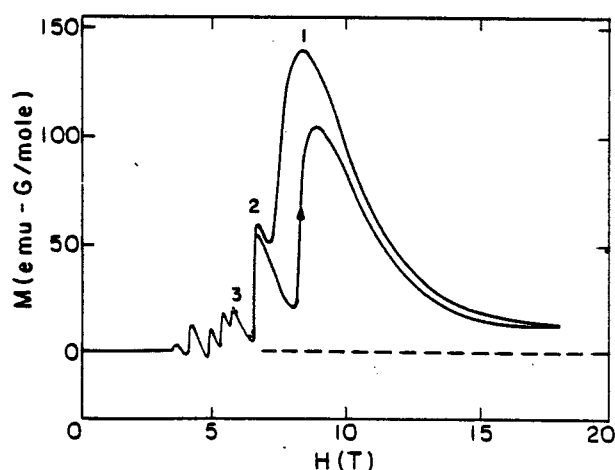


Figure 70 : Mesure d'aimantation en fonction du champ magnétique dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ lentement refroidi [119].

V - B. 4. Diagramme de phases sous pression

F. Creuzet et coll. ont étudié la stabilité des phases induites par le champ dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ à l'aide de mesures de RMN [120]. L'application d'une pression modérée a pour effet de réduire considérablement la température de transition métal-ODS, de l'ordre de 30 % par kbar à 7,39 T.

Cette réduction est liée à l'augmentation sous pression de l'intégrale de transfert t_b donc de t'_b . Les phases ODS se trouvent ainsi déstabilisées facilement puisque, d'après l'expression IV.71, la température de transition varie rapidement avec t'_b . On a approximativement

$$\frac{dT_c}{T_c} \approx - \frac{1}{\beta_n} \frac{dt'_b}{t'_b} \quad (V.3)$$

avec $\beta_n = \max J_n^2(z)$. T_c chute d'autant plus vite que le nombre quantique qui indexe la sous-phase est élevé. Pour un champ de 7,39 T, on s'attend à ce que n soit petit, typiquement égal à 1 ou 2, de sorte que $\beta_n \approx 0,2$. Une variation $\frac{dt'_b}{t'_b}$ de l'ordre de 6 % par kbar expliquerait l'ordre de grandeur de la variation de T_c observée. Un tel ordre de grandeur pour $\frac{dt'_b}{t'_b}$ semble raisonnable, si on se réfère aux estimations faites, dans TTF-TCNQ, de l'évolution du transfert t_b sous pression [120]. Notons par ailleurs que l'évaluation théorique V-3 est très approchée puisqu'elle est dérivée d'une expression de $T_c(H)$ dont l'estimation doit être considérée avec précaution (§ IV-D.3.b et appendice E).

Les mesures de magnétorésistance de G. Creuzet et coll. [125] montrent que, sous pression, l'ensemble du diagramme de phases se translate vers des champs plus élevés, ce qui est cohérent avec l'observation de la chute de T_c à champ fixé. La variation des champs de transition avec la pression est de l'ordre de $dH/H \sim 25$ à 50 % par kbar, du même ordre que dT_c/T_c comme on peut le comprendre d'après la formule approchée IV.71.

L'évolution du diagramme de phases vers les hauts champs pour des pressions relativement modérées confirme la sensibilité des phases ODS au nesting de la surface de Fermi qui devient plus mauvais lorsque la pression augmente.

V - C. COMPARAISON AVEC LES DIAGRAMMES DE PHASES THEORIQUES

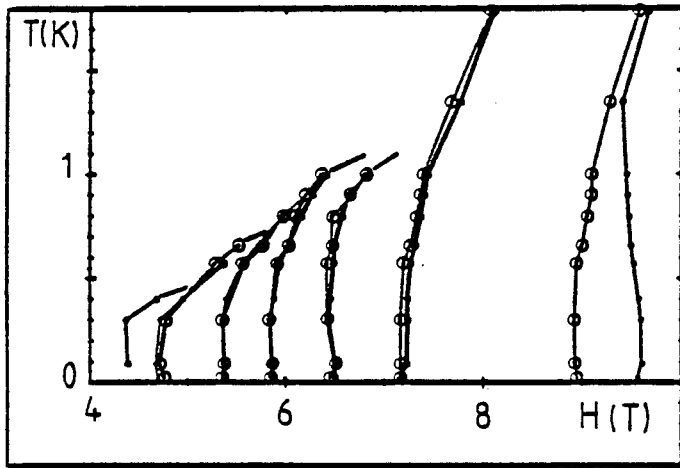
Dans le premier article de Gor'kov et Lebed, discuté au paragraphe IV-D.1, le fait de bloquer le vecteur de nesting conduisait à un diagramme de phases constitué de réentrances métal-ODS, diagramme qui ne décrit pas la réalité expérimentale (figure 71 a'). Par ailleurs, cette théorie ne permet pas de comprendre la structure observée de l'effet Hall.

Depuis notre travail, ces auteurs ont envisagé la possibilité de faibles oscillations du vecteur longitudinal autour de $(2k_F + 4t_B/v, 0, 0)$ avec un champ fondamental $H_f = 4t_B/evb$ [126]. Selon eux, ces oscillations disparaissent à basse température car le paramètre d'ordre (le gap ODS) réduit fortement la taille de la poche ODS. Ils s'attendent, à basse température, à obtenir "plusieurs phases ODS dont le vecteur d'onde et d'autres propriétés varient avec le champ, ces phases étant séparées par des transitions du premier ordre". Mais ils ne précisent pas du tout la structure du vecteur d'onde dans ce cas, ni le mécanisme responsable des transitions. Ils proposent un second diagramme de phases (figure 71 b').

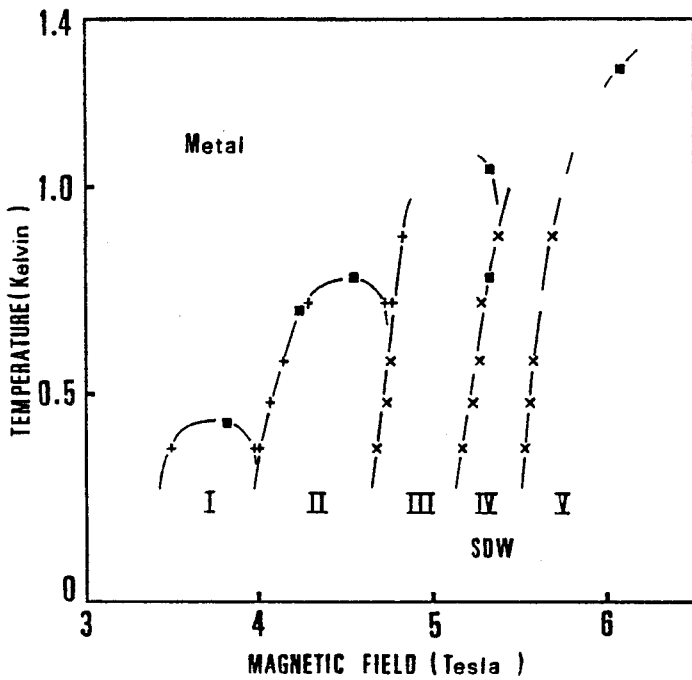
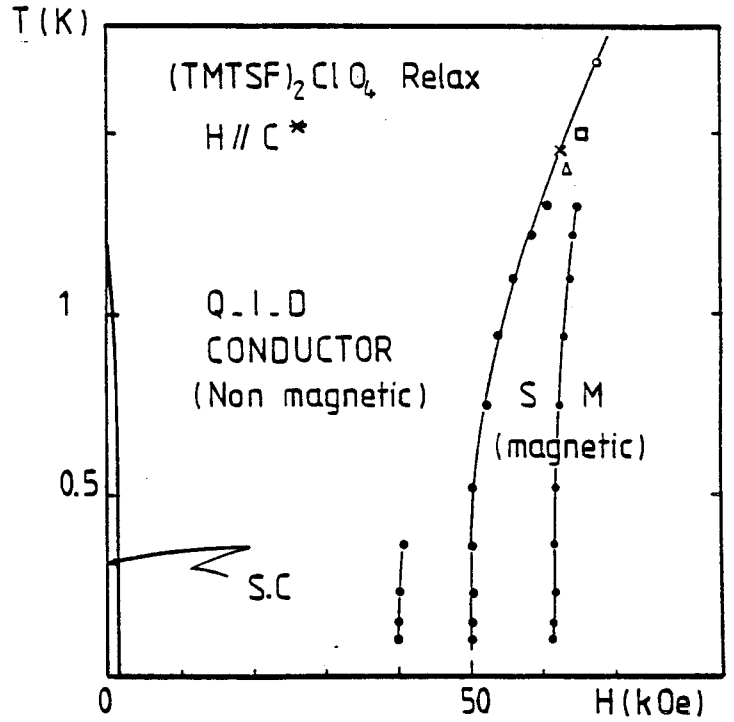
Les mesures de chaleur spécifique qui ont permis d'explorer le voisinage de la ligne de transition contredisent ce diagramme de phases et confirment celui que l'on déduit du nesting quantifié. Par ailleurs, la fréquence des oscillations de la magnéto-résistance, signatures des transitions de phase successives, ne semble pas varier de façon importante avec la température. Enfin, le champ fondamental associé à la fréquence proposée par Gor'kov et Lebed est 10 fois plus grand que celui mesuré expérimentalement.

Le diagramme de phases que nous avons proposé semble décrire le mieux les caractéristiques essentielles des résultats expérimentaux, en particulier le diagramme de phases et la structure inhabituelle de l'effet Hall (figure 71).

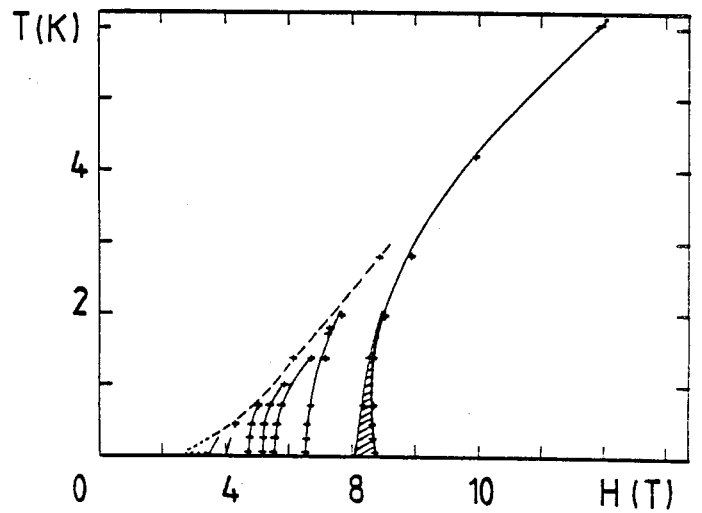
a



b

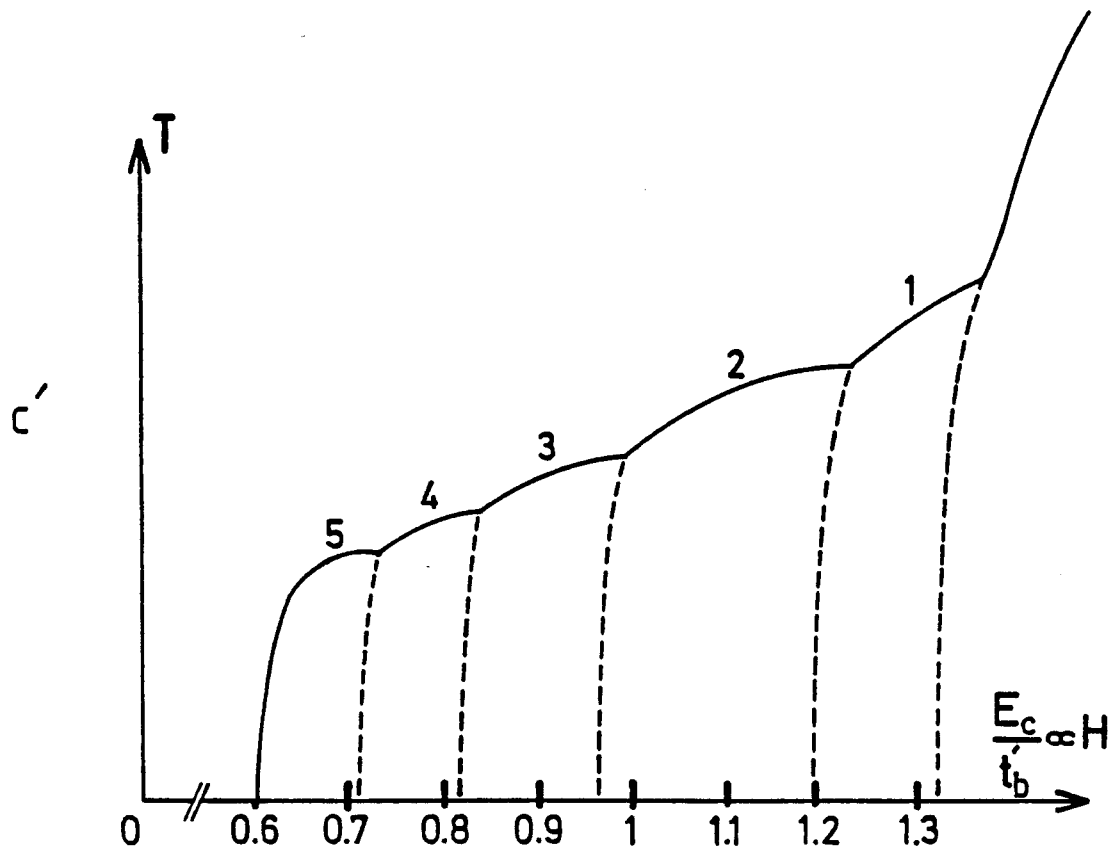
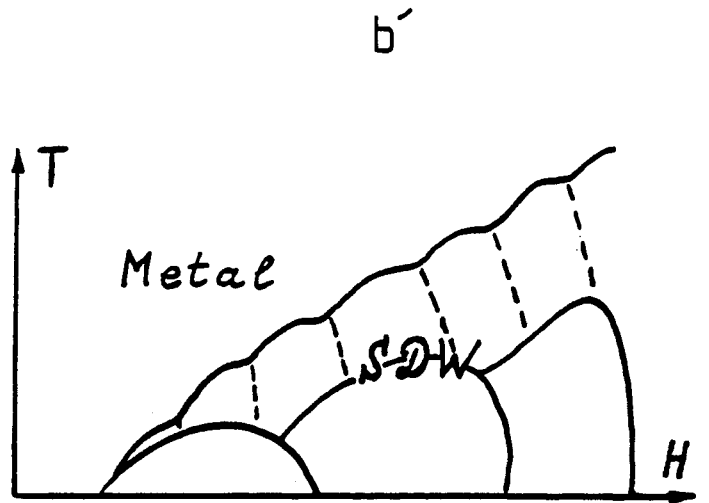
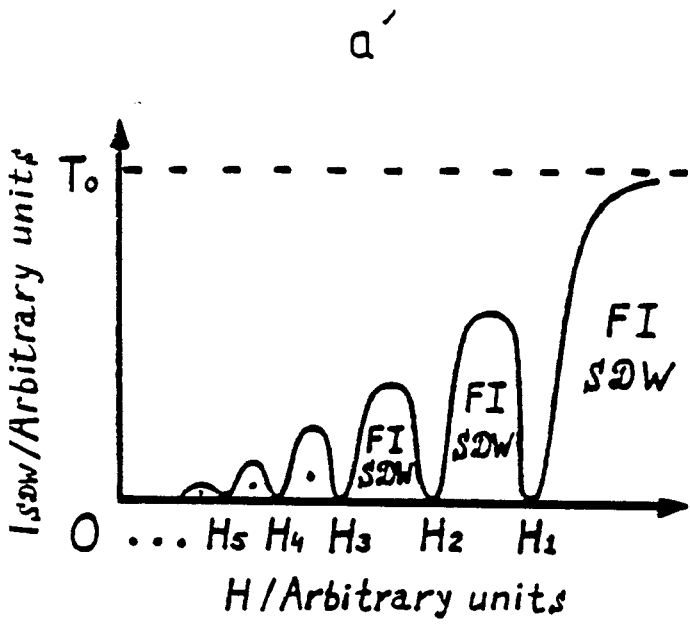


c



d

Figure 71 : Diagrammes de phase (T, H) pour le $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ lentement refroidi, d'après des mesures de magnétorésistance (a), effet Hall (b), chaleur spécifique (c) et aimantation (d).



Diagrammes de phase théoriques proposés par Gor'kov et Lebed [100] (a), Gor'kov et Lebed [126] (b) et notre travail (c).

V - D. L'EVOLUTION DU VECTEUR D'ONDE SOUS CHAMP EST-ELLE OBSERVABLE ?

Il serait intéressant de mesurer la variation du vecteur d'onde $\vec{Q}_0(H)$ de l'onde de Densité de Spin sous champ à l'aide, soit d'une expérience aux neutrons sur des échantillons deutérés, soit de la RMN pour suivre l'évolution des champs locaux liée à la variation du vecteur d'onde.

Mais les variations du vecteur d'onde sont faibles devant le vecteur d'onde de Fermi. Nous essayons ici de les estimer. Pour cela, il faut connaître :

- d'une part la position du vecteur en champ nul
- d'autre part la séquence qui décrit l'évolution du vecteur d'onde sous champ à partir de sa position en champ nul.

La position du vecteur de meilleur nesting en champ et température nuls est donnée par les expressions IV.25. Si t'_b/t_b est de l'ordre de 30, alors $q_y^0 b = 180^\circ - q_x^0 b \approx 15^\circ$ et $q_{//}^0 = 0,1 \times 4t_b/v$. A température finie, le vecteur de meilleur nesting se rapproche de $(2k_F, \pi/b)$. Ces estimations à température nulle sont donc une limite supérieure. Par ailleurs, l'estimation de $q_{//}^0$ que l'on peut déduire du champ fondamental H_f (23 T) dans $(TMTSF)_2ClO_4$ est plus faible : $q_{//}^0 = 0.035 \times 4t_b/v$. On peut donc évaluer l'écart au nesting $\vec{Q}_t : (q_y = \pi - q_x)$

$$5^\circ \lesssim q_y^0 b \lesssim 10^\circ$$

Si la séquence d'évolution du vecteur d'onde sous champ est celle que nous avons établie au paragraphe IV-D.3.d (figure 50), l'amplitude maximale est de l'ordre de 1/5 de $q_y^0 b$:

$$\Delta q_y b \approx 1^\circ$$

La variation correspondante de la composante longitudinale $q_{//}$ est beaucoup plus faible car

$$\Delta q_{//} \approx \frac{t_b}{t_a} \Delta q_y \approx \Delta q_y / 10.$$

V - E. AU-DELA DE 10 TESLAS....

Les mesures de magnéto-résistance de Kajimura et coll. dans $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ semblaient indiquer que pour un champ de l'ordre de 9T, l'hystérésis est bien plus importante que pour la série de transitions qui précède à plus bas champ [40, 41] (figure 9). Ceci semblait indiquer une transition fortement du premier ordre, de nature bien différente de celles qui précèdent. Bando et coll. [24] puis Chaikin et coll. [44, 45] rapportent par ailleurs, dans le même composé, l'observation d'oscillations de plus courte période au-delà de 10 T environ avec un champ fondamental de l'ordre de 275 T, c'est-à-dire environ 10 fois plus grand que dans la région qui précède. L'hystérésis autour de 8-10 T a aussi été observée dans des mesures d'effet Hall [43] et d'aimantation [119].

Ulmet et coll. [127, 129] ont exploré cette région haut champ jusqu'à 32 T (mais à haute température ≈ 4 K) par des mesures de magnéto-résistance. Les oscillations de courte période sont observées au-delà de 10 T, avec un champ fondamental évalué à 260 ± 10 T, en bon accord avec les résultats de Bando et Chaikin à plus basse température.

Il serait naturel de penser que cette phase haut champ soit la dernière de la cascade que nous avons décrite, correspondant au nombre quantique $n = 0$ c'est-à-dire à $\vec{Q} = (2k_F, \pi/B)$. Mais cela n'explique pas les oscillations observées à haut champ. Par ailleurs, les résultats expérimentaux suggèrent plutôt les hypothèses suivantes :

- L'hystérésis importante est l'indication d'une transition vers une phase ordonnée de nature différente de celles qui précèdent et correspondent à un type de nesting différent.

- Les oscillations de courte période de la phase haut champ sont dues à des poches de porteurs environ 10 fois plus grandes que dans les phases "bas champ"

- Un vecteur de nesting longitudinal de la forme $(2k_F, 0, 0)$ ou $(2k_F + 4t_b/v, 0, 0)$ comme celui proposé par Gor'kov et Lebed pour les phases bas champ autoriserait des poches de porteurs de la taille nécessaire pour comprendre la fréquence des oscillations observées.

Il reste à comprendre le mécanisme de transition entre une phase caractérisée par un vecteur de nesting $\vec{Q}_0(H)$ proche de \vec{Q}_t et une phase où le vecteur est longitudinal. Cela peut s'expliquer en supposant une dépendance en vecteur d'onde du paramètre de Stoner I , donc de la température T_c° , qui favorise le nesting longitudinal [108].

$$I(\vec{Q}_\ell) > I(\vec{Q}_t)$$

et donc $T_c^\circ(\vec{Q}_\ell) > T_c^\circ(\vec{Q}_t)$

Rappelons que la température critique pour le nesting transverse est telle que, de façon approchée

$$\ln \frac{\pi T_c}{eHvb} \approx \frac{\ln \frac{\pi T_0(\vec{Q}_t)}{4t_b}}{J_n^2\left(\frac{2t_b}{eHvb}\right)} \quad (V.4)$$

Pour le nesting au vecteur d'onde $(2k_F + \frac{4t_b}{v}, 0, 0)$, elle s'écrit

$$\ln \frac{\pi T_c}{eHvb} \approx \frac{\ln \frac{\pi T_0(\vec{Q}_\ell)}{4t_b}}{J_n^2\left(\frac{4t_b}{eHvb}\right)} \quad (V.5)$$

Les deux lignes critiques $T_c(H)$ correspondant à ces deux vecteurs de nesting se croisent pour une valeur finie du champ avec un saut de \vec{Q} conduisant à une transition fortement du 1er ordre. Pour des formes raisonnables de $I(\vec{Q})$, on s'attend à ce que la transition apparaisse pour des nombres quantiques voisins de 1. Un tel changement de nesting pourrait donc expliquer la forte hystérésis observée vers $9T$. Toutefois, puisque pour le nesting à \vec{Q}_ℓ la poche de porteurs dans la phase condensée est grande, on devrait s'attendre à une chute de l'effet Hall qui ne semble pas être observée.

Il faut alors songer à un nesting au vecteur d'onde $\vec{Q}_\ell = (2k_F, 0, 0)$ qui correspond à des surfaces de Fermi compensées, nesting qui serait favorisé par une interaction piquée à ce vecteur d'onde. S. Barišić a suggéré que ce pourrait être dû au rôle des processus Umklapp.

Signalons enfin que, selon les mesures d'aimantation, la transition métal-"phase haut champ" serait du premier ordre [119]. Une analyse Ginzburg-Landau devrait permettre de comprendre cette transition. L'ébauche de calcul que nous avons commencée en appendice G montre que le coefficient d'ordre 4, b_n , pourrait être négatif, signe d'une transition du 1er ordre.

Il est donc possible qu'une structure particulière de $I(\vec{Q})$ puisse jouer un rôle important. Ainsi, il semble que, pour comprendre le diagramme de phase induit par le champ dans les sels de Bechgaard, on doive distinguer deux régimes bien distincts. Le premier est décrit par le mécanisme de nesting quantifié. Le second serait dû à un nesting longitudinal. Le diagramme de phase que nous proposons pour ces deux régimes semble cohérent avec les résultats expérimentaux (figure 72).

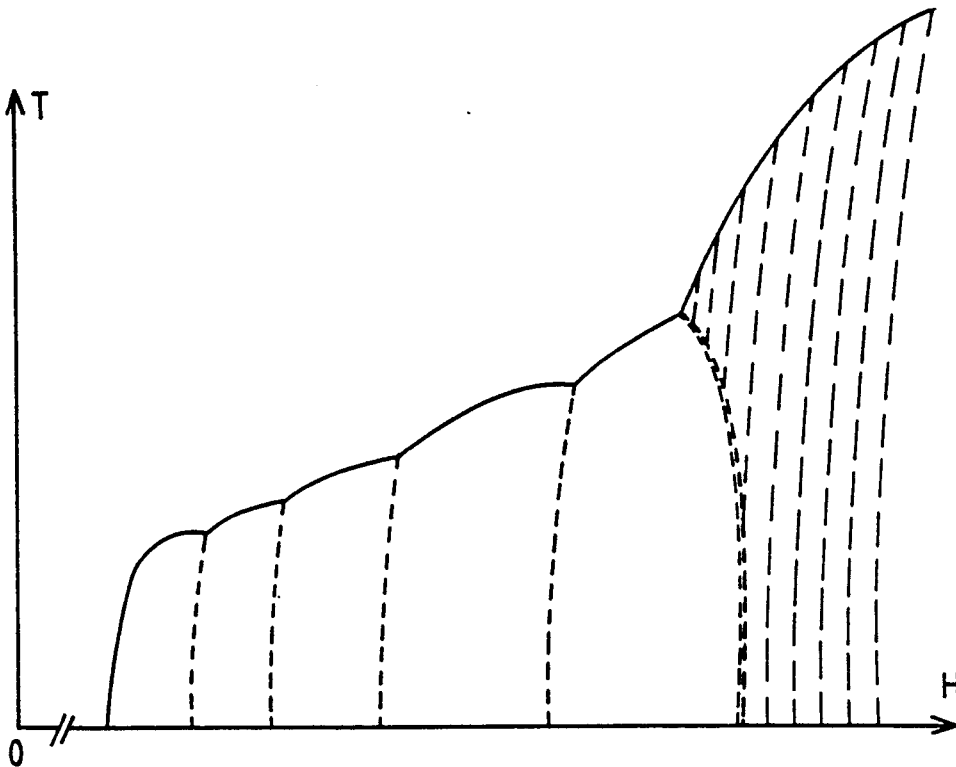


Figure 72 : Diagramme de phase proposé pour décrire l'ensemble des propriétés sous champ de $(TMTSF)_2ClO_4$ lentement refroidi. Dans la région "champ faible", le vecteur d'onde oscille près du vecteur de meilleur nesting en champ nul. La poche de porteurs associée est petite ; sa taille est proportionnelle à t_b' . La cascade de transitions de phase est décrite par le mécanisme du nesting quantifié. A champ plus fort, le vecteur de nesting devient longitudinal et la poche de porteurs est plus grande, d'ordre t_b , conduisant ainsi à des oscillations beaucoup plus rapides. Les deux régimes "champ faible" et "champ fort" sont séparés par une transition fortement du premier ordre, due au changement de nesting.

V - F. LE VECTEUR DE NESTING DANS LES SELS DE BECHGAARD

La relation de dispersion IV 9 est plus réaliste, pour la description des sels de Bechgaard, que la relation simple que nous avons utilisée jusque là. Elle conduit à un vecteur de nesting incommensurable, ainsi que l'ont montré Yamaji et Delrieu et coll. [96, 97] :

$$\vec{Q}_i = [2k_F, \frac{\pi}{b} (1 - \frac{2\varphi}{\pi})] \quad \text{avec } \varphi = - \arctg \frac{t_{I_1} + t_{I_2} - 2\sqrt{2} t_{I_4}}{t_{I_1} + t_{I_2} + 2\sqrt{2} t_{I_3}} \quad (V.6)$$

Dans $(TMTSF)_2ClO_4$, Grant a estimé [95] (figure 30) :

$$\begin{array}{ll} t_{S_1} \approx 4560 \text{ K} & t_{I_2} \approx -631 \text{ K} \\ t_{S_2} \approx 3930 \text{ K} & t_{I_3} \approx 523 \text{ K} \\ t_{I_1} \approx -177 \text{ K} & t_{I_4} \approx 133 \text{ K} \end{array}$$

De ces estimations, Delrieu et coll. ont déduit, en négligeant t_{I_4} :

$$\varphi \approx 50^\circ \quad \vec{Q}_i \approx (2k_F, 0.441 \frac{\pi}{b}) \quad A \approx 370 \text{ K}$$

Si, on ne néglige pas t_{I_4} , on trouve :

$$\varphi \approx 60^\circ \quad \vec{Q}_i \approx (2k_F, 0.328 \frac{\pi}{b}) \quad A \approx 280 \text{ K}$$

Comment la description que nous avons faite du nesting quantifié est-elle affectée, avec une relation de dispersion et un vecteur de nesting différents de ceux utilisés dans le modèle le plus simple ?

Pour comprendre dans ce cas le mécanisme de variation du vecteur onde il est essentiel de distinguer plusieurs vecteurs de nesting :

Nous avons montré que, à température nulle, le vecteur de meilleur nesting est celui qui relie les points d'inflexion de la surface de Fermi. Avec la relation de dispersion IV 9, il est facile de montrer qu'il est défini par $\vec{Q}_0 = (2k_{//}, q_{\perp})$ avec :

$$t_S \cos k_F a = t_S \cos k_{//} a + A \cos \left(\frac{q_{\perp} b}{2} + \varphi \right) \quad (V.7)$$

et

$$\cos \left(\frac{q_{\perp} b}{2} + \varphi \right) = - \sin^2 \left(\frac{q_{\perp} b}{2} + \varphi \right) \frac{\cos k_{//} a}{\sin^2 k_{//} a} \frac{A}{t_S} \quad (V.8)$$

où $t_S = t_{S_1} + t_{S_2}$. A est donné par la relation IV 11b.

1°) En première approximation, si A/t_S tend vers 0, on trouve [96,97] le vecteur de nesting déterminé plus haut :

$$\vec{Q}_i = \left[2k_F, \frac{\pi}{b} \left(1 - \frac{2\varphi}{\pi} \right) \right]$$

Ce vecteur joue le même rôle que le vecteur $\vec{Q}_t = (2k_F, \frac{\pi}{b})$ dans notre modèle. C'est le vecteur de meilleur nesting à haute température ou très fort champ (dans le cas où I ne dépend pas de \vec{Q}).

2°) Mais A/t_S n'est pas nul, ce qui introduit une déviation à l'estimation obtenue. Le vecteur de meilleur nesting, à $T = 0$, s'écrit :

$$\vec{Q}_0 = \left(2k_F + q_{//}, \frac{\pi}{b} - \frac{2\varphi}{b} - \frac{\delta}{b} \right)$$

avec

$$\delta = \frac{2 \cos k_F a}{\sin^2 k_F a} \frac{A}{t_S} \quad (V.9)$$

$$q_{//} = \frac{4}{a} \frac{\cos k_F a}{\sin^3 k_F a} \frac{A^2}{t_S^2}$$

et $k_F a = 3\pi/4$

Ces déviations sont l'analogie exact de celles que nous avons par rapport au vecteur de nesting parfait \vec{Q}_t dans le modèle que nous avons utilisé.

Le rapport $t_b/t_a \approx 1/10$ (selon Grant [95], ce rapport, qu'il note t_I/t_S , est plutôt de l'ordre de $1/16$) doit être remplacé par $A/t_S \approx 1/11$ à $1/15$ (selon que t_I est ou n'est pas négligé). L'anisotropie des énergies caractéristiques est donc du même ordre de grandeur que celle que nous avons utilisée jusque-là, de même que l'énergie t'_b qui décrit l'écart au nesting parfait :

$$t'_b \propto \frac{A^2}{t_S} .$$

Par conséquent, au lieu d'osciller sous champ de la valeur \vec{Q}_0 , donnée dans notre modèle, à la valeur transverse commensurable $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$, le vecteur d'onde oscille de la valeur \vec{Q}_0 estimée ici à la valeur incommensurable \vec{Q}_i . L'énergie caractéristique qui décrit l'écart entre ces deux vecteurs est de l'ordre de A^2/t_S . Quand l'énergie E_c du champ magnétique devient de l'ordre de A^2/t_S , c'est le vecteur \vec{Q}_i qui est stabilisé.

Enfin $\delta \ll \varphi$, c'est-à-dire que l'excursion en vecteur d'onde imposée par le champ magnétique reste faible par rapport à l'écart à la commensurabilité. Les ordres de grandeurs de ces variations sont les mêmes que ceux utilisés dans le modèle le plus simple.

Dans la phase ODS, stable en champ nul, des sels de Bechgaard $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ à pression ambiante et $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ trempé, des expériences récentes de RMN ont montré que le vecteur d'onde de l'Onde de Densité de Spin est incommensurable et se trouve raisonnablement décrit par l'évaluation théorique V 4 déduite des calculs de Grant.

Si les phases ODS sous champ sont de même nature, tout cela prouverait donc que les interactions électroniques ne favorisent pas le nesting longitudinal comme le suggèrent Gor'Kov et Lebed (au moins dans la région que nous avons appelée "champ faible" au paragraphe précédent : $H < 10$ T).

Le mécanisme du nesting quantifié se produit au voisinage du vecteur incommensurable \vec{Q}_i .

C O N C L U S I O N

VI - CONCLUSION

Ce travail établit un cadre général pour l'étude des conducteurs quasi-unidimensionnels sous champ magnétique. Deux aspects ont été développés :

1°) Dans la première partie, nous avons étudié l'effet du champ magnétique sur les fluctuations unidimensionnelles. Nous avons vu comment, en bloquant certains processus de diffusion, le champ modifie les fonctions de réponse du gaz d'électrons. Nous avons démontré l'équivalence entre l'effet du champ magnétique sur les degrés de liberté de spin et celui du potentiel chimique sur les degrés de charge. Enfin, en utilisant différentes techniques, nous avons déduit l'évolution du diagramme de phases en fonction du champ et du potentiel chimique. Il ne semble pas que les effets que nous avons prévus aient déjà été observés dans des composés existant actuellement.

2°) Les expériences réalisées sur les sels de Bechgaard, et qui ont été une motivation essentielle dans la seconde partie de ce travail, ont montré qu'une phase Onde de Densité de Spin est induite par le champ magnétique et qu'il s'agit là d'un effet orbital. Par ailleurs, la structure de l'effet Hall est tout à fait inhabituelle, réminiscente de l'effet Hall quantifié.

Pour comprendre ces résultats, nous avons étudié en détail la dépendance en vecteur d'onde de la susceptibilité du gaz d'électrons bidimensionnel anisotrope sous champ. Ce cas correspond à la limite basse température d'un cristal quasi 1-D. La susceptibilité présente une structure tout à fait nouvelle dont l'origine est liée à la quantification des orbites dans un champ magnétique. Nous avons montré que :

- la divergence logarithmique de la susceptibilité est restaurée par le champ magnétique, chaque fois que le vecteur de nesting obéit à la condition de quantification :

$$q_{//} = \frac{neHb}{\hbar}$$

- le vecteur d'onde de l'instabilité varie donc avec le champ, pour que la phase Onde de Densité de Spin contienne un nombre n de niveaux de Landau complè-

complètement remplis. On ne peut donc plus parler de une mais de plusieurs phases ODS.

- La condition de quantification induit, quand H varie, une cascade de transitions de phase du premier ordre entre sous-phases indexées par n ,

- Dans chaque sous-phase, le nombre de porteurs, à T = 0, augmente linéairement avec le champ.

- D'une certaine façon, les phases ODS sous champ sont un nouvel état de la matière, à caractère doublement quantique ; une première fois parce qu'il existe un condensat électron-trou, une seconde fois parce que chaque sous-phase est indexée par un nombre quantique magnétique.

Le diagramme de phases sous champ magnétique que nous avons déduit de ce mécanisme contient les caractéristiques essentielles du diagramme expérimental une succession de transitions de phases du premier ordre entre sous-phases ODS, chaque transition métal-ODS étant du second ordre. Certains détails expérimentaux sont encore mal compris. On peut cependant conclure que le nesting quantifié est un mécanisme nouveau de quantification de l'effet Hall.

Il est bien connu que lorsqu'un champ magnétique est appliqué sur le gaz d'électrons dans un cristal, la quantification en niveaux de Landau est fortement perturbée par la périodicité introduite par le réseau. Cet effet est important lorsque le flux du champ magnétique à travers la maille cristalline, de surface ab , est de l'ordre du quantum de flux [130].

$$abH \sim \frac{h}{e}$$

L'observation des effets de réseau nécessite donc des champs magnétiques très intenses, encore inaccessibles (10^5 T pour $ab = (2A)^2$).

Le problème que nous avons abordé se caractérise par une surface qui est $\frac{2\pi b}{q_{\parallel}}$, les effets de réseau étant ici décrits non plus par la distance interatomique a mais par la longueur $\frac{2\pi}{q_{\parallel}} \gg a$. Ainsi, le nesting quantifié est un mécanisme physique dans lequel les effets de réseau sont observables pour des champs physiquement accessibles.

Notre théorie a permis de comprendre les aspects expérimentaux essentiels ; un modèle plus raffiné devrait permettre de mieux saisir certains résultats dont on pense qu'ils peuvent dépendre des détails de la géométrie de la surface de Fermi. C'est en particulier le cas du changement de signe observé pour l'effet Hall.

La structure de la susceptibilité sous champ est entièrement nouvelle. La richesse de cette structure doit se retrouver dans la complexité de la phase condensée dont on attend des propriétés surprenantes. L'étude de cette phase ordonnée, de l'évolution du paramètre d'ordre en champ et température, du caractère des excitations élémentaires et collectives, est la prochaine étape à accomplir.

La susceptibilité du gaz électronique permet de connaître la structure des corrélations dans l'espace réel. Ces corrélations devraient avoir une allure inhabituelle due à la structure quantifiée de la susceptibilité.

Certains points expérimentaux doivent aussi être éclaircis :

- Les mesures thermométriques (chaleur spécifique et chaleur latente) doivent permettre de préciser notre compréhension des phénomènes mis en jeu :

. réentrance partielle ou non de la phase métallique entre chaque phase ODS.

. évolution du saut de chaleur spécifique $\frac{\Delta C_e}{C_e}$ à la transition métal ODS, en fonction du champ

. chaleur latente dégagée à chaque transition entre sous-phases.

- L'étude des conditions de refroidissement sur les mesures de transport (magnétorésistance et effet Hall) devrait permettre d'isoler les effets fondamentaux.

Nous avons volontairement séparé l'étude théorique du nesting quantifié des résultats expérimentaux obtenus dans les sels de Bechgaard, car ce mécanisme est très général. Il décrit de nouveaux effets quantiques liés à la conjonction de deux propriétés physiques :

- instabilité du gaz d'électrons quasi-unidimensionnel
- quantification des orbites électroniques sous champ magnétique.

On s'attend à ce que ces conséquences soient observées dans d'autres composés aux propriétés électroniques anisotropes : composés intercalaires du graphite [131], composés inorganiques à Onde de Densité de Charge tels que NbSe_3 [132] ou bronzes de Molybdène [133].....

Le développement de ces idées et l'approfondissement des recherches expérimentales s'avèrent prometteurs.....

Un temps viendra où une recherche diligente poursuivie pendant des siècles mettra au jour des choses qui nous sont maintenant cachées.

Un temps viendra où nos descendants s'étonneront que nous ayons ignoré des choses si évidentes. Maintes découvertes sont réservées aux siècles futurs, quand tout souvenir de nous sera effacé. Notre univers serait une pauvre petite chose s'il n'y avait en lui matière à recherches pour tous les temps à venir....

La nature ne révèle pas ses mystères d'un seul coup.

Sénèque, 1er siècle ap. J. C.

A P P E N D I C E S

APPENDICE A

EQUATION DE LIE POUR LES FONCTIONS DE REPOSE

Le principe du groupe de renormalisation multiplicatif est que les fonctions de réponse ne sont pas modifiées par un changement de coupure [49].

Plus précisément :

$$R\left(\frac{\omega}{E_0}, g\right) = R\left(\frac{\omega}{E}, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) \times f\left(\frac{E_0}{E}\right) \quad (\text{A.1})$$

Laissons $\omega = E$,

$$R\left(\frac{E}{E_0}, g\right) = R\left(1, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) \times f\left(\frac{E_0}{E}\right) \quad (\text{A.2})$$

La fonction multiplicative f peut être éliminée de ces deux équations. On obtient :

$$\ln R\left(\frac{\omega}{E_0}, g\right) - \ln R\left(\frac{E}{E_0}, g\right) = \ln R\left(\frac{\omega}{E}, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) - \ln R\left(1, g\left(\frac{E}{E_0}\right)\right) \quad (\text{A.3})$$

Par conséquent :

$$x \frac{\partial \ln R(x, g)}{\partial x} = \frac{\partial \ln R(y, g(x))}{\partial y} \Big|_{y=1} \quad (\text{A.4})$$

avec $x = \omega / E_0$.

APPENDICE B

RENORMALISATION D'UNE FONCTION DE REPONSE SOUS CHAMP ($g_3 = 0$)

Fonction de Réponse "Onde de Densité de Charge"

La fonction de réponse OD diverge au vecteur d'onde $2k_{F\uparrow}$ (ou $2k_{F\downarrow}$) et s'écrit

$$N(\omega, h) = \frac{1}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//}}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} + \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{z}{E_0} \right) + \ln \frac{z}{E_0} \left(1 + \frac{\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//}}{4} \ln \frac{z}{E_0} \right) \quad (B.1)$$

avec $z = |\omega^2 - 16h^2|^{1/2}$

Selon la méthode de Zawadowski [64], on introduit la quantité renormalisable

$$\bar{N} = \frac{\partial N}{\partial \ln \frac{\omega}{E_0}} \quad (B.2)$$

$$\bar{N}(\omega, h) = \frac{1}{2} \ln \frac{\omega}{E_0} \left(1 + (\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//}) \ln \frac{\omega}{E_0} + \bar{g}_{1\perp} \ln \frac{z}{E_0} \right)$$

Maintenant, deux régimes de renormalisation doivent être distingués, dans lesquels sont faites les approximations suivantes :

$$\begin{aligned} \omega \gtrsim 4h & \quad \ln \frac{z}{E_0} \sim \ln \frac{\omega}{E_0} \\ \omega \lesssim 4h & \quad \ln \frac{z}{E_0} \sim 0 \end{aligned} \quad (B.4)$$

Dans le premier régime, l'équation de Lie s'écrit :

$$\frac{d \ln \bar{N}}{d \ln x} = \bar{g}_{1//}(x) + \bar{g}_{1\perp}(x) - \bar{g}_{2//}(x) \quad x = \frac{\omega}{E_0} \quad (B.5)$$

où les couplages g_i sont décrits par les équations III.34.

Dans le cas où $g_3 = 0$, $g_{1//} - 2g_2$ est un invariant. Et dans le cas simple $g_{1//} = g_{1\perp}$ le second membre de l'équation de Lie s'écrit $\frac{3}{2} \bar{g}_1(x) + \frac{\bar{g}_1}{2} - \bar{g}_2$,

g_1 et g_2 étant les valeurs initiales des couplages. Par ailleurs,

$\bar{g}_1(x) = \frac{\bar{g}_1}{1 - \bar{g}_1 \ln x}$. On en déduit en intégrant l'équation de Lie de $x = 1$ à

$$x = 4h/E_0$$

$$\bar{N} = (1 - \bar{g}_1 \ln \frac{4h}{E_0})^{-3/2} \left(\frac{4h}{E_0} \right)^{-\alpha} \quad (\text{B.6})$$

avec $\alpha = \frac{\bar{g}_1}{2} - \bar{g}_2$

Cette valeur de \bar{N} est le point de départ d'une seconde renormalisation, décrite par l'équation

$$\frac{d \ln \bar{N}}{d \ln x} = \bar{g}_1(x) - \bar{g}_2(x) \quad \omega \lesssim 4h \quad (\text{B.7})$$

Dans ce domaine $\bar{g}_1(x)$ est constant (eq. III.34) et égal à $\bar{g}_1 \left(\frac{h}{E_0} \right) = \frac{\bar{g}_1}{1 - \bar{g}_1 \ln \frac{4h}{E_0}}$

On en déduit :

$$\bar{N}(\omega, h) = (1 - \bar{g}_1 \ln \frac{4h}{E_0})^{-3/2} \left(\frac{4h}{E_0} \right)^{-\alpha} \left(\frac{\omega}{E_0} \right)^{\alpha + \frac{\bar{g}_1(h)}{2}} \left(\frac{E_0}{4h} \right)^{\alpha + \frac{\bar{g}_1(h)}{2}} \quad (\text{B.8})$$

et par conséquent

$$N(\omega, h) = \frac{(1 - \bar{g}_1 \ln \frac{4h}{E_0})^{-3/2}}{\alpha + \frac{\bar{g}_1(h)}{2}} \left(\frac{4h}{E_0} \right)^{-\alpha} \left(\frac{\omega}{4h} \right)^{\alpha + \frac{\bar{g}_1(h)}{2}} \quad (\text{B.9})$$

C'est le résultat trouvé par Gurgenshvilii et coll. par la méthode parquet [73].

APPENDICE C

GAZ D'ELECTRONS QUASI-UNIDIMENSIONNEL

DECOUPLAGE DES CANAUX COOPER ET ZERO-SON

EFFET DU CHAMP MAGNETIQUE

1°) Champ magnétique nul [58-60]

Les équations de renormalisation 1D contiennent un mélange de contributions électron-électron ("Cooper") et électron-trou ("zéro-son" ou "Peierls"). Dans le régime tridimensionnel, au-dessus de la température T_x de cross-over, ces contributions sont découplées. Réécrivons le développement en perturbation des vertex Γ en séparant les contributions Cooper et zéro-son (on généralise ici les résultats de la ref.60 avec des couplages dépendant du spin):

$$\begin{aligned} \Gamma_{//} &= \bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//} - \frac{a}{2}(\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//})^2 + \frac{b}{2}(\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//})^2 + \frac{b}{2}(\bar{g}_{1\perp}^2 + \bar{g}_3^2) \\ \Gamma_{1\perp} &= \bar{g}_{1\perp} + a \bar{g}_{1\perp} \bar{g}_{2\perp} + b(\bar{g}_{1//} \bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_{1\perp} \bar{g}_{2//}) \\ \Gamma_{2\perp} &= \bar{g}_{2\perp} + \frac{a}{2}(\bar{g}_{1\perp}^2 + \bar{g}_{2\perp}^2) - \frac{b}{2}(\bar{g}_{2\perp}^2 + \bar{g}_3^2) \end{aligned} \quad (C.1)$$

Le canal Cooper correspond à $a = 1$, $b = 0$. Le canal zéro-son est décrit par $a = 0$, $b = 1$. Les équations 1D mélangent les deux contributions: $a = b = 1$. Dans le régime 3D, au-dessus de T_x , les canaux sont découplés, ce qui conduit à un comportement RPA des équations de renormalisation et à des températures de transition finies (§ III C 1b).

a/ Températures de transition supraconductrices

Dans ce cas, $a = 1$ et $b = 0$. Les équations de renormalisation se découplent de la façon suivante:

$$\begin{aligned} \frac{d \bar{g}_{1\parallel} - \bar{g}_{2\parallel}}{d\ell} &= -\frac{1}{2} (\bar{g}_{1\parallel} - \bar{g}_{2\parallel})^2 \\ \frac{d \bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_{2\perp}}{d\ell} &= -\frac{1}{2} (\bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_{2\perp})^2 \\ \frac{d \bar{g}_{1\perp} + \bar{g}_{2\perp}}{d\ell} &= \frac{1}{2} (\bar{g}_{1\perp} + \bar{g}_{2\perp})^2 \end{aligned} \quad (C.2)$$

Les valeurs initiales des couplages sont les valeurs renormalisées par les équations 1D(eqs III.22) lorsque l'échelle d'énergie est amenée de E_0 à T_x . Les couplages, évoluant selon les équations 3D(C.2), divergent aux températures T_{C_i} qui sont précisément les températures de transition ST(Sz=1), ST(Sz=0) et SS obtenues en RPA (voir développements III-11)(figure 73):

$$\text{ST(Sz = 1)} \quad T_C \approx T_x \exp \frac{2}{\tilde{g}_{2\parallel} - \tilde{g}_{1\parallel}}$$

$$\text{ST(Sz = 0)} \quad T_C \approx T_x \exp \frac{2}{\tilde{g}_{2\perp} - \tilde{g}_{1\perp}}$$

$$\text{SS} \quad T_C \approx T_x \exp \frac{2}{\tilde{g}_{2\perp} + \tilde{g}_{1\perp}}$$

où les coefficients \tilde{g}_i ont été renormalisés par les fluctuations 1D: $\tilde{g}_i = \bar{g}_i \left(\frac{T_x}{E_0} \right)$

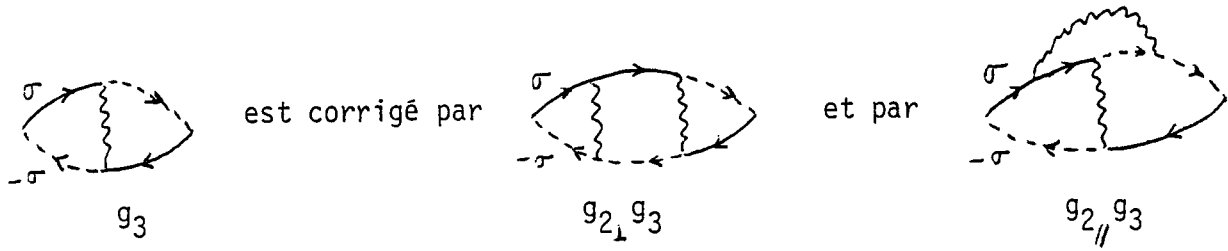
b/ Températures de transition "Onde de Densité"

Pour ces instabilités, le découplage 3D donne $a = 0$, $b = 1$. Mais, la renormalisation du couplage Umklapp doit être examinée de plus près. Dans le domaine 1D, le vertex $\Gamma_{3\perp}$ et l'équation de Lie correspondante s'écrivent:

$$\Gamma_{3\perp} = g_3 + g_3(g_{1\parallel} - g_{2\parallel} - g_{2\perp}) \quad \frac{dg_3}{d\ell} = g_3(g_{1\parallel} - g_{2\parallel} - g_{2\perp}) \quad (C.4)$$

Dans le domaine 3D, selon le canal envisagé, ODC ou ODS, la correction au terme Umklapp est différente:

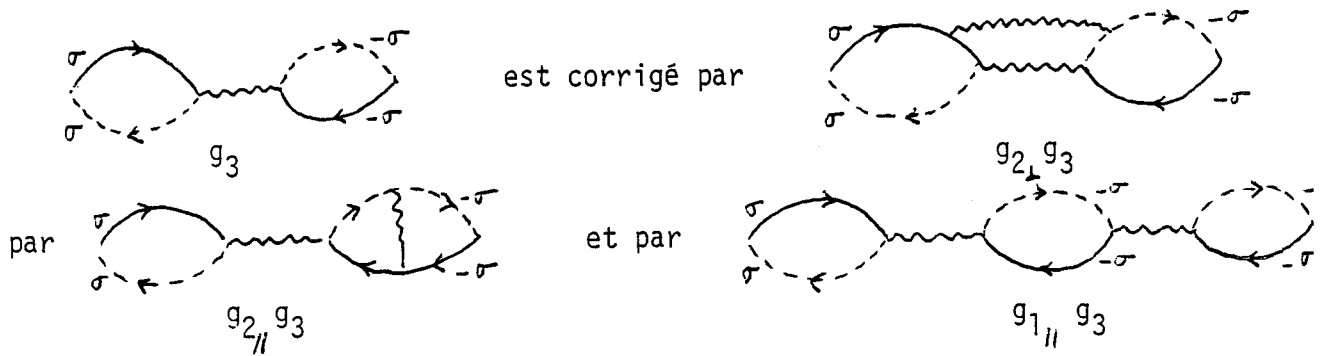
Onde de Densité de Spin transverse



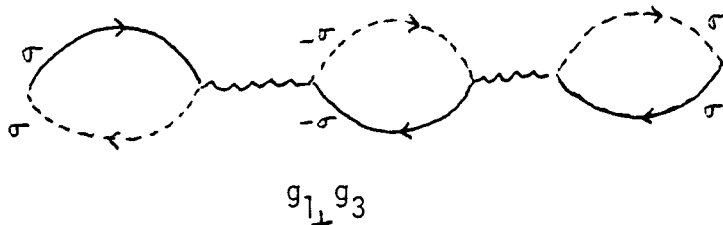
Le second terme, non RPA, est coupé à T_x et n'est pas inclus dans la renormalisation 3D. Par conséquent, la diffusion g_3 intervenant dans le canal ODS_t n'est renormalisée que par $g_{2\perp} g_3$:

$$\frac{d\bar{g}_3}{d\lambda} = - \bar{g}_{2\perp} \bar{g}_3$$

Onde de Densité de Spin longitudinale ou Onde de Densité de charge



Mais, la première correction est coupée à T_x et n'intervient pas dans le régime 3D. Enfin, le diagramme suivant, $g_{1\perp} g_3$ intervient dans le calcul des fonctions de réponse ODC et ODS_ℓ :



Par conséquent, nous trouvons:

$$\begin{aligned}
 \text{ODS}_t \quad \frac{d\bar{g}_3}{d\ell} &= -\bar{g}_3\bar{g}_{2\perp} \\
 \text{ODS}_\ell \quad \frac{d\bar{g}_3}{d\ell} &= \bar{g}_3(\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_{2//}) \\
 \text{ODC} \quad \frac{d\bar{g}_3}{d\ell} &= \bar{g}_3(\bar{g}_{1//} + \bar{g}_{1\perp} - \bar{g}_{2//})
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

Dans le cas particulier où $g_{2//} = g_{2\perp} = g_2$ et $g_{1//} = g_{1\perp} = g_1$, le résultat que nous trouvons est différent de celui de la réf.60 où on pose:

$$\frac{d\bar{g}_3}{d\ell} = \bar{g}_3(d\bar{g}_1 - 2c\bar{g}_2)$$

Nous avons $d = 0$, $c = 1/2$ pour le canal ODS ($d = 0$, $c = 1$ selon la réf.60) et $d = 2$, $c = 1/2$ pour le canal ODC ($d = 1$, $c = 1/2$ selon la réf.60).

D'après les équations C.1 et C.5, on en déduit les équations découplées RPA suivantes:

$$\begin{aligned}
 \text{ODS}_t \quad \frac{d(\bar{g}_{2\perp} \pm \bar{g}_3)}{d\ell} &= -\frac{1}{2} (\bar{g}_{2\perp} \pm \bar{g}_3)^2 \\
 \text{ODS}_\ell \quad \frac{d(\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//} - \bar{g}_{1\perp} \pm \bar{g}_3)}{d\ell} &= \frac{1}{2} (\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//} - \bar{g}_{1\perp} \pm \bar{g}_3)^2 \\
 \text{ODC} \quad \frac{d(\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{1//} + \bar{g}_{1\perp} \pm \bar{g}_3)}{d\ell} &= \frac{1}{2} (\bar{g}_{1//} - \bar{g}_{2//} + \bar{g}_{1\perp} \pm \bar{g}_3)^2
 \end{aligned} \tag{C.6}$$

Ces couplages divergent aux températures de transition [60]:

$$\begin{aligned}
 \text{ODS}_t \quad T_c &\approx T_x \exp \frac{-2}{\tilde{g}_{2\perp} + |\tilde{g}_3|} \\
 \text{ODS}_\ell \quad T_c &\approx T_x \exp \frac{-2}{\tilde{g}_{2//} - \tilde{g}_{1//} + \tilde{g}_{1\perp} + |\tilde{g}_3|} \\
 \text{ODC} \quad T_c &\approx T_x \exp \frac{-2}{\tilde{g}_{2//} - \tilde{g}_{1//} - \tilde{g}_{1\perp} + |\tilde{g}_3|}
 \end{aligned} \tag{C.7}$$

les coefficients \tilde{g}_i étant normalisés par les fluctuations 1D.

2°) champ magnétique fini [56]

Nous avons étudié l'évolution de la température de la transition métal- ODS_t sous champ magnétique, dans le cas particulier $g_{2//} = g_{2\perp} = g_2$, $g_{1//} \gg g_{1\perp}$ et $g_3 = 0$. Deux cas sont à distinguer:

- $h < T_x$, les trajectoires de renormalisation ne sont pas modifiées par le champ. Par ailleurs les équations RPA pour le canal ODS_t ne dépendent pas non plus du champ. La température de transition n'est donc pas affectée par h .
- $h > T_x$, la renormalisation 1D comprend deux étapes, et on trouve ainsi que les couplages renormalisés sont $g_{1\perp} = 0$ et $g_{1//}^*(H)$ donné par l'expression III 35 (ou III 36 si $g_{1//} = g_{1\perp}$).

On trouve donc, en utilisant l'invariance de $g_{1//} - 2g_2$ et si $g_{1//} = g_{1\perp}$:

$$T_c(H) = T_x \exp \frac{-2}{\tilde{g}_2(H)}$$

$$\text{avec } \tilde{g}_2(H) = \bar{g}_2 - \frac{\bar{g}_1}{2} + \frac{\frac{\bar{g}_1}{2}}{1 - \bar{g}_1 \ln \max\left(\frac{T_x}{E_0}, \frac{4h}{E_0}\right)}$$

Par conséquent, un champ magnétique tel que $h > \frac{T_x}{4}$ augmente la température de transition ODS . Si cette phase est instable en champ nul, elle sera stabilisée par un champ H_0 tel que $\tilde{g}_2(H_0) = 0$. En développant $\tilde{g}_2(H)$ autour de H_0 , on trouve:

$$T_{ODC}(H) = T_x \exp \frac{B}{H_0 - H} \quad B > 0 \quad (C.9)$$

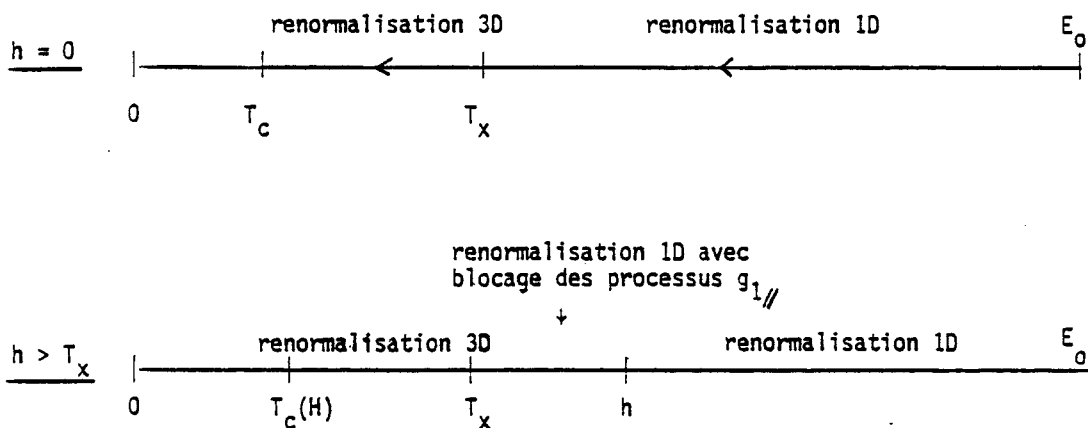


Figure 73 : Dans les équations RPA qui donnent les températures de transition T_c , les couplages ont déjà été renormalisés par les fluctuations 1D

APPENDICE D

ETUDE DE LA SUSCEPTIBILITE EN CHAMP NUL ET A TEMPERATURE NULLE

$$\text{Relation de dispersion } \varepsilon(k) = v_F (|k_{//}| - k_F) + t_{\perp}(k_{\perp})$$

En utilisant la formule classique

$$\chi(\vec{Q}) = \frac{1}{L} \sum_{\text{états}} \frac{n(\varepsilon_{\vec{k}}) - n(\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}})}{\varepsilon_{\vec{k}+\vec{Q}} - \varepsilon_{\vec{k}}} \quad (\text{D.1})$$

on montre que :

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi v_F} \left\{ \ln 2k_F - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left| q_{//} + \frac{t_{\perp}(p) + t_{\perp}(p - q_{\perp} b)}{v} \right| dp \right\} \quad (\text{D.2})$$

Le calcul de la susceptibilité par la formule IV.37 en champ nul conduit à l'expression :

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi v_F} \int_d^{\infty} \frac{dx}{x} \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \cos \left(q_{//} + \frac{t_{\perp}(p) + t_{\perp}(p - q_{\perp} b)}{v} \right) x \quad (\text{D.3})$$

où d est une coupure. En utilisant le résultat suivant [134] :

$$\text{Ci}(x) = - \int_x^{\infty} \frac{\cos t \, dt}{t} \approx C + \ln x + \mathcal{O}(x^2) \quad (\text{D.4})$$

pour intégrer sur x la formule D.3, on montre l'égalité entre les deux expressions de la susceptibilité, si la coupure d est égale à

$$d = \frac{1}{2\gamma k_F} \quad (\text{D.5})$$

où $\gamma = e^C = 1.781$ (C = 0.577 est la constante d'Euler).

Nous calculons maintenant $\chi_0(\vec{Q})$ pour deux relations de dispersion particulières.

$$1) \underline{\underline{t_{\perp}(k_{\perp}) = - 2t_b \cos k_{\perp} b}}$$

La susceptibilité s'écrit :

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln 2k_F - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln |q_{\parallel} - q_b \cos p| dp \right\} \quad \text{ou} \quad (D.6)$$

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d^{\infty} \frac{dx}{x} J_0(q_b x) \cos q_{\parallel} x \quad (D.7)$$

$$\text{avec } q_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2} > 0$$

L'expression (D.7) peut se réécrire

$$\frac{1}{2\pi b v} \left\{ \int_d^{\infty} \frac{dx}{x} J_0(q_b x) (\cos q_{\parallel} x - 1) + \int_d^{\infty} \frac{dx}{x} J_0(q_b x) \right\} \quad (D.8)$$

La première intégrale ne diverge pas à courte distance et sa borne inférieure peut être remplacée par 0. On trouve alors

$$\begin{aligned} \chi_0(\vec{Q}) &= \frac{1}{2\pi b v} \left\{ - \text{Argch} \frac{|q_{\parallel}|}{q_b} - \ln \frac{\gamma q_b d}{2} \right\} & \text{si } |q_{\parallel}| > q_b \\ &= - \frac{1}{2\pi b v} \ln \frac{\gamma q_b d}{2} = \frac{1}{2\pi b v} \ln \frac{4k_F}{q_b} & \text{si } |q_{\parallel}| < q_b \end{aligned} \quad (D.9)$$

$\chi_0(\vec{Q})$ présente une ligne de non analyticités, de coordonnées $q_{\parallel} = q_b = \frac{4t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp} b}{2}$.

$$2) \underline{\underline{t_{\perp}(k_{\perp}) = - 2t_b \cos k_{\perp} b - 2t'_b \cos 2k_{\perp} b}}$$

Dans ce cas, on trouve

$$\chi_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi v b} \ln 2k_F - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln |q_{\parallel} - q_b \cos p - q'_b \cos 2p| dp \quad (D.10)$$

$q'_b = \frac{4t'_b}{v} \cos q_{\perp} b < 0$. χ_0 présente deux lignes de non-analyticités, décrites par $q_{\parallel} = q_b + q'_b$. Le vecteur de meilleur nesting connecte les points d'inflexion de la surface de Fermi ; il vérifie $q_b + 4q'_b = 0$ et par conséquent,

$$q_b = \frac{4q_{\parallel}}{3} \quad q'_b = - \frac{q_{\parallel}}{3}$$

On en déduit ainsi les coordonnées du vecteur de meilleur nesting $\vec{Q}_0 = (2k_F + q_{//}^0, q_{\perp}^0)$ en fonction du rapport $r = t_b'/t_b$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos \frac{q_{\perp}^0 b}{2} = \frac{\sqrt{1 + 128 r^2} - 1}{16 r} \quad \cos q_{\perp}^0 b = \frac{1 - \sqrt{1 + 128 r^2}}{64 r^2} \\ q_{//}^0 = \frac{3t_b}{v} \cos \frac{q_{\perp}^0 b}{2} \end{array} \right. \quad (D.11)$$

Nous n'avons pas pu calculer exactement x_0 dans le cas général. Cela est possible lorsque $q_{//} = q_b + q_b'$. Dans ce cas

$$x_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi b v} \{ \ln 2k_F - A \} \quad (D.12)$$

avec

$$A = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \ln | 2q_b \sin^2 \frac{p}{2} + 2q_b' \sin^2 p | dp \quad (D.13)$$

$$A = \ln |q_b'| + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln | 1 + \frac{q_b}{2q_b'} + \cos p | dp$$

d'où nous déduisons :

$$x_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi b v} \ln \frac{4k_F}{|q_b'|} \quad \text{si} \quad q_b < -4q_b' \quad (D.14)$$

et $x_0(\vec{Q}) = \frac{1}{2\pi b v} \{ \ln \frac{4k_F}{|q_b'|} - \text{Argch} | 1 + \frac{q_b}{2q_b'} | \}$ si $q_b > -4q_b'$

En particulier, si $\vec{Q} = \vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$:

$$x_0(\vec{Q}_t) = \frac{1}{2\pi b v} \ln \frac{vk_F}{t_b'} \quad (D.15)$$

et si $\vec{Q} = \vec{Q}_0$, vecteur de meilleur nesting :

$$x_0(\vec{Q}_0) = \frac{1}{2\pi b v} \ln \frac{vk_F}{t_b' |\cos q_{\perp}^0 b|} > x_0(Q_t) \quad (D.16)$$

Etant donné le paramètre d'interaction I , il est possible d'en déduire la valeur de t_b' critique, t_b^{**} , pour les deux vecteurs \vec{Q}_t et \vec{Q}_0 .

$$\chi_0(\vec{Q}_t) = \frac{1}{I} = -\frac{1}{2\pi v b} \ln \frac{\pi T_c^0}{2\gamma v k_F} \quad (D.17)$$

où T_c^0 est la température de transition si $t_b' = 0$ (paragraphe IV-C.1.). On en déduit :

$$t_b^{**}(\vec{Q}_t) = \frac{\pi T_c^0}{2\gamma} \quad (D.18)$$

De même, de l'équation $\chi_0(\vec{Q}_0) = 1/I$ et de l'expression D.16, on déduit facilement :

$$t_b^{**}(\vec{Q}_0) = \frac{\pi T_c^0}{2\gamma} \frac{1}{1 - 32 \left(\frac{\pi T_c^0}{2\gamma t_b'} \right)^2} \quad (D.19)$$

Enfin, au vecteur $\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b)$, la ligne d'instabilité de la phase métallique est décrite par l'équation

$$\frac{I}{2\pi b v} \int_d^\infty \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} J_0 \left(\frac{4t_b'}{v} x \right) = 1 \quad (D.20)$$

APPENDICE E

SUSCEPTIBILITE SOUS CHAMP MAGNETIQUE

Approximations analytiques

Avec la relation de dispersion $\epsilon(\vec{k}) = v(k_{\parallel} - k_F) - 2t_b \cos k_{\perp} b - 2t'_b \cos 2k_{\perp} b$, la susceptibilité s'écrit, avec les notations définies au paragraphe IV-D.3.b :

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \cos(q_{\parallel} x - 2q_b x_0 \sin \frac{x}{2x_0} \cos p - q'_b x_0 \sin \frac{x}{x_0} \cos 2p) \quad (E.1)$$

1) Calcul de $\chi_0(\vec{Q}_t, H, T)$ (Gor'kov et Lebed [100])

$$\vec{Q}_t = (2k_F, \pi/b).$$

$$\chi_0(\vec{Q}_t, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} J_0(q'_b x_0 \sin \frac{x}{x_0}) \quad (E.2)$$

On sépare l'intégrale en deux parties, avec les approximations suivantes :

$x < x_0 \rightarrow$ le sinus est remplacé par son argument

$x > x_0 \rightarrow$ on moyenne sur les oscillations de la fonction de Bessel :

$$\langle J_0(2z \sin \phi) \rangle = J_0^2(z)$$

Par conséquent,

$$\chi_0(\vec{Q}_t, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ -\ln \frac{2\gamma t'_b}{v} - J_0^2\left(\frac{2t'_b}{eHb v}\right) \ln \frac{\pi T}{eHv} \right\} \quad (E.3)$$

2) Calcul de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ lorsque $t'_b = 0$

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) = \frac{1}{2\pi b v} \int_d \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \cos q_{\parallel} x J_0(2q_b x_0 \sin \frac{x}{2x_0}) \quad (E.4)$$

On sépare l'intégrale en deux :

- Si $x < x_0$, $J_0(2q_0 x_0 \sin \frac{x}{2x_0}) \approx J_0(q_b x)$

- Si $x > x_0$, lorsque $q_{//} = n/x_0$, on moyenne la fonction de Bessel en utilisant le résultat : $\langle \cos 2n\phi J_0(2z\sin\phi) \rangle = J_n^2(z)$.

lorsque $q_{//} \neq n/x_0$, on pose $\varepsilon = q_{//} x_0 - n$. On a :

$$\cos q_{//} x_0 J_0(2q_b x_0 \sin \frac{x}{2x_0}) = (\cos \frac{nx}{x_0} \cos \frac{\varepsilon x}{x_0} - \sin \frac{nx}{x_0} \sin \frac{\varepsilon x}{x_0}) J_0(2q_b x_0 \sin \frac{x}{2x_0}).$$

Si $\varepsilon \ll n$, la moyenne de cette expression est égale à $J_n^2(q_b x_0) \cos \frac{\varepsilon x}{x_0}$.

On en déduit une expression approchée de la susceptibilité au voisinage de chaque maximum :

$$\chi_0(q_{//} \approx n/x_0, q_{\perp}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{4k_F}{q_b} - J_n^2(q_b x_0) \int_{x_0}^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \cos \frac{\varepsilon x}{x_0} \right\} \quad (E.5)$$

Par conséquent, d'une part lorsque $q_{//} = n/x_0$, la susceptibilité diverge logarithmiquement à basse température :

$$\chi_0(q_{//} = n/x_0, q_{\perp}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{4k_F}{q_b} - J_n^2(q_b x_0) \ln \frac{\pi T}{eHv} \right\} ; \quad (E.6)$$

d'autre part, à température nulle, la susceptibilité diverge logarithmiquement avec l'écart à $q_{//} = n/x_0 = nHb$:

$$\chi_0(q_{//} \approx n/x_0, q_{\perp}, H, 0) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{4k_F}{q_b} - J_n^2(q_b x_0) \ln \gamma |q_{//} x_0 - n| \right\} \quad (E.7)$$

3) Calcul de $\chi_0(\vec{Q}, H, T)$ avec $t_b' \neq 0$

Dans ce cas l'expression E.1 n'est simplement calculable que si l'un des deux termes q_b ou q_b' peut être négligé, ne laissant qu'une seule fréquence (ou $\cos p$ ou $\cos 2p$).

- Si $q_b' \ll q_b$, les expressions calculées au paragraphe précédent 2) donnent des estimations approchées de χ_0 .

- Si $q_b \ll q_b'$,

$$\chi_0(\vec{Q}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \int_d^{\infty} \frac{dx/x_T}{\text{sh}x/x_T} \cos q_{//} x J_0(q_b' x_0 \sin \frac{x}{x_0}) \quad (E.8)$$

L'argument du sinus oscille deux fois plus vite que dans le cas précédent. On ne trouve donc des maxima que lorsque $q_{//} = 2n/x_0$. L'amplitude de ces maxima est approximativement :

$$x_0(\vec{Q}, H, T) \approx \frac{1}{2\pi b v} \left\{ \ln \frac{4k_F}{|q'_b|} - J_n^2 \left(q'_b \frac{x_0}{2} \right) \ln \frac{\pi T}{eHvb} \right\} \quad (E.9)$$

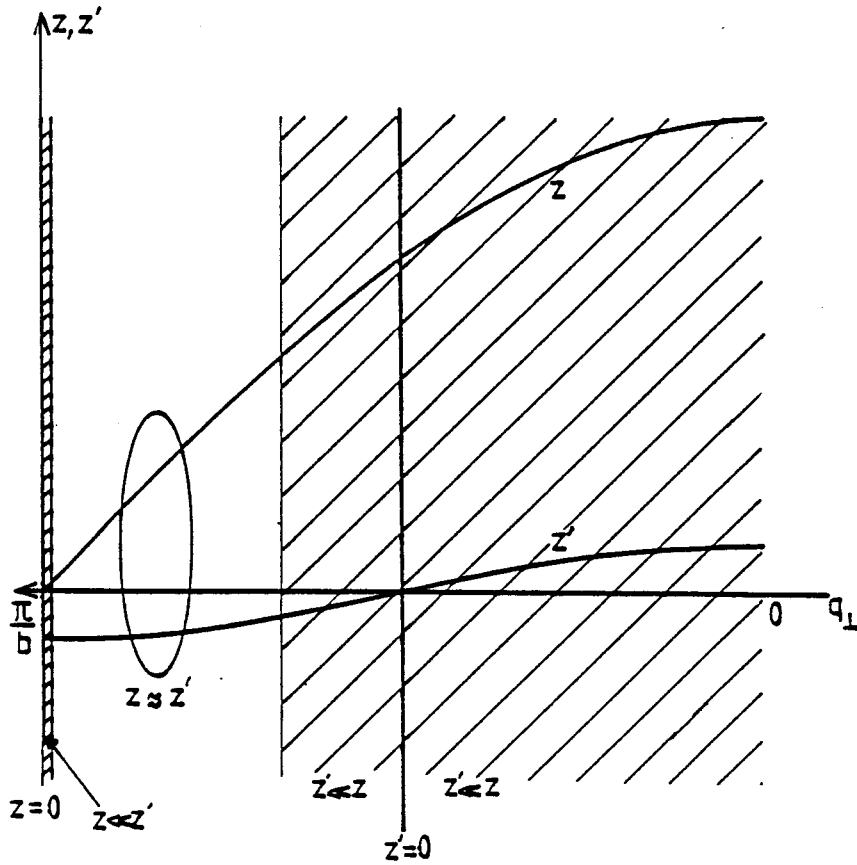


Figure 74 : La susceptibilité n'est calculable exactement que lorsque $z \ll z'$ ou $z \gg z'$, hors de la région de meilleur nesting $z = z'$.

APPENDICE F

LIGNE DE TRANSITIONS DE PHASES DU PREMIER ORDRE AU VOISINAGE DE DEUX LIGNES
DU SECOND ORDRE

Considérons deux lignes L_A et L_B de transitions du second ordre, séparant deux phases A et B d'une même phase M (ici la phase métallique) et telles que ces deux lignes se croisent au point C en formant un angle fini (figure 75).

En prenant comme origine l'énergie libre de la phase M, l'énergie libre de la phase A au voisinage de la ligne L_A se développe de la façon suivante

$$dF_A = \frac{\partial F_A}{\partial T} dT + \frac{\partial F_A}{\partial H} dH + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F_A}{\partial T^2} d^2T + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F_A}{\partial H^2} d^2H + \frac{\partial^2 F_A}{\partial T \partial H} dT dH + \dots \quad (F.1)$$

La transition étant du second ordre, $\frac{\partial F_A}{\partial T} = \frac{\partial F_A}{\partial H} = 0$. Le développement est identique pour F_B .

Les deux nappes qui décrivent les énergies libres $F_A(T, H)$ et $F_B(T, H)$ se croisent sur une ligne de transition L_{AB} séparant les phases A et B.

Montrons que L_{AB} est une ligne de transitions du premier ordre. Au lieu des paramètres T et H, nous choisissons les paramètres u et v (qui s'en déduisent par une rotation) tels que la ligne de transition L_{AB} soit parallèle à l'axe u. (figure 75).

Nous cherchons à montrer que, dans le plan π c'est-à-dire à $u = u^* =$ constante, les énergies libres $F_A(u^*, v)$ et $F_B(u^*, v)$ se croisent avec un angle fini, signe d'une transition du premier ordre. Considérons un point c appartenant à la ligne L_{AB} et distant de Δu du point C. L'énergie libre du point c ainsi que celles des points a et b, distants de du du point c, (ces 3 points sont dans le pl

π) s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned} F_a &= K(\Delta u - du_A)^2 \\ F_c &= K \Delta u^2 \\ F_b &= K(\Delta u + du_B)^2 \end{aligned}$$

avec $K = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial u^2} \Big|_C$. du_A et du_B sont définis par les pentes $p_A = \frac{du_A}{dv}$ et $p_B = \frac{du_B}{dv}$ des lignes de transitions L_A et L_B dans le plan (u, v) .

On déduit de ces expressions :

$$\frac{F_b - F_c}{dv} = 2K \frac{du_B}{dv} \Delta u, \quad \frac{F_c - F_a}{dv} = 2K \frac{du_a}{dv} \Delta u$$

Ainsi la différence de pente entre les deux énergies libres est finie et s'écrit :

$$\Delta \left(\frac{\partial F}{\partial v} \right) = \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} (p_B - p_A) \Delta u$$

Si la ligne de transition L_{AB} est quasi verticale dans le plan (T, H) , en bonne approximation $u \sim T$ et $v \sim H$. $-\frac{\partial F}{\partial H}$ n'est autre que l'aimantation M ; par ailleurs, la chaleur spécifique ΔC est égale à $-T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$. On en déduit donc

$$\Delta M = - \frac{\Delta p \Delta T \Delta C}{T_c}$$

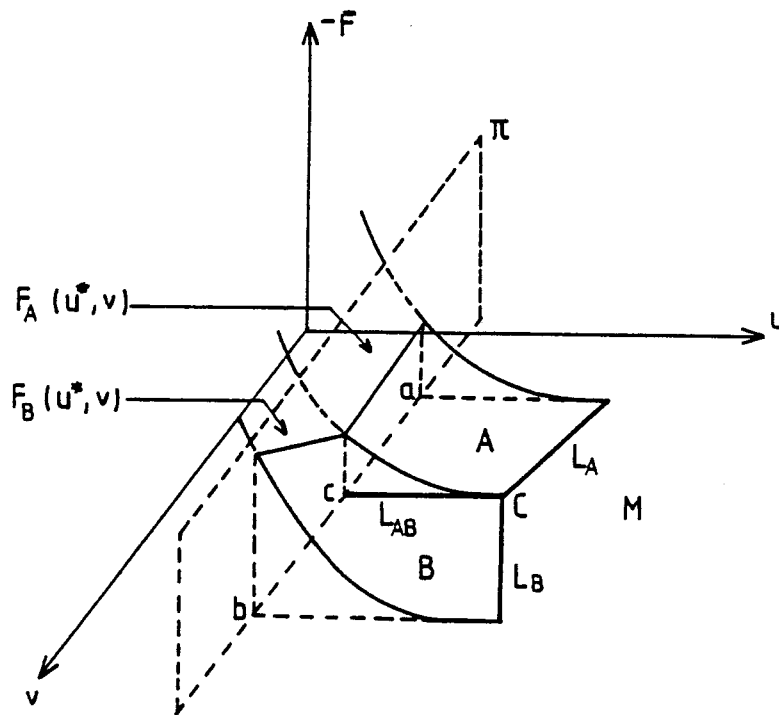


Figure 75 : Energie libre des deux sous phases A et B, lorsque les lignes de transition du second ordre A-métal, B-métal font un angle fini.

APPENDICE G

DEVELOPPEMENT MICROSCOPIQUE DES EQUATIONS DE GINZBURG-LANDAU

Une dérivation microscopique des équations de Ginzburg-Landau doit permettre de décrire le voisinage de la ligne de transition $T_c(H)$. Nous avons utilisé une méthode analogue à celle qu'utilise Gor'kov pour la dérivation des équations de Ginzburg-Landau de la théorie BCS de la supraconductivité [135, 136]. Dans la phase condensée, l'équation de propagation de la fonction de Green est couplée à celle du gap. En l'absence de champ magnétique, les fonctions de Green sont invariantes par translation $G(x, x') = G(x - x')$ et une transformation de Fourier permet de découpler les équations du mouvement dans l'espace réciproque. Il est alors possible de décrire toute la phase condensée sans approximation et en particulier de dériver l'équation du gap $\Delta(T)$. Ce traitement a été introduit par Gor'kov pour redériver la théorie BCS [137].

Si un champ magnétique est appliqué, il brise l'invariance par translation de la fonction de Green et le vecteur d'onde n'étant plus un bon nombre quantique, le découplage des équations du mouvement n'est plus possible. On a alors recours à des approximations. Au voisinage de la ligne critique, $|T - T_c| \ll T_c$, il est possible de calculer la fonction de Green en perturbation par rapport à la fonction de Green de la phase métallique. On peut en déduire ainsi un développement de Landau de l'énergie libre :

$$F = -(\chi_0 - \frac{1}{T}) \frac{\Delta^2}{2} + \frac{b}{4} \Delta^4 + \dots \quad (G.1)$$

Dans la phase condensée, l'équation de propagation de la fonction de Green est couplée à celle du gap [136] :

$$(i\omega_n - iv\frac{\partial}{\partial x} - vk_F - t_{\perp}(p - eHbx))G^{-}(x, x') + \Delta(x) F(x, x') = \hbar \delta(x - x') \quad (G.2)$$

$$(i\omega_n + iv\frac{\partial}{\partial x} + vk_F + vq_{\perp} - t_{\perp}(p + q_{\perp} - eHbx)) F(x, x') + \Delta^{*}(x) G^{-}(x, x') = 0 \quad (G.3)$$

où $G_{\pm}(x, x', \omega_n)$ décrit la propagation d'un électron d'un côté ou de l'autre de la surface de Fermi. Ces équations couplent G_{\pm} et F , la fonction de Green non diagonale. A ce système d'équations s'ajoute l'équation d'autocohérence [136] :

$$\Delta(x) = \frac{IT}{\hbar} \sum_n e^{-i\omega_n \eta} F(x, x, \omega_n) \quad (G.4)$$

On cherche à calculer la fonction de Green de la phase condensée en fonction de celle de la phase métallique, qui vérifie l'équation IV.33. A partir des équations G.2 et G.3, on déduit une paire d'équations intégrales [136]

$$\left\{ \begin{aligned} G^-(x, x') &= G_0^-(x, x') - \frac{\Delta^2}{\hbar^2} \int d^3y \int d^3z G_0^-(x, y) G_0^+(y, z) G^-(z, x') \end{aligned} \right. \quad (G.5)$$

$$\left\{ \begin{aligned} F(x, x') &= \frac{\Delta}{\hbar} \int d^3y G_0^+(x, y) G_0^-(y, x') - \frac{\Delta^2}{\hbar^2} \int d^3y \int d^3z G_0^+(x, y) G_0^-(y, z) F(z, x') \end{aligned} \right. \quad (G.6)$$

où nous avons supposé un gap Δ uniforme. Pour un petit gap, c'est-à-dire près de T_c , il est possible d'en déduire le développement en perturbation :

$$F(x, x') = \frac{\Delta}{\hbar} \int d^3y G_0^+(x, y) G_0^-(y, x') - \frac{\Delta^3}{\hbar^3} \int d^3y \int d^3z \int d^3w G_0^+(x, y) G_0^-(y, z) G_0^+(z, w) G_0^-(w, x') \quad (G.7)$$

A l'aide de l'équation d'autocohérence G.4, se déduit l'équation du gap :

$$1 = I \int d^3y Q(x, y) - I \Delta^2 \int d^3y \int d^3z \int d^3w R(x, y, z, w) \quad (G.8)$$

avec

$$Q(x, y) = \frac{k_B T}{\hbar^2} \sum_n G_0^+(x, y) G_0^-(y, x) \quad (G.9)$$

et

$$R(x, y, z, w) = \frac{k_B T}{\hbar^4} \sum_n G_0^+(x, y) G_0^-(y, z) G_0^+(z, w) G_0^-(w, x) \quad (G.10)$$

Et si, au lieu de cette représentation dans l'espace réel, nous adoptons la représentation mixte, nous trouvons :

$$1 = I \chi_0 - I b \Delta^2 \quad (G.11)$$

χ_0 est la susceptibilité (équation IV.32) et b est donné par

$$b = \frac{k_B T}{\hbar} \sum_n \iiint \frac{dp}{2\pi} dy dw dz G_0^+(p, x, y) G_0^-(p - q_{\perp}, y, z) G_0^+(p, z, w) G_0^-(p - q_{\perp}, w, z) \quad (G.12)$$

L'équation du gap résulte de la minimisation de l'énergie libre :

$$F = -(\chi_0 - \frac{1}{I}) \frac{\Delta^2}{2} + \frac{b}{4} \Delta^4 + \dots \quad (G.13)$$

Calcul du terme b, d'ordre 4

Avec les expressions des fonctions de Green, déjà utilisées pour le calcul de la susceptibilité, on trouve, à partir de l'expression G.12 :

$$(k_B = \mathcal{N} = 1)$$

$$b = T \sum_{\omega_n > 0} \iiint \frac{dp}{4\pi b v^4} dy dz dw \exp - 2\omega_n(x - y - w + z) \\ \exp\{iq_{//}(y-x+w-z)+2iq_b x_0 \left(\sin \frac{x-y}{2x_0} \cos(p+ \frac{x+y}{2x_0})+\sin \frac{z-w}{2x_0} \cos(p+ \frac{z+w}{2x_0})\right) \\ +iq'_b x_0 \left(\sin \frac{x-y}{x_0} \cos(2p+ \frac{x+y}{x_0})+ \sin \frac{z-w}{x_0} \cos(2p+ \frac{z+w}{x_0})\right)\} \quad (G.14)$$

avec le domaine d'intégration suivant : $y < 0$, $w < 0$, $z > w$ et $z > y$.

On introduit le changement de variables : $Y = x-y$, $x_1 = (z+w)/2$, $x_2 = z-w$. On en déduit :

$$b = T \sum_{\omega_n > 0} \iiint dY dx_1 dx_2 \frac{dp}{4\pi b v} \exp - 2\omega_n(Y+x_2) \\ \exp \{- iq_{//}(Y+x_2)+2iq_b x_0 \left(\sin \frac{Y}{2x_0} \cos(p - \frac{Y}{2x_0})+\sin \frac{x_2}{2x_0} \cos(p+ \frac{x_1}{x_0})\right) \\ + iq'_b x_0 \left(\sin \frac{Y}{x_0} \cos(2p - \frac{Y}{x_0}) + \sin \frac{x_2}{x_0} \cos(2p + \frac{2x_1}{x_0})\right) \} \quad (G.15)$$

avec $Y > 0$, $x_2 > 0$ et $-\frac{x_2}{2} - Y < x_1 < \frac{x_2}{2}$. Avec les translations : $p \rightarrow p-Y/2x_0$ et $x_1 \rightarrow x_1 + Y/2$, et en sommant sur les fréquences, nous trouvons :

$$b = \frac{1}{16\pi^2 b v^3} \int \frac{2dY dx_1 dx_2 dp}{x_T \text{sh} \frac{2(x_1+x_2)}{x_T}} \exp \{-iq_{//}(Y+x_2)+2iq_b x_0 \left(\sin \frac{Y}{2x_0} \cos p + \sin \frac{x_2}{2x_0} \cos(p+ \frac{x_1}{x_0})\right) \\ + iq'_b x_0 \left(\sin \frac{Y}{x_0} \cos 2p + \sin \frac{x_2}{x_0} \cos(2p+ \frac{2x_1}{x_0})\right)\} \quad (G.16)$$

avec $Y > 0$, $x_2 > 0$ et $|x_1| < \frac{x_2 + Y}{2}$.

Les approximations que nous faisons maintenant sont de même nature que celles faites pour la susceptibilité : le domaine d'intégration des différentes intégrales spatiales est séparé en deux, $x > x_0$ et $x < x_0$.

Par ailleurs, nous supposons que $q_b' \ll q_b$. Calculons les différentes contributions au terme b, que nous évaluons dans le cas où $x_T = 2x_0$, c'est à dire lorsque $E_c = 4\pi T$, ordre de grandeur typique dans les sels de Bechgaard.

I - $x_2 > x_0, y > x_0$

En intégrant d'abord sur x_1 , puis sur p , on trouve :

$$b_1 = \frac{1}{4\pi b v^3} \int_{x_0}^{\infty} \int_{x_0}^{\infty} \frac{2dYdx_2(x_2+Y)}{x_T \text{sh} \frac{2(x_2+Y)}{x_T}} J_0(2z \sin \frac{x_2}{2x_0}) J_0(2z \sin \frac{Y}{2x_0}) \quad (G.17)$$

avec $z = q_b x_0$. Dans ce domaine d'intégration, on moyenne chaque fonction de Bessel :

$$b_1 = \frac{J_n^4(z)}{4\pi b v} \int_{x_0}^{\infty} \int_{x_0}^{\infty} \frac{2dx dy \frac{(x+y)}{x_T}}{\text{sh} \frac{2(x+y)}{x_T}} \quad (G.18)$$

Ce terme peut s'écrire sous la forme :

$$b_1 = \frac{J_n^4(z)}{(4\pi)^3 v b T^2} F\left(\frac{x_0}{x_T}\right) \quad (G.19)$$

avec

$$F(y) = \int_y^{\infty} dt \int_{t+y}^{\infty} \frac{zdz}{\text{sh}z} \quad (G.20)$$

Si $x_T = 2x_0$,

$$b_1 = \frac{J_n^4(z)}{(4\pi)^3 v b T^2} \times 2.23 \quad (G.21)$$

II- $(x_2 < x_0 \text{ et } Y > x_0)$ ou $(x_2 > x_0 \text{ et } Y < x_0)$

En intégrant d'abord sur x_1 , on trouve :

$$b_2 = \frac{J_n^2(z)}{2\pi b v^3} \int_d^{x_0} dx \int_{x_0}^{\infty} dy \frac{\frac{2(x+y)}{x_T}}{\text{sh} \frac{2(x+y)}{x_T}} J_0(q_b x) \quad (G.22)$$

Posons $Y = \frac{2(x+y)}{x_T}$ et $u = q_b x$, on en déduit :

$$b_2 = \frac{J_n^2(z)}{16\pi^2 b v T t_b} \int_0^{q_b x_0} J_0(u) du \int_{\frac{2}{x_T}(u/q_b + x_0)}^{\infty} \frac{Y dy}{\text{sh} Y} \quad (G.23)$$

Comme $q_b x_0 \sim n$ et $x_T \sim 2x_0$:

$$b_2 \approx \frac{J_n^2(z)}{16\pi^2 b v T t_M} \int_0^n J_0(u) du \int_{\frac{u}{n} + 1}^{\infty} \frac{Y dY}{\text{sh} Y} \quad (G.24)$$

avec $t_M = t_b \cos \frac{q_\perp}{2} \approx t_b' \cos q_\perp \approx t_b'$. En évaluant l'intégrale double, on déduit l'estimation :

$$b_2 \approx \frac{J_n^2(z)}{16\pi^2 b v T t_b'} 1.5 \quad (G.25)$$

III - $c_2 < x_0, Y < x_0$

On fait les approximations suivantes : $\cos(p + x_1/x_0) \approx \cos p$, $\sin \frac{Y}{2x_0} \approx \frac{Y}{2x_0}$

et $\sin x_2/2x_0 \approx x_2/2x_0$. On en déduit :

$$b_3 \approx \frac{1}{4\pi b v^3} \int_d^{x_0} \int_d^{x_0} \frac{2x dy (\frac{x+y}{x_T})}{\text{sh} \frac{2(x+y)}{x_T}} J_0(q_b(x+y)) \quad (G.26)$$

En posant $u = q_b(x+y)$, $v = q_b x$, il vient :

$$b_3 \approx \frac{1}{64\pi b v t_b'^2} \int_0^{q_b x_0} dv \int_v^{v+q_b x_0} \frac{du \frac{2u}{q_b x_T}}{\text{sh} \frac{2u}{q_b x_T}} J_0(u) \quad (G.27)$$

Et comme $q_b x_0 \approx n$, $x_T = 2x_0$:

$$b_3 \approx \frac{1}{64\pi b v t_b'^2} \int_0^n dv \int_v^{v+n} \frac{du \frac{u}{n}}{\text{sh} \frac{u}{n}} J_0(u) \quad (G.28)$$

En évaluant l'intégrale double, on trouve :

$$b_3 \approx \frac{1}{64\pi b v t_b'^2} 0.5$$

A partir de ces estimations, et parce que 3 diagrammes contribuent de façon analogue au calcul de b , nous trouvons l'expression très approchée IV.83. L'analyse de ce terme d'ordre 4 est donc difficile à faire, mais on peut toutefois en déduire que :

- Le terme d'ordre 4 est indexé par le nombre quantique n .
- De même que la susceptibilité χ_0 varie peu dans une nappe de n donné, b_n est une fonction qui varie avec le champ.
- b_n varie de façon discontinue d'une sous-phase à la suivante.

Si le nesting est longitudinal, le développement de Ginzburg-Landau a la même structure. Mais l'énergie caractéristique t_b' est remplacée par t_b . Dans ce cas, le terme $C_3 f_n(H)$ qui est négligeable dans le cas transverse devient comparable aux autres termes du dénominateur des expressions IV.84 et IV.85. Les approximations que nous avons faites pour estimer ce terme ne nous permettent pas de déterminer avec certitude le signe de b_n , de sorte que nous n'avons pas pu en déduire la pente de la ligne de transition transverse-longitudinal. Il est même possible que b_n soit négatif de sorte que la ligne de transition métal-ODS longitudinal serait du premier ordre, comme cela semble avoir été observé dans les mesures d'aimantation de Naughton et coll. [119].

REFERENCES

BIBLIOGRAPHIE

1. A. W. Overhauser, Phys. Rev. Lett. 4, 462 (1960)
2. W. Kohn, Phys. Rev. Lett. 2, 393 (1959)
3. W. N. Lomer, Proc. Roy. Soc. 80, 489 (1962)
4. P. Monceau, J. Richard et M. Renard, Phys. Rev. Lett. 45, 43 (1980)
5. G. Grüner et A. Zettl, Phys. Rep. 119, 119 (1985)
6. P. A. Lee et T. M. Rice, Phys. Rev. B 19, 3970 (1979)
7. P. Lederer, G. Montambaux et J. P. Jamet, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 121, 99 (1985)
8. W. Mercurioff, La surface de Fermi des métaux (Masson 1967)
9. B. Souillard, G. Toulouse et M. Voos, l'effet Hall en quatre actes, Comptes rendus Acad. Sci., Série générale, 1, 321 (1985)
10. D. Jérôme et H. J. Schulz, Adv. Phys. 31, 299 (1982)
11. D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault et K. Bechgaard, J. Physique Lett. 41, L 95 (1980)
12. R. L. Greene, P. Haen, S. Z. Huang, E. M. Engler, M. Y. Choi et P. M. Chaikin, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 79, 183 (1982)
13. J. F. Kwak, Phys. Rev. B 26, 4789 (1982)
14. H. J. Schulz, D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault et K. Bechgaard, J. Physique 42, 991 (1981)
15. H. J. Schulz, D. Jérôme et K. Bechgaard, Phys. Rev. B 28, 6560 (1983)
16. C. Bourbonnais, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 11 (1985)
17. C. Bourbonnais, F. Creuzet, D. Jérôme, K. Bechgaard et A. Moradpour, J. Physique Lett. 45, L 755 (1984)
18. F. Creuzet, C. Bourbonnais, D. Jérôme, K. Bechgaard et A. Moradpour, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 45 (1985)
19. V. J. Emery, J. Physique Colloque 44, C3, 977 (1983)
20. K. Murata, L. Brossard, R. C. Lacoé, M. Ribault, D. Jérôme, K. Bechgaard et A. Moradpour, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 245 (1985)
21. J. F. Kwak, J. E. Schirber, R. L. Greene et E. M. Engler, Phys. Rev. Lett. 46, 1296 (1981)
22. L. J. Azevedo, J. E. Schirber, R. L. Greene et E. M. Engler, Physica 108B, 1183 (1981)
23. J. F. Kwak, J. E. Schirber, R. L. Greene et E. M. Engler, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 79, 111 (1982)
24. H. Bando, K. Oshima, M. Suzuki, H. Kobayashi et G. Saito, J. Phys. Soc. Japan 51, 2711 (1982)
25. P. Garoche, R. Brusetti, D. Jérôme et K. Bechgaard, J. Physique Lett. 43, L 147 (1982)

26. R. Brusetti, P. Garoche et K. Bechgaard, J. Physique Colloque 44, C3, 1051 (1983)
27. T. Takahashi, D. Jérôme et K. Bechgaard, J. Physique Lett. 43, L 565 (1982)
28. T. Takahashi, D. Jérôme et K. Bechgaard, J. Physique Colloq. 44, C3, 805 (1983)
29. M. Ribault, J. Physique Colloq. 44, C3, 827 (1983)
30. S. Tomic, D. Jérôme, P. Monod et K. Bechgaard, J. Physique Lett. 43, L839 (1982)
31. S. Tomic, D. Jérôme, P. Monod et K. Bechgaard, J. Physique Colloq. 44, C3 1083 (1983)
32. J. P. Pouget, G. Shirane, K. Bechgaard et J. M. Fabre, Phys. Rev. B 27, 5203 (1983)
33. J. P. Pouget, R. Moret, R. Comès, G. Shirane, K. Bechgaard et J. M. Fabre, J. Physique Colloq. 44, C3, 969 (1983)
34. R. Moret, J. P. Pouget, S. Ravy et R. Comès, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 257 (1985)
35. S. Kagoshima, T. Yasunaga, T. Ishiguro, H. Anzai et G. Saito, Solid State Comm. 46, 867 (1983)
36. P. Garoche, R. Brusetti et K. Bechgaard, Phys. Rev. Lett. 49, 1346 (1982)
37. J. P. Ulmet, P. Auban et S. Askenazy, Phys. Lett. 98A, 457 (1983)
38. R. Brusetti, K. Bechgaard, G. G. Lonzarich et R. H. Friend, J. Physique Colloq. 44, C3, 1055 (1983)
39. M. Y. Choi, P. M. Chaikin et R. L. Greene, J. Physique Colloq. 44, C3, 1067 (1983)
40. K. Kajimura, H. Tokumoto, M. Tokumoto, K. Murata, T. Ukachi, H. Anzai, T. Ishiguro et G. Saito, Solid State Comm. 44, 1573 (1982)
41. K. Kajimura, H. Tokumoto, M. Tokumoto, K. Murata, T. Ukachi, H. Anzai, T. Ishiguro et G. Saito, J. Physique Colloq. 44, C3, 1059 (1983)
42. M. Ribault, D. Jérôme, J. Tuchlender, C. Weyl et K. Bechgaard, J. Physique Lett. 44, L 953 (1983)
43. M. Ribault, J. Cooper, D. Jérôme, D. Mailly, A. Moradpour et K. Bechgaard, J. Physique Lett. 45, L 985 (1984)
44. P. M. Chaikin, M. Y. Choi, J. F. Kwak, J. S. Brooks, K. P. Martin, M. J. Naughton, E. M. Engler et R. L. Greene, Phys. Rev. Lett. 51, 2333 (1983)
45. P. M. Chaikin, M. Y. Choi, J. F. Kwak, J. S. Brooks, K. P. Martin, M. J. Naughton, E. M. Engler et R. L. Greene, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 79 (1985)
46. M. Ribault, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 91 (1985)

47. D. C. Mattis et E. H. Lieb, *J. Math. Phys.* 6, 304 (1965)
48. V. J. Emery, dans "Highly conducting one-dimensional solids", p. 247, eds. J. T. Devreese, R. P. Evrard et V. E. Van Doren (Plenum, New York 1979)
49. J. Solyom, *Adv. Phys.* 28, 201 (1979)
50. H. J. Schulz, Thèse d'état, Orsay (1983)
51. F. D. M. Haldane, *J. Phys. C* 12, 4791 (1979) ; *J. Phys. C* 14, 2595 (1981)
52. V. J. Emery, A. Luther et I. Peschel, *Phys. Rev. B* 13, 1272 (1976)
53. G. Montambaux, M. Héritier et P. Lederer, à paraître dans *Phys. Rev. B*
54. C. Seidel et V. N. Prigodin, *J. Low Temp. Phys.* 48, 85 (1982)
55. C. Seidel et V. N. Prigodin, *J. Low Temp. Phys.* 53, 419 (1983)
56. G. Montambaux, M. Héritier et P. Lederer, *J. Physique Lett.* 45, L 533 (1984)
57. G. I. Japaridze et A. A. Nersesyan, *J. Low Temp. Phys.* 37, 95 (1979)
58. B. Horowitz, *Solid State Comm.* 19, 1001 (1976)
59. V. N. Prigodin et Y. A. Firsov, *J. E. T. P. Lett.*, 25, 79 (1977)
60. V. J. Emery, R. Bruinsma et S. Barišić, *Phys. Rev. Lett.* 48, 1039 (1982)
61. Y. A. Bychkov, L. P. Gor'kov et I. E. Dzyaloshinskii, *J. E. T. P.* 23, 489 (1966)
62. B. Roulet, J. Gavoret et P. Nozières, *Phys. Rev.* 178, 1072 (1969)
63. P. Nozières, J. Gavoret et B. Roulet, *Phys. Rev.* 178, 1084 (1969)
64. A. Zawadowski, *Proc. of the Nobel Symposium XXIV, Suède* (New York, Academic Press, 1974)
65. P. W. Anderson, *J. Phys. C* 3, 2346 (1970)
66. N. Menyhard et J. Solyom, *J. Low Temp. Phys.* 12, 529 (1973)
67. S. Tomonaga, *Prog. Theor. Phys.* 5, 349 (1950)
68. A. Luther et V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* 33, 589 (1974)
69. J. Solyom, *J. Low Temp. Phys.*, 12, 547 (1973)
70. G. S. Grest, E. Abrahams, S. T. Chui, P. A. Lee et A. Zawadowski, *Phys. Rev. B* 14, 1225 (1976)
71. J. Solyom et G. Szabo, *Lecture Notes on Physics*, 65, eds. L. Pal, G. Grüner, A. Janossy et J. Solyom (Berlin, Springer Verlag 1977)
72. J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* 7, 1046 (1974)
73. G. E. Gurgenshvilii, A. Nersesyan et L. A. Chobayan, *J. E. T. P.* 46, 145 (1977)
74. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, *Mécanique quantique* (Hermann Paris, 1973)
75. G. . Grest, *Phys. Rev. B* 14, 5114 (1976)
76. A. Theumann, *Phys. Rev. B* 15, 4524 (1977)
77. C. Kittel, *Théorie quantique du solide*, (Dunod, Paris 1967)
78. R. Heidenreich, B. Schroer, R. Seiler et D. Uhlenbrock, *Phys. Lett. A* 54, 119 (1975)
79. S. Coleman, *Phys. Rev. D* 11, 2088 (1975)

80. V. L. Pokrovsky et A. L. Talapov, Phys. Rev. Lett. 42, 65 (1979)
H. J. Schulz, Phys. Rev. B 22, 5274 (1980)
B. Horovitz J. Phys. C 15, 161 (1982)
81. B. Horovitz, T. Bohr, J. M. Kosterlitz et H. J. Schulz, Phys. Rev. B 28, 6596 (1983)
82. S. T. Chui et P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. 35, 315 (1975)
83. J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless, J. Phys. C 6, 1181 (1973)
84. J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick et D. R. Nelson, Phys. Rev. B 16, 1217 (1977)
85. A. P. Young, J. Phys. C 11, L 453 (1978)
86. S. T. Chui et J. D. Weeks, Phys. Rev. B 14, 478 (1976) ; Phys. Rev. Lett. 40, 733 (1978)
87. B. I. Halperin et D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. 41, 121 (1978)
88. P. Minnhagen, A. Rosengren et G. Grinstein, Phys. Rev. B 18, 1356 (1978)
89. A. Luther, Phys. Rev. B 14, 2153 (1976)
90. H. J. Schulz, Phénomènes coopératifs à basse dimension, cours, Orsay, 1984.
91. V. N. Prigodin et Y. A. Firsov, J. E. T. P. 44, 1187 (1976)
92. S. Megtert, R. Comès, C. Vettier, R. Pynn et A. F. Garito, Sol. St. Comm. 37, 875 (1981)
93. C. Noguera, J. Phys. C 18, 1647 (1985)
94. P. M. Grant, J. Physique Colloq. 44, C 3-847 (1983)
95. P. M. Grant, Phys. Rev. B 16, 6888 (1982)
96. K. Yamaji, J. Phys. Soc. Japan, 51, 2787 (1982)
97. J. M. Delrieu, M. Roger, Z. Toffano, A. Moradpour et K. Bechgaard, à paraître
Z. Toffano, thèse de troisième cycle, Orsay, 1985
98. B. Horovitz, H. Gutfreund et M. Weger, Phys. Rev. B 12, 3174 (1975)
99. I. E. Dzyaloshinskii et E. I. Kats, J. E. T. P. 28, 178 (1969)
100. L. P. Gor'kov et A. G. Lebed, J. Physique Lett. 45, L 433 (1984)
101. S. Jafarey, Phys. Rev. B 6, 2594 (1977)
102. K. Yamaji, Magnetic and exotic superconductors, proceedings of the 6th Taniguchi Symposium on Magnetic Superconductors and their related problems
K. Yamaji, J. Phys. Soc. Japan, 53, 2189 (1984)
103. J. Bardeen, L. Cooper et J. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957)
104. Cette remarque a été invoquée dans un cadre différent par H. Fukuyama, P. M. Platzman et P. W. Anderson, Phys. Rev. B 19, 5211 (1979)
105. M. Héritier, G. Montambaux et P. Lederer, J. Physique Lett. 45, L 943 (1984)
106. G. Montambaux, M. Héritier et P. Lederer, Phys. Rev. Lett. 55, 2078 (1985)
107. R. P. Feynman et A. R. Hibbs, Quantum mechanics and path integrals (Mc Graw Hill, New York 1965)
108. M. Héritier, G. Montambaux et P. Lederer, J. Physique Lett. 46, L 831 (1985) et Proc. of Int. Conf. on Magnetism (San Francisco 1985)

109. K. Yamaji, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 105 (1985)
110. K. Yamaji, J. Phys. Soc. Japan, 54, 1034 (1985)
111. K. Yamaji, à paraître dans Synthetic metals
112. N. F. Mott et H. Jones, The theory of the properties of metal and alloys (Clarendon Press, Oxford, 1936)
113. K. Von Klitzing, G. Dorda et M. Pepper, Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980)
114. D. C. Tsui et A. C. Gossard, Appl. Phys. Lett. 37, 550 (1981)
115. Y. Guldner, J. P. Hertz, J. P. Vieren, P. Voisin, M. Voos et M. Razeghi, J. Physique Lett. 43, 613 (1982)
116. R. E. Prange, Phys. Rev. B 23, 4802 (1981)
117. P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958)
118. R. B. Laughlin, Phys. Rev. B 23, 5632 (1981)
119. M. J. Naughton, J. S. Brooks, L. Y. Chiang, R. V. Chamberlain et P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. 55, 969 (1985)
J. S. Brooks, M. J. Naughton, R. V. Chamberlain, L. Y. Chiang et P. M. Chaikin, Proc. of Int. Conf. Magnetism, San Francisco, 1985
120. F. Creuzet, D. Jérôme, C. Bourbonnais et A. Moradpour, J. Phys. C 18, L 821 (1985)
121. F. Pesty, P. Garoche et K. Bechgaard, Proc. of Int. Conf. Magnetism, (San Francisco, 1985) et soumis à Phys. Rev. Lett.
122. F. Pesty, thèse de troisième cycle, Orsay, 1985
123. B. Piveteau, L. Brossard, F. Creuzet, D. Jérôme, R. C. Lacoé, A. Moradpour et M. Ribault, à paraître
124. J. F. Kwak, J. E. Schirber, P. M. Chaikin, J. M. Williams et H. S. Wang, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 125, 375 (1985)
125. G. Creuzet, J. R. Cooper, F. Creuzet, D. Jérôme et A. Moradpour, à paraître
126. L. P. Gor'kov et A. G. Lebed, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 73 (1985)
127. J. P. Ulmet, P. Auban et S. Askenazy, Solid State Comm. 52, 547 (1984)
128. J. P. Ulmet, P. Auban, S. Askenazy, J. M. Fabre et P. Delhaes, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 119, 117 (1985)
129. P. Auban, Thèse (Toulouse 1985)
130. D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B 14, 2239 (1976)
131. Y. Iye et G. Dresselhaus, Phys. Rev. Lett. 54, 1182 (1985)
132. R. V. Coleman, G. Eiserman, M. P. Everson, A. Johnson et L. M. Falicov, Phys. Rev. Lett. 55, 863 (1985)
133. H. Guyot, C. Schlenker, J. P. Pouget, R. Ayroles et C. Roucau, J. Phys. C 18, 4427 (1985)
134. I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik, Table of integrals series and products (Academic Press, Londres, 1965)

135. L. P. Gor'kov, J. E. T. P. 9, 1364 (1959)
136. A. L. Fetter et J. D. Walecka, Quantum theory of many particle systems (Mc Graw Hill, New York 1971)
137. L. P. Gor'kov, J. E. T. P. 7, 505 (1958)