ORSAY
n° d'ordre :

UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de Docteur en Sciences
de l'Université Paris XI, Discipline : Physique,
Spécialité Physique des Solides, par

Jan Christoph Nickel

Sujet : **Antiferromagnétisme et supraconductivité dans les conducteurs quasi-unidimensionnels, étude par renormalisation**

Soutenue le 17 septembre 2004 devant la Commission d'examen :

MM.	B. Douçot	Président
	N. Dupuis	
	M. Fabrizio	Rapporteur
	T. Giamarchi	Rapporteur
	M. Héritier	Directeur
	D. Jérome	

Cette thèse a été effectuée au Laboratoire de Physique des Solides à Orsay, et je remercie Jean Charvolin et Jean-Paul Pouget de m'y avoir accueilli.

Je voudrais exprimer ma gratitude à tous les membres du jury, Benoît Douçot, Nicolas Dupuis, Michele Fabrizio, Thierry Giamarchi, Michel Héritier et Denis Jérome. Je remercie Benoît Douçot d'avoir assumé la fonction du président de jury, et Michele Fabrizio et Thierry Giamarchi d'avoir accepté d'en être les rapporteurs.

Pascal Lederer m'avait initialement invité à venir au "bâtiment 510", et même si nous n'avons malheureusement pas pu travailler ensemble, il a toujours suivi mon travail avec bienveillance, en intervenant aux moments critiques. Je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie Marc Gabay et Khuôn-Viêt Pham d'avoir alors guidé mes premiers pas en physique des solides.

Ensuite, Michel Héritier m'a offert de travailler sous sa direction. Malgré ses multiples obligations, j'ai pu bénéficier de sa vaste compétence ainsi que de son soutien constant tout au long de cette thèse. Je l'en remercie chaleureusement.

Le travail sur la physique des conducteurs quasi-unidimensionnels présenté dans ce mémoire résulte d'une collaboration intense avec Nicolas Dupuis. J'ai beaucoup apprécié l'interaction avec lui, qui s'est révelée très formatrice. Son esprit clair, son talent pour toujours trouver la formulation la plus simple possible (mais jamais simplifiée), son exigence de constamment chercher la signification physique derrière le résultat d'un calcul continueront à me servir d'exemple. Je tiens à lui exprimer ma profonde reconnaissance.

J'ai "découvert" la technique du groupe de renormalisation avec Gilles Abramovici. Son enthousiasme et ses encouragements ont été un soutien quotidien très important. Je tiens à l'en remercier très chaleureusement, ainsi que de notre collaboration sur les échelles.

Je voudrais exprimer ma gratitude à Sonia Haddad pour notre collaboration, et pour avoir partagé avec moi ses connaissances sur la physique des conducteurs organiques sous champ.

Je remercie Raphaël Duprat et Claude Bourbonnais pour notre collaboration sur la supraconductivité triplet.

La motivation expérimentale de cette thèse est évidente, et un des points fort de ce laboratoire est la possibilité d'interaction directe entre théoriciens et expérimentateurs. Je remercie l'équipe Hautes Pressions des discussions dont j'ai pu bénéficier avec eux, en particulier Denis Jérome, Claude Pasquier et Nada Joo. Je voudrais également exprimer ma gratitude à Silke Biermann, Benedikt Binz, Benoît Douçot, Sébastien Dusuel, Thierry Giamarchi, Dražen Zanchi, ainsi que l'ensemble du groupe théoriciens du laboratoire pour les interactions que nous avons eues, et qui m'ont aidé à construire cette thèse.

Je remercie toutes les personnes du laboratoire de leur aide, en particulier Hervé Ballans, Annie Calleau, Alain Clément, My-Anh Dang, Anne Despallières, Yvette Dufour, Pierre Jodry, Yves Loreaux, Marie-France Mariotto,

Christophe Millien, Eric Moge et Christiane Séguy.

Je remercie en particulier tous ceux qui ont aidé à réaliser ce texte par leur lecture attentive et leurs conseils, Carole Vouille, Catherine Even, Jérôme Cayssol et notamment Gilles Abramovici, avec qui, grâce à sa vaste culture, même la correction d'un manuscrit de thèse devient un plaisir.

Mes débuts dans l'enseignement ont été accompagnés par Carole Vouille, Catherine Even et Marie-Françoise de Féraudy. Je tiens à les remercier pour leur disponibilité, leur patience et leur enthousiasme réellement contagieux.

Pour les discussions enrichissantes sur la physique et tout le reste, pour la convivialité que l'on a pu partager, je remercie Anne-Isabelle, Anu, Aurélie, Benoît, Bernard, Björn, Boris, Brigitte, Bruno, Carole, Catherine, Cesar, Claire, Dario, David, Eric, Fenglei, Jérôme, François, Gilles, Hélène, Imen, Nada, Jeanne, Kasia, Piotr, Ken, Luca, Magdalena, Mahassine, Mark, Meydi, Michèle, Patrick, Philippe, Roderich, Safia, Samy, Sébastien, Seto, Siwar, Stéphane, Torsten et Vincent.

Je suis très reconnaissant à Selma, Steffi, et ma famille, pour tous leurs encouragements, notamment pendant les moments difficiles de cette thèse.

Je remercie la "Gottlieb Daimler- und Karl Benz-Stiftung" pour le financement d'une partie importante de cette thèse.

Table des matières

1 Introduction **9**

2 Les sels de Bechgaard **15**
2.1 Les matériaux 15
2.1.1 Des conducteurs quasi-unidimensionnels 15
2.1.2 Interactions : Le modèle g-ologique 21
2.2 Le diagramme de phases 24
2.2.1 Un diagramme de phases commun 24
2.2.2 Dimensionnalité 26
2.2.3 La supraconductivité dans $(TMTSF)_2PF_6$ 29
2.3 Fluctuations de spin et supraconductivité 31
2.3.1 Ondes de densité de spin dans un conducteur quasi-unidimensionnel : étude en RPA 31
2.3.2 Supraconductivité à partir d'interactions répulsives . . 38
2.4 Quels peuvent être les effets de l'ordre anionique ? 42
2.4.1 Le potentiel périodique transversal 42
2.4.2 La dimensionnalité 43
2.4.3 L'emboîtement et les fluctuations de spin 45
2.4.4 La supraconductivité dans $(TMTSF)_2ClO_4$ 48
2.5 Pourquoi la renormalisation ? 50

3 Le groupe de renormalisation : aspects techniques **51**
3.1 La méthode 51
3.1.1 Quelques remarques historiques 51
3.1.2 La renormalisation d'après Wilson 52
3.1.3 Problèmes avec des Fermions en dimension supérieure à 1 54
3.1.4 Renormalisation avec coupure infrarouge 57
3.2 Fonctions de Green et vertex à m particules 60
3.2.1 Leur signification physique 60
3.2.2 Leur calcul à l'aide des intégrales de chemin 61
3.3 Dérivation des équations de renormalisation 64
3.3.1 L'équation de Polchinski 65

3.3.2 La renormalisation à une boucle 66
3.3.3 Equations de renormalisation pour des systèmes anisotropes 68
3.3.4 Susceptibilités 70
3.4 Comparaison des différents schémas 72
3.5 Le changement d'échelle 78

4 Diagramme de phases d'un conducteur quasi-unidimensionnel 81
4.1 Les équations, et quelques limites simples 81
4.1.1 Equations de renormalisation pour un système quasi-unidimensionnel 81
4.1.2 La signification de $q_{\mathcal{C}}$ et $q_{\mathcal{P}}$ 84
4.1.3 La dépendance en $q_{\parallel}$ 84
4.1.4 Le passage dimensionnel 86
4.1.5 Le régime unidimensionnel 87
4.1.6 Le régime bidimensionnel : Renormalisation à l'ordre logarithmique 89
4.1.7 Les équations de renormalisation d'après Duprat et Bourbonnais 90
4.1.8 Solution numérique : Aspects techniques 93
4.1.9 La coupure infrarouge et la température 94
4.2 Le diagramme de phases 95
4.2.1 Le diagramme de phases d'après le groupe de renormalisation 95
4.2.2 Influence de $q_{\mathcal{P}\parallel}$ 100
4.3 Interaction Coulombienne interchaînes et supraconductivité triplet 105
4.3.1 Diffusion vers l'arrière sur chaînes voisines 106
4.3.2 Diffusion vers l'avant 108
4.4 Conclusions 111

5 Antiferromagnétisme et supraconductivité en présence du potentiel anionique 113
5.1 Diagonalisation de la partie H_0 à une particule du Hamiltonien 113
5.2 Les phases antiferromagnétiques 115
5.2.1 Susceptibilités libres 115
5.2.2 RPA matricielle 117
5.3 Renormalisation pour un système à deux bandes 121
5.3.1 Hamiltonien dans la base propre de H_0 121
5.3.2 Equations de renormalisation 124
5.4 Le diagramme de phases 129
5.4.1 Températures critiques 132
5.4.2 V faible 133

5.4.3 V fort 140
5.5 Conclusions 145

6 Conclusions et Perspectives **147**

A Spin **151**
A.1 Paramétrisation de l'interaction en fonction du spin des particules 151
A.2 Lien avec le modèle g-ologique 154
A.3 Lien avec le modèle de Hubbard 155
A.4 Définition alternative de la paramétrisation charge-spin 155

B Détails de la dérivation des équations de renormalisation **157**
B.1 Fonctions de Green pour le cas avec champs bosoniques externes 157
B.2 Dérivation de l'équation de Polchinski 158
B.3 Développement des équations de renormalisation 158
B.3.1 Vertex 158
B.3.2 Susceptibilités 160
B.4 Systèmes anisotropes 162
B.5 Calcul des bulles 165
B.5.1 Cas général 165
B.5.2 Bulles pour un système quasi-unidimensionnel avec une bande 173
B.5.3 Le cas de deux bandes 176

C Effet des fluctuations unidimensionnelles sur l'onde de densité de spin : Passage dimensionnel continu **177**

D Susceptibilités libres pour un système quasi-unidimensionnel à deux bandes **179**

E Valeurs initiales **184**
E.1 Interaction 184
E.2 Couplages aux champs extérieurs dans un système à deux bandes 185

F Fermions sur une échelle **187**

.

Chapitre 1

Introduction

Peu de matériaux présentent des diagrammes de phases aussi riches que les conducteurs organiques quasi-unidimensionnels, les sels de Bechgaard et les sels de Fabre. En faisant varier la température et la pression, on trouve des phases métalliques, isolantes, spin-Peierls, antiferromagnétiques et supraconductrices, voir par exemple la Fig. 1.1. La phase supraconductrice a des propriétés très différentes de la supraconductivité conventionnelle, et la phase métallique est également exotique. Selon la température, elle peut ressembler à un liquide de Luttinger, ou à un liquide de Fermi, mais il y a même des régimes où son comportement est encore autre. Sous champ magnétique, on a de plus découvert des phases complètement nouvelles : des ondes de densité de spin induites par le champ, qui présentent de plus un effet Hall quantique.

Un diagramme de phases aussi riche pose un défi remarquable : trouver *un* modèle qui décrive toute cette diversité à la fois. La nature et l'origine des phases sous champ, ainsi que des ordres spin-Peierls et antiferromagnétique à champ nul sont essentiellement comprises, à quelques exceptions près. La transition métal-isolant, qui est une transition de Mott, donc induite par les interactions, a également pu être décrite théoriquement. Par contre, la phase supraconductrice reste inexpliquée, notamment en ce qui concerne sa relation avec l'antiferromagnétisme, qui se trouve juste à côté dans le diagramme de phases. De même, la phase "normale", avec ses différents régimes métalliques, reste énigmatique.

Ces matériaux sont très anisotropes. Ils ont une structure de chaînes alignées dans une direction de l'espace. Les électrons de conduction peuvent se déplacer très facilement le long des chaînes, mais beaucoup moins bien d'une chaîne à l'autre. Cette anisotropie est plus ou moins forte selon la pression hydrostatique et la composition chimique. A cause de cette structure, la température, les interactions ou le champ magnétique peuvent restreindre les électrons à un mouvement uniquement le long des chaînes, et ainsi rendre leur comportement unidimensionnel. (Plus précisément, c'est souvent seule-

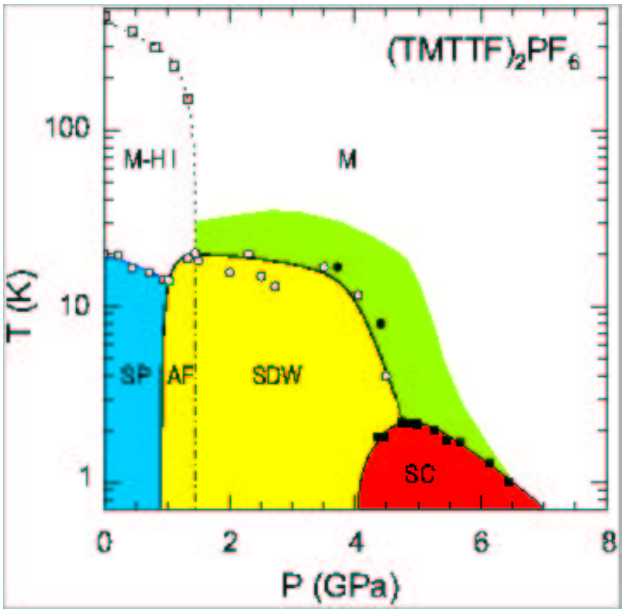


FIG. 1.1 – Le diagramme de phases température-pression du sel de Fabre $(TMTTF)_2PF_6$, selon [102].

ment le mouvement *cohérent* qui est confiné aux chaînes.) Ceci a permis d'observer pour la première fois expérimentalement des signatures possibles d'une physique unidimensionnelle dans un système fermionique, physique qui avait été confinée à la fantaisie des théoriciens jusque là. D'un autre côté, dans la partie de basse température du diagramme de phases des sels de Bechgaard et des sels de Fabre, le mouvement des porteurs n'est pas du tout restreint à l'intérieur des chaînes, et on trouve une physique, bien qu'anisotrope, intégralement bi- ou tridimensionnelle. Il y a donc des passages entre des régimes de dimensionnalités différentes dans ces matériaux, qui se reflètent dans leurs propriétés physiques, notamment dans la phase métallique. C'est pour cette raison qu'on y observe, par exemple, et des signatures d'un liquide de Luttinger, et celles d'un liquide de Fermi. Dans le contexte de ces passages dimensionnels, il y a encore un grand nombre de questions ouvertes.

C'est également vrai pour la phase supraconductrice. La nature du paramètre d'ordre n'est pas encore connue : ni l'état de spin des paires de Cooper, singulet ou triplet, ni la forme orbitale du paramètre d'ordre ; quel est son signe, et est-ce que le gap d'excitations de l'état supraconducteur est fini partout, ou présente-t-il des nœuds au niveau de Fermi ? Il y a un consensus

sur le fait que le paramètre d'ordre est anisotrope, et que l'on n'a donc pas affaire à une supraconductivité avec appariement conventionnel de type "s". Il y a des résultats expérimentaux en faveur d'une supraconductivité triplet, mais un tel état de spin a toujours été très difficile à accorder avec le fait que les ordres supraconducteur et antiferromagnétique sont voisins dans le diagramme de phases des sels de Bechgaard. De toute façon, le mécanisme d'appariement qui mène à la supraconductivité dans ces matériaux n'a pas pu être éclairci à ce jour. Un mécanisme basé sur les fluctuations du réseau cristallin, comme dans les supraconducteurs conventionnels, est très probablement exclu. Un appariement induit par les fluctuations de spin, également proposé pour les supraconducteurs à haute température critique, semble bien possible, au moins pour le cas d'une supraconductivité singulet. Un tel mécanisme serait basé sur un mouvement au moins bidimensionnel des électrons. Il a également été proposé que la supraconductivité observée dans les sels de Bechgaard provienne de fluctuations d'origine unidimensionnelle, stabilisées par le couplage interchaînes.

Dans cette thèse, nous allons aborder la question du mécanisme d'appariement et du paramètre d'ordre supraconducteur dans les sels de Bechgaard, d'un point de vue théorique. Mis à part l'intérêt qu'il y a de mieux comprendre ces composés fascinants, ce travail s'inscrit dans le cadre plus général de l'étude du problème à N corps, c'est à dire dans la quête d'une théorie qui permettrait de décrire le comportement d'un grand nombre de particules en interaction. Pendant longtemps, la théorie de Landau des liquides de Fermi a pu être considérée comme la réponse à cette question, en ce qui concerne les électrons de conduction dans les métaux. Depuis les découvertes relativement récentes de nouveaux matériaux, comme par exemple les sels de Bechgaard, ou, bien sûr, les supraconducteurs à haute température critique, et de nouveaux phénomènes comme l'effet Hall quantique fractionnaire, il est clair qu'il y a des situations, notamment dans des systèmes de dimensionnalité inférieure à trois, où les corrélations entre porteurs jouent un rôle trop important pour que la théorie de Landau soit encore applicable. Il y a donc ici une motivation importante pour tout travail qui tente de contribuer à la compréhension des fermions en interaction.

Les applications pratiques des connaissances issues de la recherche fondamentale débouchent souvent sur des aspects inattendus et pas du tout envisagés au départ. Par ailleurs, il est tout à fait possible, dans le cas présent, de faire le lien avec des applications possibles ; certes pas des applications des sels de Bechgaards eux-mêmes en tant que supraconducteurs, vu leur température de transition particulièrement basse, de l'ordre de 1K seulement ; mais d'une façon moins directe. Transport du courant électrique sans pertes, création de champs magnétiques énormes, précision impressionnante dans les mesures de champ magnétique ; l'utilité de la supraconductivité est évidente, de même l'intérêt qu'on a à trouver des supraconducteurs à température ambiante. Un pas dans ce sens a été la découverte de la supra-

conductivité dans les cuprates en 1986 [14], avec des températures critiques allant jusqu'à 135K. Comme leur fonctionnement est encore loin d'être compris, la question se pose de savoir pourquoi on ne travaille pas plutôt sur les cuprates, vu que leur température critique est d'autant plus prometteuse ? La réponse a déjà été donnée plus haut : les sels de Bechgaard sont d'un grand intérêt du point de vue de la physique fondamentale. Mais il y en a aussi un en vue d'applications : plus on étudie de supraconducteurs *différents*, plus on a de chance de comprendre les liens entre structure cristalline ou moléculaire et supraconductivité, ce qui peut aider à synthétiser de nouveaux matériaux avec les propriétés souhaitées. De plus, l'étude des sels de Bechgaard peut contribuer à la compréhension des cuprates, et vice-versa. Il y a une certaine probabilité que les mécanismes d'appariement d'électrons dans les cuprates et dans les supraconducteurs quasi-unidimensionnels soient similaires. Dans les deux familles de composés, les fluctuations antiferromagnétiques paraissent jouer un role clé. Mais grâce à leur dimensionnalité plus réduite (les cuprates eux sont quasi-bidimensionnels), les supraconducteurs quasi-unidimensionnels pourraient être plus faciles à comprendre. Finalement, leur simplicité relative permet de faire certains calculs d'une façon plus rigoureuse et d'y voir plus clairement ce qui s'y passe.

Il y a encore une autre raison d'étudier les matériaux quasi-unidimensionnels, qui est complètement indépendante de la supraconductivité. Il s'agit justement de leur dimensionnalité. Avec des nouvelles technologies qui permettent la fabrication de structures de plus en plus petites, l'étude de systèmes de dimensionnalité réduite, ainsi que la question de savoir dans quelles circonstances on peut considérer qu'un système est unidimensionnel, gagne en importance. Les sels de Bechgaard permettent d'apprendre beaucoup sur ces questions, parce qu'ils présentent une physique à la fois uni-, bi- et tridimensionnelle.

Le travail rapporté dans ce mémoire porte cependant essentiellement sur la supraconductivité dans ces matériaux. Les questions liées à la dimensionnalité ne font pas l'objet central de notre étude, mais sont bien sûr tout à fait présentes. Le sujet de cette thèse est donc la supraconductivité dans les sels de Bechgaard, ainsi que sa relation avec l'antiferromagnétisme, que nous allons étudier à l'aide du groupe de renormalisation, dans une approche de couplage faible. Par rapport aux travaux existants, nous avons essentiellement ajouté deux aspects nouveaux. Le premier est la prise en compte d'interactions pas uniquement locales, mais aussi entre électrons de chaînes voisines. Très récemment, Duprat et Bourbonnais ont trouvé que, sous certaines conditions, de telles interactions peuvent induire de la supraconductivité *triplet* dans un système quasi-unidimensionnel, tout en admettant une phase antiferromagnétique aussi. Nous avons reproduit et étendu leur étude. Le deuxième élément nouveau est que nous nous sommes intéressés à l'influence que peut avoir la structure interne de la maille élémentaire, en prenant en compte un potentiel additionnel avec une période de deux fois le pas du ré-

seau dans une des directions de l'espace. Il y a justement un sel de Bechgaard qui présente une telle structure (le perchlorate). Nous allons voir que l'effet de ce simple potentiel additionnel est remarquable. Il modifie fortement le comportement physique du perchlorate en comparaison des autres membres de la famille des sels de Bechgaard.

Notre choix de méthode est le groupe de renormalisation. Cette approche, déjà bien établie dans le traitement de problèmes bosoniques, ou de systèmes de fermions unidimensionnels, a connu des développements importants pendant ces dernières années, notamment en ce qui concerne son application à des systèmes fermioniques de dimension supérieure à un. Une partie de ce travail de thèse porte sur la comparaison de plusieurs "schémas" – plusieurs façons différentes de mettre en œuvre une même idée de base – de renormalisation, et sur l'examen de la validité d'une approximation couramment faite dans ces calculs : la projection de tous les degrés de liberté sur la surface de Fermi.

Nous commençons par une présentation des sels de Bechgaard, et une position plus concrète du problème traité dans la suite : la possibilité d'obtenir de la supraconductivité à partir d'interactions répulsives, notamment en présence de fortes fluctuations de spin, dans des systèmes quasi-unidimensionnels avec un ou deux sites par maille (chapitre 2). Le chapitre 3 est consacré à la description de notre méthode de calcul, la renormalisation des vertex à une particule irréductible dans un système fermionique. Dans le chapitre 4, nous étudions le diagramme de phases, obtenu à partir du groupe de renormalisation, du modèle le plus simple possible d'un système quasi-unidimensionnel, d'abord avec une interaction purement sur site et ensuite en prenant en compte une interaction entre sites premiers voisins afin de modéliser l'interaction de Coulomb. A basse température, nous trouvons des phases antiferromagnétique et supraconductrice. Dans le cas de l'interaction locale, il s'agit d'une supraconductivité singulet d (paramètre d'ordre $\cos k_\perp$). Les interactions premiers-voisins peuvent mener à une supraconductivité triplet, et parfois à une onde de densité de charge. Le chapitre 5 contient les résultats de l'application du groupe de renormalisation à un système quasi-unidimensionnel avec deux sites par maille élémentaire. Le diagramme de phases est fortement changé : nous obtenons deux phases antiferromagnétiques différentes, qui induisent également deux phases supraconductrices singulet, l'une à dominante d, l'autre à dominante g (paramètre d'ordre $\cos 2k_\perp$). Nous concluons en évoquant quelques perspectives pour des travaux futurs (chapitre 6). J'ai essayé de mettre un maximum de calculs dans les annexes, pour ne pas trop alourdir le texte principal.

.

Chapitre 2

Les sels de Bechgaard

Dans ce chapitre, nous présentons les sels de Bechgaard, qui font l'objet de ce mémoire, et donnons un aperçu des mécanismes qui sont susceptibles de mener aux ordres antiferromagnétique ou supraconducteur dans ces matériaux. Nous commençons par une description des principales caractéristiques de ces composés (section 2.1). La section 2.2 est consacrée à une présentation de leur diagramme de phases, et en particulier de la supraconductivité dans le composé $(TMTSF)_2PF_6$, dans lequel la supraconductivité organique a été découverte pour la première fois [104]. Le lien possible entre les fluctuations magnétiques et supraconductrices est discuté dans la section 2.3, dans une approche théorique pas forcément rigoureuse, mais assez intuitive. Une partie importante des résultats de ce travail de thèse porte sur les propriétés d'un sel de Bechgaard particulier, le perchlorate, qui présente, contrairement aux autres membres de la famille, *deux* bandes au niveau de Fermi. Les implications de cette structure particulière sur les concepts et propriétés évoqués dans les sections précédentes sont discutées dans la section 2.4. Dans les chapitres suivants, nous allons étudier les sels de Bechgaard à l'aide du groupe de renormalisation. Le choix de cette technique est motivé dans la section 2.5.

2.1 Les matériaux

Nous allons survoler les propriétés microscopiques des sels de Bechgaard qui nous intéresseront dans la suite. Pour plus de détails, voir [32] et références y inclues.

2.1.1 Des conducteurs quasi-unidimensionnels

La composition chimique

Les sels de Bechgaard $(TMTSF)_2X$ sont composés de cations organiques, les TMTSF, et de différentes molécules inorganiques anioniques X. TMTSF

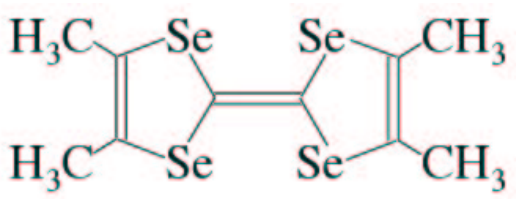


FIG. 2.1 – La molécule TMTSF (de [159]).

signifie tétraméthyl-tétraséléna-fulvalène. Sa structure est montrée à la Fig. 2.1. Si on remplace les atomes de sélénium dans TMTSF par du soufre, on obtient les sels de Fabre $(TMTTF)_2X$, où TMTTF signifie tétraméthyl-tétrathia-fulvalène, et X est encore un anion inorganique. Un assez grand nombre de sels de Bechgaard, et de Fabre, avec des anions différents a été synthétisé, par exemple X=PF_6, AsF_6, ClO_4 ou ReO_4. La structure et les diagrammes de phase très riches de tous ces composés présentent des analogies remarquables. Afin de garder la discussion la plus simple possible, nous allons cependant nous focaliser sur les deux sels de Bechgaard exemplaires $(TMTSF)_2PF_6$ et $(TMTSF)_2ClO_4$, l'hexafluorophosphate et le perchlorate.

La structure cristalline

Les molécules TMTSF sont presque planes. Elles s'entassent dans une direction **a** perpendiculaire au plan de la molécule et forment ainsi des chaînes de molécules. Ces chaînes sont arrangées parallèlement en feuilles (dans des plans **ab**), et les feuilles s'empilent, avec les anions intercalés entre elles, selon la direction **c** (Figs. 2.2 et 2.3). La maille élémentaire contient deux molécules TMTSF et un anion X. La structure cristalline est triclinique. Sur la Fig. 2.2, on voit que les molécules TMTSF ne forment pas des chaînes toutes droites, mais en zigzag. De plus, comme il y a seulement un anion pour deux cations, les liens qui connectent une molécule TMTSF avec ses deux voisines dans la chaîne ne sont pas équivalents. On a alors une légère dimérisation dans la direction des chaînes. La bande d'énergie formée par les orbitales extérieures des molécules TMTSF est à trois quarts remplie en électrons, ou bien à un quart en trous, si on néglige la dimérisation dans la direction parallèle aux chaînes. Quand on prend la dimérisation en compte, la bande de valence devient à demi remplie. Ceci génère des interactions Umklapp entre électrons. Dans la partie du diagramme de phases de ces matériaux qui nous intéresse dans la suite, ces processus devraient être faibles et ne pas jouer de rôle important.

Les chaînes de TMTSF sont centro-symétriques par rapport aux positions

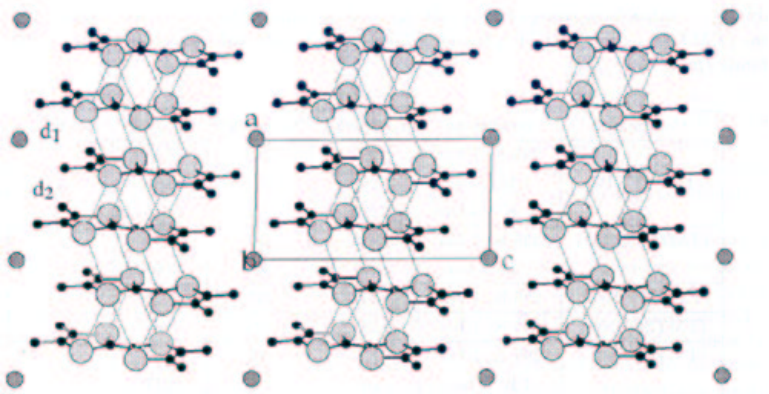


FIG. 2.2 – Projection de la structure cristalline des sels de Bechgaard dans le plan $(\mathbf{a}, \mathbf{c})$, d'après [153]. Les points gris entre les chaînes représentent les anions.

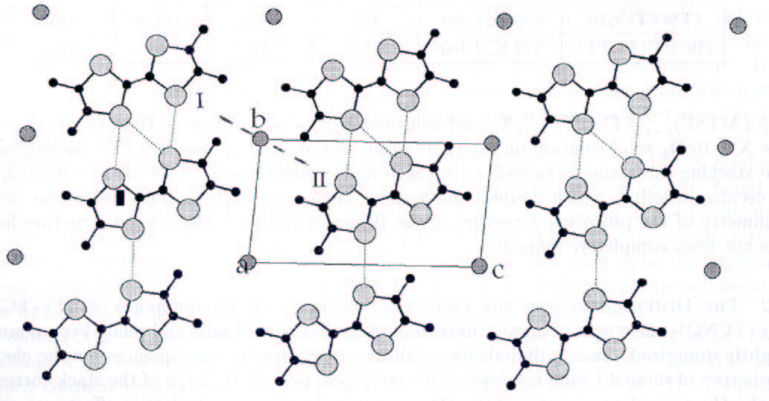


FIG. 2.3 – Comme la Fig. 2.2, mais pour le plan $(\mathbf{b}, \mathbf{c})$.

des anions. Certains anions, comme le PF_6, ont la même symétrie. Ceci n'est cependant pas le cas pour le ClO_4, qui constitue un tétraèdre et qui présente deux orientations différentes dégénérées en énergie dans le cristal. A haute température, les molécules de ClO_4 oscillent entre les deux, tandis qu'à basse température, $T < T_{AO} = 24$K, elles restent gelées avec des orientations fixes. Si on refroidit le matériau suffisamment lentement, l'orientation des anions est ordonnée : uniforme dans les directions **a** et **c**, et alternée dans la direction **b**. Cet état s'appelle "relaxé". Si le refroidissement se fait d'une façon trop rapide, on atteint l'état "trempé", où les orientations des anions sont désordonnées. Pour plus de détails sur l'origine et les aspects structuraux de cet ordre anionique, voir les références [153, 152]. Ses effets seront discutés dans la section 2.4 et le chapitre 5.

Les intégrales de transfert : calculs de structure de bande

Le mouvement des porteurs dans les sels de Bechgaard peut être décrit, dans l'approximation des liaisons fortes, par une relation de dispersion de la forme

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t_a \cos\frac{1}{2}\mathbf{k}.\mathbf{a}_0 - 2t_b \cos\mathbf{k}.\mathbf{b} - 2t_c \cos\mathbf{k}.\mathbf{c} \ . \qquad (2.1)$$

(Comme la maille élémentaire contient deux cations, sa longueur est $a_0 = 2a$, a étant la distance moyenne entre deux molécules de TMTSF le long de la chaîne.) Le recouvrement des orbitales est bien meilleur à l'intérieur d'une chaîne qu'entre chaînes voisines, de sorte que le déplacement des électrons dans la direction des chaînes est bien plus facile que les sauts d'une chaîne à l'autre dans la direction **b**. Le mouvement selon la direction **c** est encore plus difficile. Les intégrales de transfert dans les directions **a** et **b** diffèrent d'un ordre de grandeur, et il en est de même entre **b** et **c**.

Les intégrales de transfert t_i ont été évaluées par des calculs de structure de bande. En réalité, pour chaque direction, il y a plusieurs t_i différents, avec des signes parfois opposés, voir la Fig. 2.4. Pour comprendre comment on peut définir des valeurs effectives t_a et t_b dans (2.1), voir [198, 47, 132]. A température et pression ambiantes, Grant [80] obtient $t_a/t_b \approx 14$ pour $(TMTSF)_2PF_6$ et $t_a/t_b \approx 17$ pour $(TMTSF)_2ClO_4$. Quant aux valeurs absolues de t_b, les résultats sont $t_b \approx 300$K pour $(TMTSF)_2PF_6$ et $t_b \approx 250$K pour $(TMTSF)_2ClO_4$. Ducasse *et al* [47] ont montré qu'en passant à basse température, $T < 10K$, les intégrales de transfert dans la direction **b** peuvent augmenter fortement (parfois d'un facteur 3), tandis que les t_a ne sont augmentés que de 15% environ. Les mêmes auteurs ont trouvé que, si de plus on augmente la pression hydrostatique, les changements sont moins brutaux (à $P = 7$kbar, l'augmentation des t_i par rapport à leurs valeurs à pression ambiante est de 5 à 10%) et plus homogènes entre t_a et t_b. Ils ont aussi estimé que les variations des t_i dues à l'ordre anionique (section 2.4.1) devraient être inférieures à 1%. Les calculs de structure de bande rapportés dans [6]

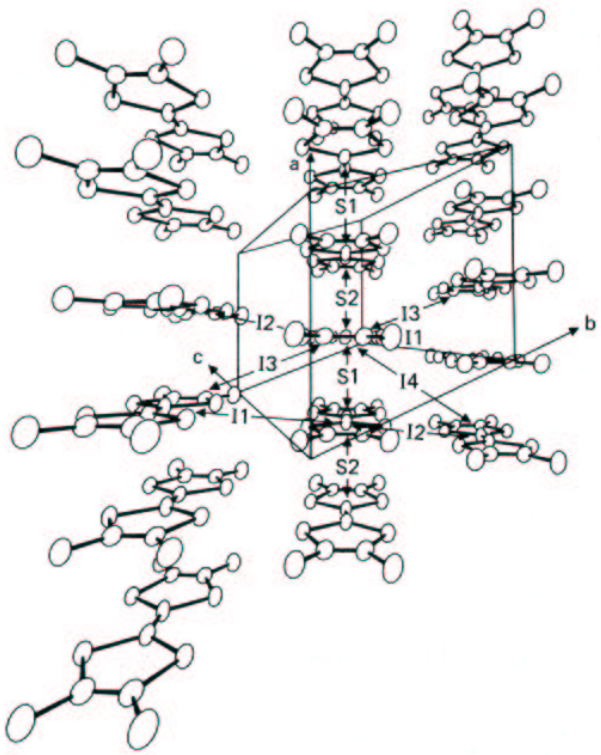


FIG. 2.4 – Diverses intégrales de transfert calculées dans les calculs de structure de bande, de [80].

donnent des valeurs de t_a/t_c entre 250 et 400 (selon l'approximation) pour $(TMTSF)_2PF_6$, à température et pression ambiantes.

Mesures des intégrales de transfert

Il n'est pas évident de tirer des expériences des informations non ambigües sur les t_i. Il y a des mesures sous champ magnétique qui permettent d'établir une image de la forme de la surface de Fermi (oscillations de Danner-Chaikin [45]) et en conséquence des rapports entre les t_i. L'anisotropie de la conductivité peut aussi être mesurée et devrait être liée aux intégrales de transfert selon

$$\sigma_a : \sigma_b : \sigma_c = (at_a)^2 : (bt_b)^2 : (ct_c)^2 \ ,$$

voir par exemple [103]. Mais, d'un point de vue théorique, il n'est pas clair que les t_i observées dans ces expériences correspondent aux grandeurs renormalisées par les interactions (voir la section 2.2.2), ou aux valeurs "nues" qu'on devrait obtenir dans les calculs de structure de bande. Les températures de passage dimensionnel (voir la section 2.2.2) ne sont définies qu'en

ordre de grandeur. De plus, il semble que la température de passage dimensionnel que l'on déduit d'une expérience dépende aussi de la propriété physique qu'on sonde, voir par exemple [71, 139].

Choix d'un modèle

Par simplicité, nous allons travailler avec une structure orthorhombique plutôt que triclinique. La surface de Fermi de la Fig. 2.8 est donc remplacée dans nos calculs par celle de la Fig. 2.9. De plus, nous allons négliger la direction de plus faible transport, **c**. Nous passons alors des trois directions **a**, **b** et **c** aux deux directions "$\|$" et "$\perp$". Comme tous nos calculs concerneront des températures largement inférieures à la largeur de bande, et comme nous supposons des interactions faibles, nous nous plaçons dans la limite de basse énergie, où on peut linéariser la relation de dispersion dans la direction $\|$, c'est à dire

$$-2t_{\|}\cos k_{\|}a \mapsto v_{F\|}\left(\left|k_{\|}\right| - k_F^{1D}\right) \ . \tag{2.2}$$

La vitesse de Fermi selon la direction parallèle aux chaînes,

$$v_{F\|}(k_\perp) = 2at_{\|}\sin\bigl(k_{F\|}(k_\perp)a\bigr) \ ,$$

varie le long de la surface de Fermi, mais, comme cette variation est faible, $dv_{F\|}/dk_\perp \underset{\sim}{\propto} (t_\perp/t_{\|})v_{F\|}$, nous allons la négliger. Par contre, l'approximation (2.2) est un peu trop forte, elle rend l'emboîtement de la surface de Fermi parfait, ce qui n'est pas réaliste. Pour garder la même forme de la surface de Fermi, la première correction par rapport à (2.2) consiste à inclure dans H_0 un terme

$$-2t'_\perp\cos(2k_\perp b) \ , \text{ où } t'_\perp = \frac{\cos k_{F\|}a}{4\sin^2 k_{F\|}a}\frac{t_\perp^2}{t_{\|}} \ ,$$

voir par exemple [132], dont on remarque qu'il a la même forme qu'un terme de saut vers des chaînes seconds-voisins.

La bande effective que nous allons utiliser dans la suite sera $\sim [v_{F\|}k_F^{1D} - \Lambda_0, v_{F\|}k_F^{1D} + \Lambda_0]$ (voir aussi la section 4.1), avec une valeur de Λ_0 de l'ordre de t_a, c'est à dire Λ_0 entre 4000K et 5000K environ. Pour $t_\perp$, nous avons choisi

$$t_\perp = 300\text{K} \ .$$

Dans nos calculs, seul le rapport entre $t_\perp$ et Λ_0 importe. Nous l'avons fixé à

$$\frac{t_\perp}{\Lambda_0} = \frac{1}{15} \ .$$

Dans nos équations finales, $v_{F\|}$ peut être absorbée dans la paramétrisation de l'interaction, voir plus bas, de sorte qu'elle n'apparaît jamais explicitement. Nous allons faire varier $t'_\perp$. Pour que ceci corresponde à une variation de la pression hydrostatique, nous devrions faire varier Λ_0 et $t_\perp$ également,

et aussi les paramètres $\tilde{g}$ qui décrivent l'interaction (section 2.1.2). Nous allons nous restreindre à la variation de $t'_\perp$ afin d'étudier les seuls effets du changement de la qualité de l'emboîtement. Les changements de $v_{F\|}$, Λ_0, $t_\perp$ et $t'_\perp$ avec la température dans la gamme de températures qui nous intéresse ($0\mathrm{K} < T < 24\mathrm{K}$) sont négligeables [47].

En seconde quantification, la partie à une particule du Hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \text{ , où} && (2.3)\\ \epsilon_{\mathbf{k}} &= v_{F\|}\left(\left|k_\|\right| - k_F^{1D}\right) + \epsilon_\perp(k_\perp) \text{ ,} && (2.4)\\ \epsilon_\perp(k_\perp) &= -2t_\perp \cos k_\perp b - 2t'_\perp \cos 2k_\perp b \text{ .} && (2.5) \end{aligned}$$

A partir des opérateurs de création et d'annihilation d'une particule de spin σ sur le site $\mathbf{x}$, $c^\dagger_{\mathbf{x}\sigma}$, $c_{\mathbf{x}\sigma}$, les opérateurs $c^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\sigma}$ sont donnés par

$$c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}} c^\dagger_{\mathbf{x}\sigma} \text{ ,}$$

$N = N_\perp N_\|$, $N_\perp$ le nombre de chaînes et $N_\|$ le nombre de sites par chaîne. Dans la suite, nous allons souvent utiliser des opérateurs R, L, correspondant au mouvement vers la droite ou vers la gauche le long des chaînes, et définis par

$$\begin{aligned} c^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\sigma} &= R^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\sigma} \text{ si } k_\| > 0 \text{ ,}\\ c^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\sigma} &= L^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\sigma} \text{ si } k_\| < 0 \text{ .} \end{aligned}$$

2.1.2 Interactions : Le modèle g-ologique

Grâce à l'écrantage, la répulsion de Coulomb entre porteurs peut être décrite par une interaction effective de courte portée. Pour commencer, nous allons nous restreindre à la modéliser par une interaction sur site uniquement. Ceci revient à une interaction constante dans l'espace réciproque. C'est au cours de la renormalisation que les interactions acquerront une dépendance en vecteur d'onde.

En général, la partie du Hamiltonien décrivant l'interaction s'écrit comme suit :

$$H_I = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_j\sigma_j} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2} w(\mathbf{k}_j,\sigma_j) c^\dagger_{\mathbf{k}'_1\sigma'_1} c^\dagger_{\mathbf{k}'_2\sigma'_2} c_{\mathbf{k}_2\sigma_2} c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \text{ .} \qquad (2.6)$$

Pour des systèmes unidimensionnels à basse température, il s'est avéré utile de décrire les interactions entre électrons par le modèle dit "g-ologique" [57, 179]. Comme nous avons affaire à des systèmes *quasi*-unidimensionnels, nous allons adopter le même formalisme. Dans ce modèle, on distingue des

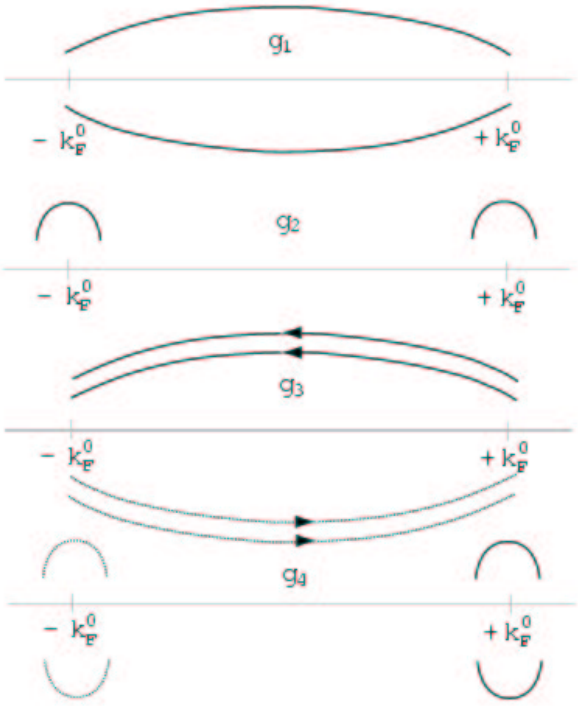


FIG. 2.5 – Décomposition de l'interaction entre électrons dans un système unidimensionnel, de [32].

paramètres $g_{j\alpha}$, où $\alpha = \|, \perp$ réfère au spin des porteurs et $j = 1, 2, 3, 4$ à la direction selon laquelle ils se déplacent, le long des chaînes, avant et après la collision (Fig. 2.5). Pour $j = 1, 2$, les deux participants se dirigent en sens opposés. Pour $j = 2$, chacun garde son orientation (diffusion vers l'avant, $R^\dagger L^\dagger LR$), tandis que dans le cas $j = 1$, les deux orientations changent (diffusion vers l'arrière, $R^\dagger L^\dagger RL$). g_3 est associé à des interactions Umklapp dans la direction parallèle aux chaînes ; les deux participants se dirigent dans le même sens avant la collision, qui les fait changer d'orientation ensemble, par exemple $R^\dagger R^\dagger LL$. Ceci est possible seulement si le changement de vecteur d'onde total correspond à un vecteur du réseau réciproque, condition qui, à basse température, ne peut être satisfaite que si la bande de conduction est à demi remplie, du moins d'une manière approximative. Comme dans les sels de Bechgaard, la dimérisation dans la direction parallèle, qui est susceptible de rendre ces matériaux à demi plutôt qu'au quart remplis, est faible, l'interaction Umklapp l'est aussi. Nous allons la négliger dans la suite. A quart

remplissage, il y a aussi des processus Umklapp qui font intervenir quatre particules à la fois. Il a été proposé que de tels processus jouent un rôle décisif dans la transition de Mott observée dans les sels de Fabre [75, 171] ; ils ne seront pas pris en compte dans notre travail, qui se limite aux interactions à deux particules. Finalement, $j = 4$ correspond aux interactions entre porteurs qui se dirigent dans le même sens avant et après leur rencontre ($L^\dagger L^\dagger LL$ ou $R^\dagger R^\dagger RR$). Comme les processus g_4 n'interviennent jamais directement dans les termes qui donnent des corrections logarithmiques, nous allons les négliger également.

Dans cette thèse, nous ne traiterons que des interactions invariantes par rotation de spin. Sous cette condition, la partie du Hamiltonien décrivant l'interaction s'écrit finalement

$$\begin{aligned} H_I = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_j} \sum_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1} \times \\ \times \left\{ g_1(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1) R^\dagger_{\mathbf{k}'_1,\sigma} L^\dagger_{\mathbf{k}'_2,\sigma'} R_{\mathbf{k}_1,\sigma'} L_{\mathbf{k}_2,\sigma} \right. \\ \left. + g_2(\mathbf{k}'_1,\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1) R^\dagger_{\mathbf{k}'_1,\sigma} L^\dagger_{\mathbf{k}'_2,\sigma'} L_{\mathbf{k}_2,\sigma'} R_{\mathbf{k}_1,\sigma} \right\} , \end{aligned} \tag{2.7}$$

voir aussi l'annexe A. On remarque l'ordre des $\mathbf{k}_j$ dans les arguments des fonctions $g_{1,2}$ en comparaison avec l'ordre des opérateurs R, L associés : dans l'argument des fonctions de couplage, nous gardons toujours l'ordre "RLLR" afin de faciliter l'écriture des équations de renormalisation ainsi que leur implémentation numérique. Pour plus de détails sur la paramétrisation de l'interaction, et le lien entre les fonctions $g_{1,2}$ et l'interaction w de l'équation (2.6), voir l'annexe A.

La force et la portée des interactions dans les sels de Bechgaard ne sont pas connues, et le débat n'est pas tranché, voir par exemple [171, 32]. Nous allons utiliser une valeur de l'interaction qui, pour un système avec emboîtement parfait (cf. la section 2.3.1), donne une température critique de transition vers l'état onde de densité de spin du même ordre de grandeur (~ 10K) que celle observée dans $(TMTSF)_2PF_6$à pression ambiante (cf. la section 2.2). Ceci implique notamment que nous allons utiliser des interactions *différentes* selon la méthode de calcul. Nous allons voir (section 4.1.5) que les fluctuations unidimensionnelles réduisent fortement les interactions effectives par rapport aux interactions "nues", non-renormalisées. Comme, dans des calculs en RPA (section 2.3.1), ces fluctuations ne sont pas prises en compte, nous utiliserons des interactions plus faibles dans les calculs en RPA qu'avec le groupe de renormalisation afin de pouvoir comparer les deux méthodes de calcul.

Il se trouve que le paramètre pertinent pour nos calculs n'est pas l'interaction g, mais g normalisé par rapport à la densité d'états,

$$\tilde{g}_j := \frac{a}{\pi v_{F\|}} g_j \ .$$

(La densité d'états par spin et par feuillet de la surface de Fermi est $a/(2\pi v_{F\|})$. On rappelle que $v_{F\|} \propto a t_\|$.) Nous allons utiliser $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.8$ pour les calculs de groupe de renormalisation et $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3445$ pour la RPA, de façon à avoir la même température de transition vers l'onde de densité de spin à $t'_\perp = 0$.

Nous allons négliger l'interaction entre électrons et phonons, voir la discussion dans la section 2.2.3.

2.2 Le diagramme de phases

2.2.1 Un diagramme de phases commun

Dans cette section, nous allons donner un aperçu du diagramme de phases des sels de Fabre et des sels de Bechgaard. Pour plus de détails, voir par exemple [32, 102] et références y inclues.

La Fig. 2.6 montre le diagramme de phases température-pression hydrostatique du sel de Fabre $(TMTTF)_2PF_6$. Les diagrammes pour $(TMTTF)_2X$ avec d'autres anions X, ainsi que ceux des sels de Bechgaard, $(TMTSF)_2X$, sont équivalents au premier si on décale la pression. Les points correspondant à la pression ambiante pour les diagrammes de phases de certains composés sont indiqués sur la Fig. 2.6. Considérons d'abord $(TMTSF)_2PF_6$. Ses propriétés à haute température sont celles d'un liquide de Luttinger (LL). En-dessous d'une température T_m (appelée T_{x^1} sur la Fig. 2.6), ceci n'est plus le cas. A température suffisamment basse, on retrouve le comportement d'un liquide de Fermi (FL), s'il n'y a pas de transition de phase vers un état antiferromagnétique (AF) ou supraconducteur (SC). Comme, dans le cas du $(TMTSF)_2PF_6$, la phase au-dessus de la phase antiferromagnétique est métallique, on a affaire à de l'antiferromagnétisme itinérant, donc à une onde de densité de spin. Dans des expériences de diffusion de rayons X, Pouget et Ravy [153] ont trouvé des indications montrant qu'il s'agit plutôt d'une combinaison d'une onde de densité de spin et d'une onde de densité de *charge*. Ceci n'est cependant pas le cas pour tous les sels de Bechgaard. Dans le composé $(TMTSF)_2AsF_6$, aucune indication d'une onde de densité de charge n'a été trouvée dans cette phase [108].

Les sels de Fabre présentent de plus une phase isolant de Mott (IM), qui se trouve à côté du régime LL, en-dessous d'une température T_ρ. Cette transition ne concerne que les degrés de liberté de charge, les degrés de liberté de spin restent inaffectés – signature de la séparation spin-charge dans la physique des fermions dans une dimension. A des températures plus basses, des phases spin-Peierls (SP) ou antiferromagnétiques apparaissent. Comme, dans cette partie du diagramme de phases, l'antiferromagnétisme suit une phase d'électrons localisés, il s'agit ici d'un état de Néel. Ces phases n'apparaissent pas dans nos calculs. Afin d'obtenir une transition spin-Peierls, il faudrait tenir compte des interactions entre électrons et phonons. La locali-

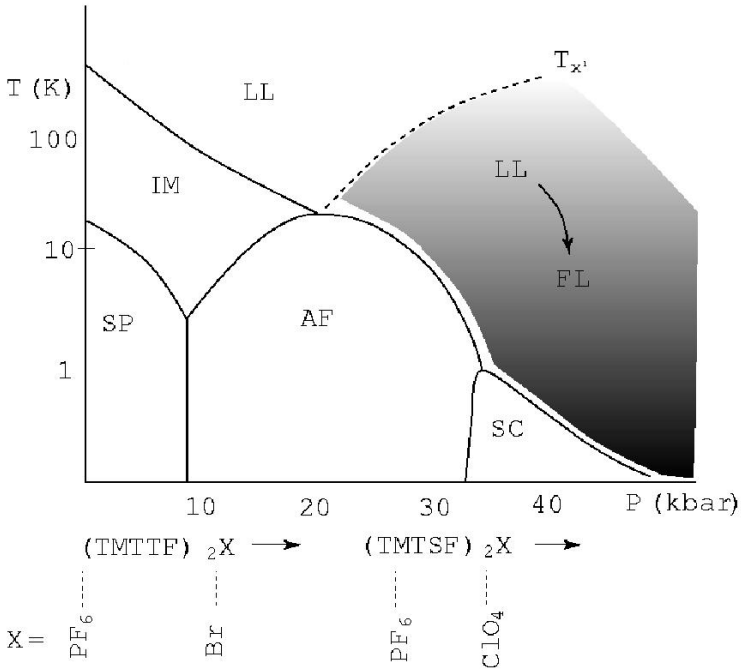


FIG. 2.6 – Diagramme de phases générique des sels de Fabre et de Bechgaard, d'après [48].

sation des charges des états IM et Néel provient des processus Umklapp, que nous négligeons aussi.

La similarité de la physique d'une aussi grande famille de composés est remarquable. Soulignons tout de même que, comme dans toutes les familles, un regard de plus près révèle aussi des différences. Nous avons déjà mentionné un exemple, la présence de fluctuations de charge dans $(TMTSF)_2PF_6$, mais pas dans $(TMTSF)_2AsF_6$. Le perchlorate $(TMTSF)_2ClO_4$ constitue aussi un cas à part, parce qu'il présente un ordre anionique à basse température, qui pourrait mener à un paramètre d'ordre supraconducteur particulier. Nous allons revenir sur ce sujet dans la section 2.4.4.

La plupart de ces phases sont essentiellement comprises, à l'exception de la phase supraconductrice, et de la phase métallique, avec son passage d'un régime plutôt unidimensionnel à un comportement bi- et finalement tridimensionnel. Discutons d'abord de ces passages dimensionnels (section 2.2.2) et ensuite de la supraconductivité (section 2.2.3). Dans la suite de cette thèse, nous allons nous focaliser sur la phase supraconductrice, ainsi que sa relation avec l'antiferromagnétisme.

2.2.2 Dimensionnalité

Les grandes différences entre les intégrales de transfert t_a, t_b et t_c ont pour conséquence que la dimensionalité effective de ces matériaux, a priori bien sûr tridimensionnels, change selon l'échelle d'énergie.

Régime de haute température

Considérons d'abord la température. A haute température, $T \gg t_b$, le bruit thermique efface toute différentiation entre niveaux induite par les termes en t_b ou t_c dans H_0 (Fig. 2.7), de sorte que les propriétés physiques dépendent uniquement du premier terme (et des interactions, bien sûr) : Seul k_a est important, le mouvement selon les directions **b** et **c** n'a pas d'effet sur la physique à haute température. Le comportement des sels de Bechgaard à haute température devrait par conséquence être bien décrit par la théorie du liquide de Luttinger. Les températures $T \gg t_b$ ne sont cependant pas accessibles expérimentalement dans les sels de Bechgaard. Les cristaux sont détruits si on les chauffe au-delà de 340K environ [137, 138]. Mais, même à des températures plus proches de t_b, on retrouve encore la physique du liquide de Luttinger dans plusieurs propriétés de ces composés. Donnons deux exemples : la dépendance en température de la résistivité ρ_a le long des chaînes n'est pas quadratique, mais ρ_a est proportionnelle à $T^{0.5}$ [138] ; et l'observation d'un (pseudo-)gap de charge [188] simultanément avec un spectre d'excitations de spin sans gap [196] indique une séparation des degrés de liberté de spin et de charge. Par contre, il reste encore des questions ouvertes, ne serait-ce qu'en ce qui concerne ce régime de haute température. Notamment, on ne sait pas clairement quelles sont la force et la portée des interactions entre porteurs. Il n'y a pas un choix unique des paramètres de la théorie (comme par exemple le paramètre K_ρ du liquide de Luttinger) qui permettrait d'expliquer tous les résultats expérimentaux à la fois, voir par exemple [171, 205].

Régime de basse température

A basse température, $T \leq t_c$, tous les termes du Hamiltonien rentrent en jeu, et on s'attend au comportement d'un métal usuel anisotrope, qui serait décrit par la théorie de Landau des liquides de Fermi. Comme pour le liquide de Luttinger, les expériences ne confirment cette attente que partiellement. On trouve effectivement un rapport entre les résistivités ρ_a/ρ_c indépendant de la température [32], une chaleur spécifique électronique linéaire en température [73], avec une constante de Sommerfeld qui, avec la susceptibilité de spin [129], donne un rapport de Wilson qui s'accorde bien avec la théorie de Landau, et, dans les expériences de conductivité optique, on observe un pic de Drude dans les trois directions de l'espace [91]. D'un autre côté, la variation de la constante de Sommerfeld avec le champ magnétique [34] ne

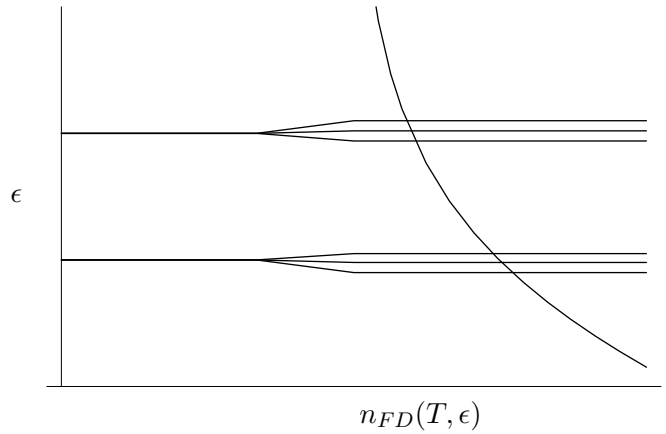


FIG. 2.7 – Occupation des états propres de H_0, avec et sans prise en compte de t_b (très schématiquement) : à gauche, deux niveaux d'énergie voisins de H_a. Leurs occupations selon la distribution de Fermi-Dirac $n_{FD}(T,\epsilon)$ sont bien différentes. A droite, les niveaux qu'on obtient si on prend en compte le saut interchaînes t_b. A la température pour laquelle nous avons tracé n_{FD}, les différences d'occupation entre ces niveaux sont négligeables.

peut pas être expliquée dans le cadre de la théorie de Landau. Un autre résultat qui ne s'accorde pas avec l'image d'un liquide de Fermi anisotrope est que le poids spectral du pic de Drude dans les directions **a** et **b** est beaucoup moins anisotrope que les conductivités à $\omega = 0$ correspondantes [91].[1] De plus, la partie la plus importante du poids spectral reste associée à des fréquences assez grandes, loin du pic de Drude, et pour $\omega > t_b$, $\sigma(\omega)$ suit même une loi de puissance typique d'un liquide de Luttinger [171, 188]. Ce résultat s'explique par le fait que les excitations à des énergies $\omega \gg t_b$ ont un temps de de vie trop court pour "voir" la possibilité de sauter à une autre chaîne. Même pour des *températures* largement inférieures à t_b, il suffit donc de se placer à des énergies ω élevées pour retrouver la physique unidimensionnelle. De plus, le régime tridimensionnel peut contenir des "souvenirs" du caractère quasi-unidimensionnel du matériau. Par exemple, nous allons voir dans la suite de cette thèse que les interactions effectives entre porteurs dans les sels de Bechgaard sont fortement renormalisées par des fluctuations unidimensionnelles de haute énergie (section 4.1.5), ce qui peut expliquer pourquoi les températures critiques des transitions vers des états ordonnés (voir la section 2.2) sont si basses dans ces matériaux.

[1] Cette expérience ne descend pas jusqu'à des températures inférieures à t_c, mais déjà à $T = 10\text{K} \sim t_c$, ce résultat est tout à fait significatif.

Régime intermédiaire

Nous avons donc vu que, pour $T > t_b$, la physique des sels de Bechgaard rappelle le liquide de Luttinger (plus exactement, en fait, le comportement d'un grand nombre de liquides de Luttinger couplés), tandis que pour $T < t_c$, on retrouve des propriétés d'un liquide de Fermi anisotrope. Avant de discuter le régime intermédiaire, $t_c < T < t_b$, tournons notre attention vers le concept de mouvement *cohérent* des porteurs. Le temps moyen qu'un électron ou un trou passe dans un plan **ab** avant de sauter dans un plan voisin est $\tau_c \sim 1/t_c$. La cohérence entre plusieurs porteurs est thermiquement restreinte à des échelles de temps $\tau_T \sim 1/T$. Si $T > t_c$, *toute propriété physique basée sur le mouvement cohérent* des porteurs est donc *thermiquement confinée* aux plans **ab**. Ceci sera notamment le cas pour l'existence de quasi-particules, ingrédient fondamental de la théorie de Landau du liquide de Fermi. Dans le régime $t_c < T (< t_b)$, on ne peut donc avoir de quasi-particules que dans les plans **ab**. Au mieux, il s'agirait donc de liquides de Fermi bidimensionnels couplés entre-eux. Ceci dit, dans les expériences de spectroscopie d'émission photo-électrique, aucune trace de quasi-particule n'a été trouvée pour des températures $T \geq 50$K [46, 205]. D'autre part, la résistivité longitudinale ρ_a suit bien une loi quadratique en température [138], comme il le faudrait pour un liquide de Fermi. Que les expériences d'effet Hall puissent s'expliquer à partir de la théorie de Landau ou pas reste sujet de débat [127, 138]. Une alternative serait évidemment d'essayer de décrire ce régime comme des liquides de Luttinger couplés. D'après les expériences ARPES, ceci semble effectivement être possible [205]. Des mesures de transport [139] montrent cependant qu'une telle image échoue en-dessous d'une température $T_m \approx$ 80K. En conclusion, la théorie adaptée à la description de la physique des sels de Bechgaard dans la gamme de températures $t_c < T < t_b$ reste à développer, et, même pour les régimes $T < t_c$ et $T > t_b$, toutes les questions n'ont pas de réponse.

Effets des interactions sur le passage dimensionnel

Le passage dimensionnel dépend aussi des interactions entre porteurs. Dans un système unidimensionnel, la densité d'états au niveau de Fermi est réduite par les interactions. Si le remplissage est commensurable (c'est à dire, la fraction remplie de la bande vaut p/q, p et q étant des nombres entiers petits), il apparaît finalement un gap Δ_ρ dans le spectre d'excitations de charge, on obtient donc un isolant de Mott. Si le saut interchaîne est inférieur au gap de Mott, $t_b < \Delta_\rho$, le mouvement des porteurs d'une chaîne à l'autre devient très improbable. Dans une telle situation, les porteurs sont confinés aux chaînes *par les interactions* [75, 171, 188, 18, 17, 77]. C'est exactement ce qui se passe dans les sels de Fabre à pression ambiante et à haute température (section 2.2.1). La Fig. 2.6 montre cependant que dans ces ma-

tériaux, il y a des transitions de phase à des températures non nulles, ce qui ne serait pas possible dans un système purement unidimensionnel. Nous avons ici affaire à un passage dimensionnel dit "à deux particules". Même si les particules sont énergétiquement confinées à l'intérieur des chaînes, elles peuvent faire des sauts virtuels d'une chaîne à l'autre. Si des fluctuations importantes se développent à l'intérieur des chaînes, elles peuvent se propager en direction transverse par l'intermédiaire de sauts virtuels de plusieurs particules corrélées. Ainsi, ces fluctuations peuvent être stabilisées, et mener à des transitions de phase, sans qu'il y ait eu de déconfinement à une particule.

Dans les sels de Bechgaard, ou dans les sels de Fabre sous pression, la situation est moins extrême. Il n'y a pas un vrai gap, le mouvement d'une chaîne à l'autre reste possible, mais à cause de la réduction de la densité d'états au niveau de Fermi, le saut interchaîne est renormalisé à une valeur effective $t_b^* < t_b$ [33, 28, 190, 30, 197, 22, 169, 76]. Le résultat théorique ne s'accorde pas facilement avec les expériences ; il semble qu'il donne une renormalisation trop importante de t_b [171, 188].

2.2.3 La supraconductivité dans $(TMTSF)_2PF_6$

Dans cette section, nous allons discuter de la supraconductivité dans un sel de Bechgaard exemplaire, l'hexafluorophosphate $(TMTSF)_2PF_6$. La nature du paramètre d'ordre de la phase supraconductrice dans ce matériau n'est pas encore connue. Une forte sensibilité de la supraconductivité par rapport à des impuretés non magnétiques indiquerait un paramètre d'ordre $\Delta_{\mathbf{k}}$ très anisotrope [2, 115, 130]. Les expériences conduites sur $(TMTSF)_2PF_6$ dans ce contexte ne sont pas concluantes. Si on introduit des impuretés par irradiation avec des protons [42] ou avec des rayons X [25], il est probable qu'on crée des impuretés magnétiques [25, 146]. De plus, il se trouve que l'irradiation supprime aussi la phase antiferromagnétique voisine [42, 25, 146]. Comme il est bien possible que les deux phases soient liées (voir la section 2.3.2), on ne sait pas si la supraconductivité est affectée seulement parce que le mécanisme qui pourrait mener à l'appariement est perturbé, ou si c'est l'anisotropie de $\Delta_{\mathbf{k}}$ qui en est à l'origine. L'alliage avec quelques parts par mille de TMTTF [135] pose un problème similaire. Cette fois-ci, la phase antiferromagnétique est renforcée par les impuretés [136, 146]. Il est donc possible que l'introduction de TMTTF nous déplace vers la gauche dans le diagramme de phases Fig. 2.6. Comme le comportement des composés, dans cette partie du diagramme de phases, est lié à une localisation des porteurs, on ne peut pas être sûr que la suppression de la supraconductivité vienne de l'anisotropie du paramètre d'ordre. Il y a des expériences sur le perchlorate qui sont plus convaincantes et qui montrent effectivement que la supraconductivité est très fortement affectée par des impuretés non magnétiques, voir la section 2.4.4. La similarité entre les deux composés laisse supposer qu'aussi

dans l'hexafluorophosphate, le paramètre d'ordre supraconducteur est très anisotrope.

Des champs magnétiques critiques H_{c2} très élevés par rapport à la température critique ont été observés dans $(TMTSF)_2PF_6$[124, 121]. Le fait que le champ critique ne soit pas limité par les courants d'écrantage qu'il est susceptible de créer (la limite orbitale) peut être expliqué par la forme ouverte de la surface de Fermi, qui donne lieu à une unidimensionnalisation induite par le champ [117, 53], ou par l'établissement d'une phase mixte supraconducteur-isolant [122]. L'existence d'un régime de coexistence des phases supraconductrice et onde de densité de spin a en effet été mis en évidence [4, 189]. Le fait que même la limite de Pauli [39, 43] soit franchie indique, soit un état Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov [72, 116], soit une supraconductivité triplet. Les expériences ont cependant toujours été faites dans le régime de coexistence de phases. Il n'est donc pas exclu que le champ passe davantage par les domaines antiferromagnétiques, de sorte que le champ "vu" par la supraconductivité pourrait être plus petit que le champ externe.

Les expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN) sur le temps de relaxation T_1 dans ce matériau n'ont pas encore pu être interprétées [120]. La RMN sur les noyaux ^{77}Se donne un pic de Hebel-Slichter [90] réduit ; si on sonde les protons, aucun pic n'est observé [123, 120]. La suppression du pic de Hebel-Slichter peut avoir plusieurs origines, voir la discussion dans la section 2.4.4. Le déplacement de Knight, et donc la susceptibilité de spin uniforme, n'est pas du tout affecté par la transition supraconductrice [120], résultat qui ne peut s'expliquer que par une supraconductivité triplet.

Très tôt après la découverte de la supraconductivité organique, il a été proposé qu'on avait affaire à un appariement triplet dans les sels de Bechgaard (Abrikosov [1], et Gor'kov et Jérome [79]). Dans le modèle g-ologique des systèmes fermioniques unidimensionnels, on trouve effectivement un régime d'interactions où les fluctuations dominantes sont celles d'un appariement triplet. Stabilisées par les sauts interchaînes, ces fluctuations pourraient donner lieu à une transition supraconductrice. Ce scénario demanderait cependant des interaction relativement particulières (g_2 assez faible devant g_1, où même négatif, voir par exemple [179]), et le domaine unidimensionnel devrait s'étendre jusqu'à des températures très basses, ce qui ne serait pas facile à accorder avec la valeur de t_b, ni avec le fait que la phase antiferromagnétique, ainsi que les phases onde de densité de spin induites par le champ magnétique observées dans ces composés, s'expliquent très bien dans le cadre d'une physique bi- ou tridimensionnelle.

D'un autre côté, l'origine d'un appariement singulet dans les sels de Bechgaard n'est pas non plus évident. L'interaction électrons-phonons présente dans ces matériaux n'est pas suffisamment forte devant la répulsion Coulombienne pour pouvoir induire une interaction nette attractive, voir par exemple les estimations des interactions nues dans [26]. Elle joue bien sûr un rôle clé dans l'établissement de la phase spin-Peierls dans les sels de Fabre,

mais son importance décroît quand la pression augmente ([26] et références y inclues). Au vu de la phase antiferromagnétique voisine de la supraconductivité, un appariement singulet dû aux fluctuations de spin a été proposé [59, 11, 29]. Dans la section suivante, avant de discuter le lien possible entre l'antiferromagnétisme et la supraconductivité singulet (2.3.2), nous allons d'abord examiner la phase onde de densité de spin plus en détail (2.3.1).

2.3 Fluctuations de spin et supraconductivité

2.3.1 Ondes de densité de spin dans un conducteur quasi-unidimensionnel : étude en RPA

La surface de Fermi

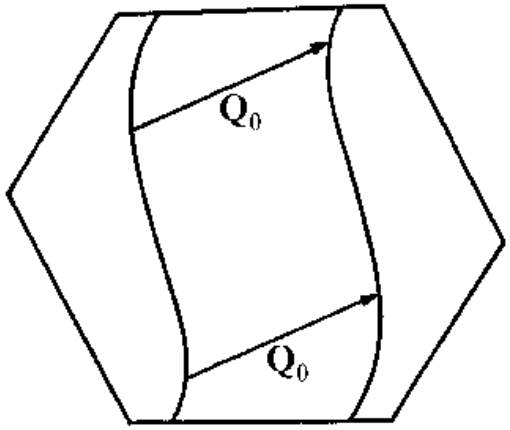


FIG. 2.8 – Première zone de Brillouin et surface de Fermi des sels de Bechgaard (schématiquement) avec vecteur d'emboîtement, de [48].

Dans l'espace réciproque $\mathbf{k}$, l'énergie cinétique des porteurs varie fortement avec $k_{\|}$ et beaucoup moins avec $k_{\perp}$, de sorte que les surfaces d'énergie constante sont presque des plans perpendiculaires à l'axe $k_{\|}$. Ceci est notamment le cas pour la surface de Fermi, qui consiste en deux feuillets et est donc *ouverte*, comme on peut le voir à la Fig. 2.8. Sur la même figure, on remarque une deuxième propriété remarquable de la surface de Fermi des sels de Bechgaard : il y a un vecteur $\mathbf{Q}_0$ qui translate un feuillet presque parfaitement sur l'autre. Cette propriété s'appelle "emboîtement". Elle vient d'une symétrie de la relation de dispersion (2.4). Cette symétrie est exacte

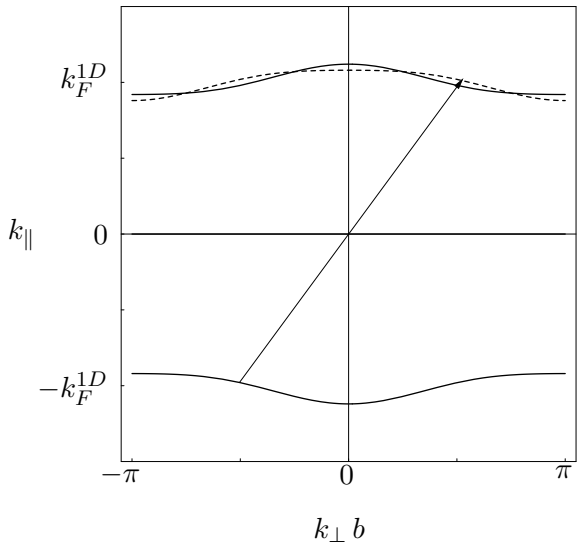


FIG. 2.9 – Le meilleur emboîtement à haute température.

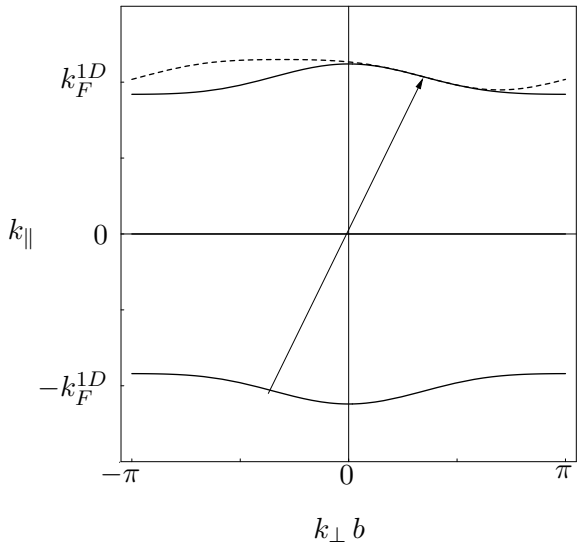


FIG. 2.10 – Le meilleur emboîtement à $T = 0$.

seulement si $t'_\perp = 0$ ("emboîtement parfait"). Dans ce cas,

$$\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0} = -\epsilon_{\mathbf{k}} \text{ , où } \mathbf{Q}_0 = (2k_F^{1D}, \frac{\pi}{b}) \text{ .} \tag{2.8}$$

Grâce à cette symétrie, les corrélations particule-trou avec vecteur d'onde $\mathbf{Q}_0$ sont très importantes et divergent même logarithmiquement si la température tend vers 0. Si on prend en compte les interactions, la divergence peut même se produire à température finie.

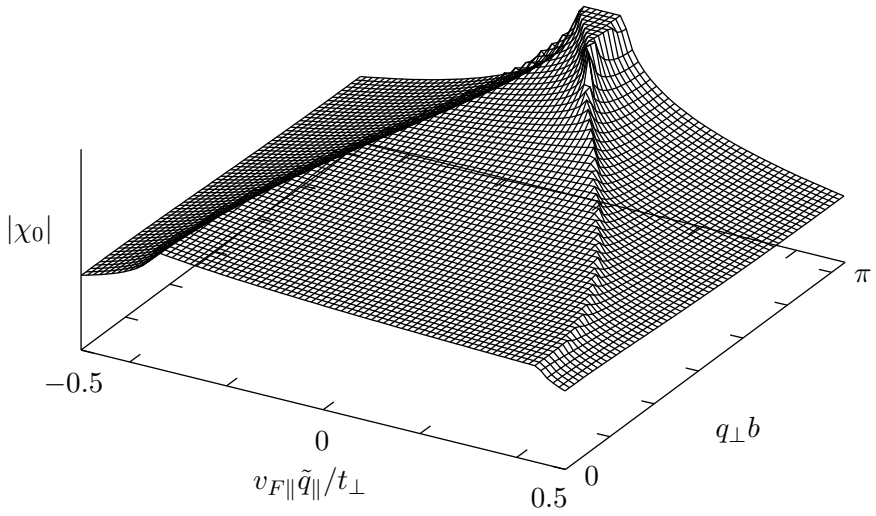


FIG. 2.11 – Susceptibilité de spin libre (en unités arbitraires) en fonction de $\mathbf{q}$ pour $T = 8 \times 10^{-4} \times t_\perp$ et $t'_\perp = 12 \times 10^{-2} \times t_\perp$. La grande valeur de $t'_\perp$ a été choisie afin de bien faire ressortir le plateau qui se développe autour de $\mathbf{Q}_0$.

Susceptibilité libre

Dans cette section, nous utilisons la représentation de Matsubara (la représentation de Heisenberg en temps imaginaire). Les opérateurs $c^{(\dagger)}$, $R^{(\dagger)}$, $L^{(\dagger)}$ acquièrent alors une dépendance en temps imaginaire τ, ou en fréquence ω pour les opérateurs transformés de Fourier. Définissons de plus

$$\mathcal{O}^{(\alpha)}(x) = \sum_{\sigma'\sigma} c^\dagger_{x,\sigma'} \sigma^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma} c_{x,\sigma} \text{ ,}$$

où $x = (\mathbf{x}, \tau)$, $\alpha = C$ (charge) ou $\alpha = S_{x,y,z}$ (spin), $\sigma^{(S_{x,y,z})}$ sont les matrices de Pauli et $\sigma^{(C)}$ la matrice d'identité dans $\mathbb{C}^2$. Après transformation de

Fourier ($\beta = 1/T$),

$$c_{k,\sigma} = \sqrt{T}\int_0^\beta d\tau e^{ik_0\tau}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}}c_{x,\sigma}\,, \tag{2.9}$$

$$\mathcal{O}^{(\alpha)}(q) = T\int_0^\beta d\tau e^{iq_0\tau}\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{x}}\mathcal{O}^{(\alpha)}(x)\,. \tag{2.10}$$

Calculons la fonction de corrélation spin-spin du système sans interactions,

$$\chi_0^{(S-)}(x',x) := \langle \hat{T}_\tau \mathcal{O}(x')\mathcal{O}^\dagger(x)\rangle_0, \tag{2.11}$$

où

$$\mathcal{O}(x) := \frac{1}{2}\mathcal{O}^{(-)}(x) = \frac{1}{2}\big(\mathcal{O}^{(S_x)}(x) - i\mathcal{O}^{(S_y)}(x)\big) = c_\downarrow^\dagger(x)c_\uparrow(x)\ ,$$

$\hat{T}_\tau$ est un opérateur qui ordonne selon le temps imaginaire, et la valeur moyenne est prise par rapport à l'Hamiltonien libre. La transformation de Fourier de χ_0,

$$\chi_0^{(S-)}(q) = T\int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau e^{iq_0(\tau'-\tau)}\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{x}'\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}.(\mathbf{x}'-\mathbf{x})}\chi_0^{(S-)}(x',x)\ , \tag{2.12}$$

donne, à $q_0 = 0$ et dans la limite $T, t_\perp \ll \Lambda_0$,

$$\chi_0^{(S-)}(\mathbf{q};0) = \frac{a}{2\pi v_{F\|}}\Big\{\ln\frac{2\gamma\Lambda_0}{\pi T} + \\ + \Psi\big(\frac{1}{2}\big) - \int_{-\pi/b}^{\pi/b}\frac{dk_\perp}{2\pi/b}\mathrm{Re}\Psi\big[\frac{1}{2} + i\frac{1}{4\pi T}\big(v_{F\|}\tilde{q}_\| + \epsilon_\perp(k_\perp) + \epsilon_\perp(k_\perp + q_\perp)\big)\big]\Big\}\ , \tag{2.13}$$

où $\gamma \approx 1.783$ est l'exponentielle de la constante de Euler et Ψ la fonction Digamma. Pour $t'_\perp = 0$, (2.8) implique

$$\chi_0^{(S-)}(\mathbf{Q}_0;0) = \frac{a}{2\pi v_{F\|}}\ln\frac{2\gamma\Lambda_0}{\pi T}\ .$$

Quand $t'_\perp$ est finie, (2.8) n'est plus satisfaite que d'une façon approximative. L'emboîtement est imparfait. $t'_\perp$ paramétrise donc la qualité de l'emboîtement. Dans ce cas, la divergence logarithmique est coupée, mais la fonction de corrélation autour de $\mathbf{Q}_0$ devient toujours très grande à basse température (voir aussi la Fig. 2.11). Considérons maintenant l'effet des interactions.

Paramétrisation charge-spin de l'interaction

Pour $q_\|$ de l'ordre de $2k_F^{1D}$,

$$o_\alpha(k,q) := \sum_{\sigma'\sigma}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}L^\dagger_{k-q,\sigma'}R_{k,\sigma} \ \text{ et donc}$$
$$\mathcal{O}^{(\alpha)}(q) = \sum_k o_\alpha(k,q)\ ,$$

et l'interaction (2.7) devient

$$\begin{aligned} H_I &= -\frac{1}{2}\sum_{\alpha}\frac{1}{N}\sum_{k'kq} g_\alpha(k', k-q, k'-q, k) o_\alpha^\dagger(k', q) o_\alpha(k, q) \text{ , où} \\ g_C &= -2\ g_1 + g_2 \ , \\ g_S &= g_2 \ , \end{aligned}$$

en gardant toujours le même ordre des arguments $k_j^{(\prime)}$ dans les g_α.

RPA

La façon la plus simple de prendre en compte l'effet des interactions sur χ est l'approximation de la phase aléatoire ("random phase approximation", RPA) dans le canal de Peierls. Elle donne

$$\chi^{(S-)}(\mathbf{q};0) = \frac{\chi_0^{(S-)}(\mathbf{q};0)}{1 - g_S \chi_0^{(S-)}(\mathbf{q};0)} \ .$$

Pour des interactions répulsives, $g_S \equiv g_2 > 0$, la divergence apparaît donc lorsque le critère de Stoner,

$$g_S\ \chi_0^{(S-)}(\mathbf{q};0) = 1 \ ,$$

est satisfait. Pour $t'_\perp = 0$, ceci est le cas pour [132]

$$T = T_c^0 := \frac{2\Lambda_0\gamma}{\pi} e^{-\frac{2}{g_S}} \ .$$

Si nous associons la divergence à une transition de phase, le calcul numérique donne le résultat pour la température de transition montré à la Fig. 2.12. Il se trouve que le vecteur $\mathbf{q}_{opt}$ du meilleur emboîtement, c'est à dire celui qui maximise χ_0, n'est pas toujours $\mathbf{Q}_0$, mais varie avec $t'_\perp$ et avec la température. On peut le calculer analytiquement pour $T = 0$,

$$\begin{aligned} q_{opt,\parallel}(T=0) &= \frac{3t_\perp}{v_{F\parallel}}\varphi \ , \\ q_{opt,\perp}(T=0) &= \frac{2}{b}\arccos\varphi \ , \\ \varphi &= \frac{\sqrt{1+128(t'_\perp/t_\perp)^2}-1}{16t'_\perp/t_\perp} \ , \end{aligned}$$

voir par exemple [132]. Il s'agit de celui qui superpose les points d'inflection des deux nappes de la surface de Fermi (Fig. 2.10). A des températures suffisamment élevées, par exemple $T \sim T_c^0$, le calcul numérique montre que le meilleur emboîtement est toujours obtenu pour $\mathbf{q}_{opt} = \mathbf{Q}_0$ (Fig. 2.9). A de telles températures, le système ne "voit" pas les déviations de l'emboîtement

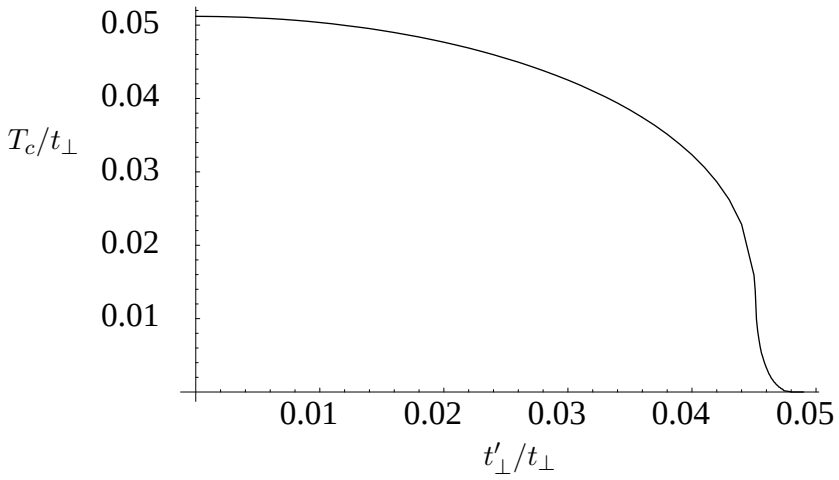


FIG. 2.12 – Température de transition vers la phase onde de densité de spin en fonction de la qualité de l'emboîtement, selon la RPA, pour une interaction $\tilde{g}_S = 0.3445$ (voir la section 2.1.2).

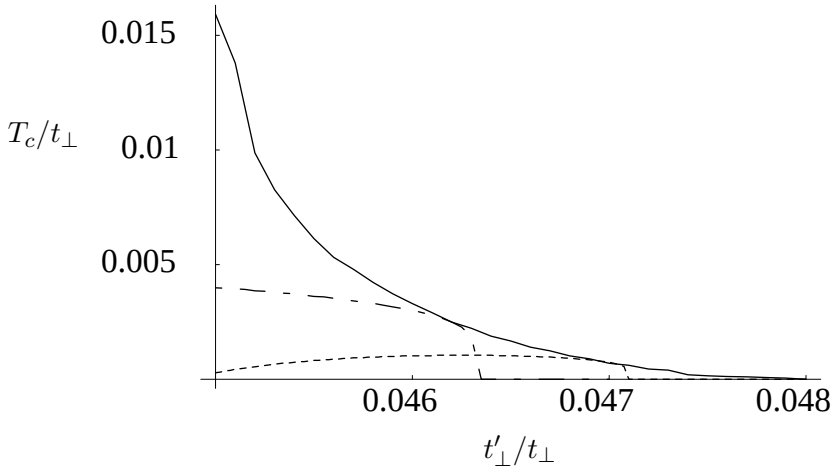


FIG. 2.13 – Températures critiques pour deux ondes de densité de spin avec modulation fixe (lignes pointillées), et celle qu'on obtient en optimisant la modulation

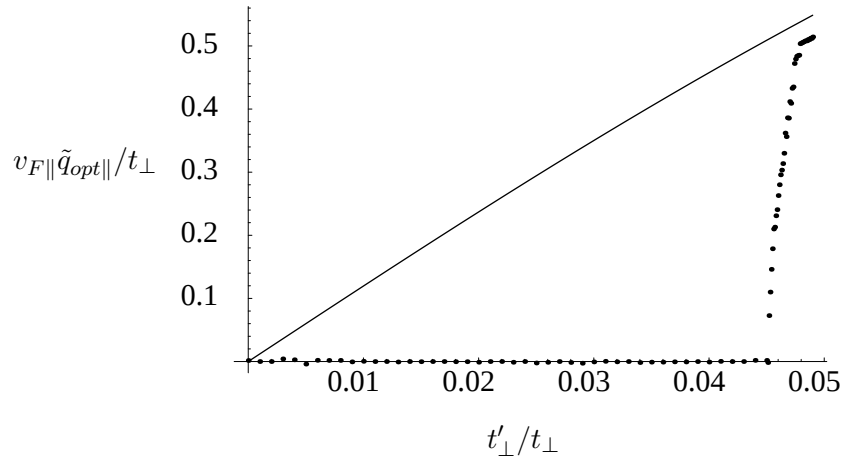


FIG. 2.14 – Composante parallèle aux chaînes du vecteur de meilleur emboîtement à la température critique (Fig. 2.12), en pointillé, et le résultat exact pour $T = 0$. A $T = T_c^0$, le vecteur de meilleur emboîtement est toujours $\mathbf{Q}_0$.

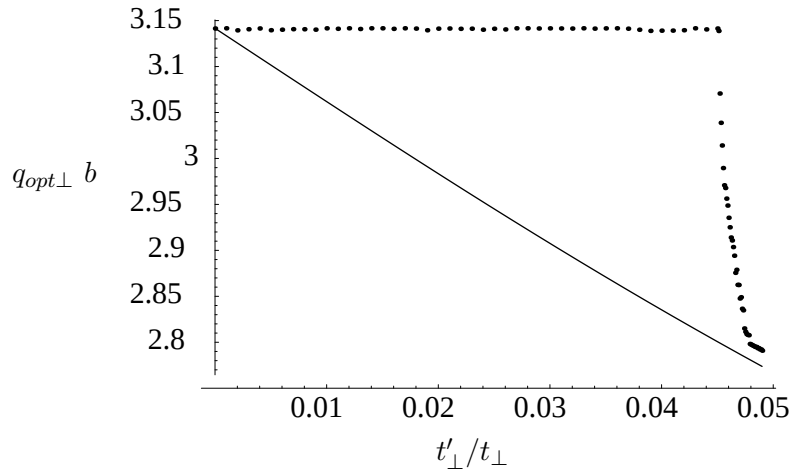


FIG. 2.15 – Comme la Fig. 2.14, mais pour la composante transversale.

parfait. C'est donc seulement dans le régime où les températures de transition sont déjà très basses que le vecteur qui donne la température de transition la plus élevée varie avec $t'_\perp$ (Figs. 2.14 et 2.15). Montambaux [133] a montré, à l'aide de l'équation de Clausius-Clapeyron, que la pente $dT_c/dt'_\perp$ devrait être infinie au point où $T_c \to 0$. Comme le montre la Fig. 2.13, ceci est bien le cas (dans la limite de notre précision numérique) si on se restreint à une sous-phase bien définie, c'est à dire avec un vecteur $\mathbf{q}$ fixé. L'enveloppe des T_c de toutes ces sous-phases s'annule cependant plutôt doucement, en accord avec les résultats de Hasegawa et Fukuyama [87].

2.3.2 Supraconductivité à partir d'interactions répulsives

Dans cette section, nous allons rappeler le lien qui pourrait exister entre fluctuations de spin et supraconductivité dans les sels de Bechgaard, en reprenant des arguments de Emery *et al* [59, 11], Bourbonnais et Caron [29], et Scalapino *et al* [167, 166].

Equation du gap

D'après la théorie de la supraconductivité de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS), le paramètre d'ordre $\Delta_\mathbf{k}$ associé à la transition supraconductrice,

$$\Delta_\mathbf{k} = -\sum_{\mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \ ,$$

doit obéir à l'équation (à $T = 0$)

$$\Delta_\mathbf{k} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\epsilon^2_{\mathbf{k}'} + \Delta^2_{\mathbf{k}'}}} \ . \tag{2.14}$$

Dans cette équation, $\epsilon_\mathbf{k}$ est la dispersion du matériau dans l'état normal, et $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ est une interaction effective de basse énergie qui décrit la diffusion entre électrons de vecteurs d'onde opposés. La somme dans (2.14) est restreinte à la zone de validité de cette interaction, $|\epsilon_\mathbf{k}| < \Lambda_{eff}$. Si l'interaction est à peu près constante, $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \approx W$, l'équation (2.14) ne peut être satisfaite que pour une interaction *attractive*, $W < 0$. Ceci est le cas dans les supraconducteurs conventionnels, grâce au principe de Pauli, qui réduit l'effet de la répulsion de Coulomb, et aux interactions des électrons avec les phonons, qui donnent lieu à une interaction effective attractive entre les électrons. Si $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = const.$, (2.14) implique que $\Delta_\mathbf{k} = const.$ aussi ; en particulier, $\Delta_\mathbf{k}$ a le même signe partout dans ce cas. Si, au contraire, $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ varie fortement avec $\mathbf{k}$, il est possible d'associer le signe "$-$" dans (2.14) avec un changement de signe du paramètre d'ordre, de sorte qu'on peut obtenir une solution non triviale de cette équation, et donc de la supraconductivité, même si $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} > 0$. Il suffit que $W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ soit important pour des valeurs de $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$ tels que $\Delta_\mathbf{k}\Delta_{\mathbf{k}'} < 0$, et

faible sinon. Dans ce cas, l'interaction effective contient des composantes non locales attractives, voir plus bas. Un exemple d'une telle situation pourrait être celui de l'interaction qui résulte des fortes fluctuations de spin présentes dans les sels de Bechgaard, dûes au bon emboîtement, comme nous l'avons vu dans la section 2.3.1.

Paramétrisation singulet-triplet de l'interaction

Afin de pouvoir développer cette idée plus en détail, nous devons d'abord réécrire l'interaction sous une forme qui fait intervenir des paires de porteurs. Définissons pour cela

$$\begin{aligned} o_\alpha(\mathbf{k},\mathbf{q}) &= \sum_{\sigma'\sigma} \tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma} L_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} R_{\mathbf{k},\sigma} \ , \\ \tau^{(s)}_{\sigma'\sigma} &= \sigma\delta_{\sigma',-\sigma} \ , \\ \tau^{(t_x)}_{\sigma'\sigma} &= -\sigma\delta_{\sigma'\sigma} \ , \\ \tau^{(t_y)}_{\sigma'\sigma} &= -i\delta_{\sigma'\sigma} \ , \\ \tau^{(t_z)}_{\sigma'\sigma} &= \delta_{\sigma',-\sigma} \ . \end{aligned}$$

o_α correspond à l'annihilation d'une paire singulet ($\alpha = s$) ou triplet ($\alpha = t_{x,y,z}$). Avec ceci, la partie interactive de l'Hamiltonien s'écrit

$$H_I = -\frac{1}{2}\sum_\alpha \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k'kq}} g_\alpha(\mathbf{k'},\mathbf{q}-\mathbf{k'},\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{k}) o^\dagger_\alpha(\mathbf{k'},\mathbf{q}) o_\alpha(\mathbf{k},\mathbf{q}) \ ,$$

si l'on pose

$$g_s = -g_1 - g_2 = -\frac{1}{2}(3g_S - g_C) \text{ et} \tag{2.15}$$

$$g_t = g_1 - g_2 = -\frac{1}{2}(g_S + g_C) \ . \tag{2.16}$$

Dans nos notations, $W_{\mathbf{k'},\mathbf{k}}$ et $g_{s,t}$ sont de signes opposés. Si $g_{s,t} > 0$ et uniformes en $\mathbf{k}$, l'équation (2.14) n'a donc pas de solution non triviale. En présence de fortes fluctuations de spin pour un certain transfert de vecteur d'onde, les fonctions $g_{s,t}(\mathbf{k})$ peuvent devenir suffisamment modulées pour admettre une solution non nulle de l'équation (2.14) même si les interaction nues $g_{1,2}$ sont répulsives.[2] Pour voir ceci plus explicitement, nous allons maintenant calculer, en RPA, l'interaction effective due aux fluctuations de spin, la réécrire, à l'aide des relations (2.15) et (2.16), comme une interaction entre électrons qui forment des paires de Cooper singulet, et considérer les solutions possibles de l'équation du gap supraconducteur (2.14) à partir de l'interaction ainsi obtenue.

[2]Comme mentionné dans la section 2.2.3, il y a aussi une possibilité d'obtenir une attraction dans le canal de Cooper quand les interactions nues $g_{1,2}$ sont constantes et positives ; il s'agit de $g_2 < g_1/2$. (Si $g_1/2 < g_2 < g_1$, on a $g_t > 0$, mais l'instabilité dominante est l'onde de densité de spin.)

Interaction effective due aux fluctuations de spin, et supraconductivité

L'interaction effective due aux fluctuations de spin se calcule en RPA selon

$$g_S^{RPA}(\mathbf{k}', \mathbf{k}-\mathbf{q}, \mathbf{k}'-\mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{g_{S,0}}{1 - g_{S,0}\chi_0(\mathbf{q})} \ ,$$

où $\chi_0(\mathbf{q})$ est la susceptibilité libre de spin (2.12). Avec $g_{S,0} = g_2$, nous obtenons pour des paires singulet de moment total nul (en utilisant (2.15)) :

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} &= -\frac{1}{2} g_s^{RPA}(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', -\mathbf{k}, \mathbf{k}) \\ &= \frac{3}{4} g_S^{RPA}(\mathbf{k}', -\mathbf{k}', -\mathbf{k}, \mathbf{k}) \\ &= \frac{3}{4} \frac{g_2}{1 - g_2\chi_0(\mathbf{k}'+\mathbf{k})} \ . \end{aligned}$$

Si $g_2\chi_0(\mathbf{q}) < 1$ pour tout $\mathbf{q}$ et à toute température, et qu'il n'y a donc pas d'instabilité de spin, cette interaction peut donner lieu à une transition supraconductrice, parce qu'elle a un pic très prononcé à $\mathbf{k}' + \mathbf{k} = \mathbf{q} \approx \mathbf{Q}_0$. Considérons d'abord l'approximation la plus simple,

$$W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = W\delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{k},\mathbf{Q}_0} \ (W > 0) \tag{2.17}$$

$$= W\delta_{k'_\parallel + k_\parallel, 2k_F^{1D}} \frac{1}{N_\perp} \sum_{n=-N_\perp/2+1}^{N_\perp/2} (-1)^n \cos(k'_\perp + k_\perp)nb \tag{2.18}$$

$$= W\delta_{k'_\parallel + k_\parallel, 2k_F^{1D}} \frac{1}{N_\perp} \sum_{n=-N_\perp/2+1}^{N_\perp/2} (-1)^n \big(\cos k'_\perp nb \cos k_\perp nb - \sin k'_\perp nb \sin k_\perp nb \big) \ .$$

Si on écrit les termes en cosinus avec n pair, ou ceux en sinus avec n impair, dans l'espace direct, on trouve qu'ils correspondent à des interactions attractives entre électrons sur chaînes n-ièmes-voisins. On voit donc comment l'interaction nue répulsive ($g_{1,2} > 0$) peut mener à une attraction effective par l'intermédiaire des fluctuations de spin.

Avec l'approximation (2.17), tout paramètre d'ordre $\Delta_\mathbf{k}$ de valeur absolue constante qui change de signe pour $\mathbf{k} \mapsto \mathbf{Q}_0 - \mathbf{k}$ est solution de l'équation (2.14). Les solutions possibles de (2.14) avec l'interaction (2.17) qui maximisent la température critique sont données par

$$\Delta_{k_\perp} = \begin{cases} \Delta \ \mathrm{sign}\big(\cos lk_\perp b\big) & \text{si } l \text{ impair,} \\ \Delta \ r \ \mathrm{sign}\big(\sin lk_\perp b\big) & \text{si } l \text{ pair,} \end{cases}$$

avec $l \in \mathbb{N}$. (Rappelons que $r = \mathrm{sign}\ k_\parallel$.) On remarque notamment que la température de transition et l'énergie de condensation sont indépendantes

de la fréquence de base $2\pi/lb$ [130]. $\Delta_{\mathbf{k}}$ peut donc changer de signe arbitrairement souvent sur la surface de Fermi sans que ces deux grandeurs en soient affectées. Ceci vient cependant du fait que l'interaction δ est de portée infinie dans l'espace direct. Une interaction induite par les fluctuations de spin, de la forme

$$W_{\mathbf{k'k}} = Wf(k'_{\|}+k_{\|})\frac{1}{N_{\perp}}\sum_{n=-N_{\perp}/2+1}^{N_{\perp}/2}(-1)^n\alpha_n\cos(k'_{\perp}+k_{\perp})nb \quad (2.19)$$

$$= Wf(k'_{\|}+k_{\|})\frac{1}{N_{\perp}}\sum_{n=-N_{\perp}/2+1}^{N_{\perp}/2}(-1)^n\alpha_n\times \quad (2.20)$$
$$\times(\cos k'_{\perp}nb\cos k_{\perp}nb - \sin k'_{\perp}nb\sin k_{\perp}nb)\ ,$$

où f a un pic prononcé autour de $2k_F^{1D}$ et est négligeable sinon, $\alpha_{-n}=\alpha_n>0$, et où α_n décroît quand $|n|$ augmente, paraît déjà plus proche de la réalité. La température critique maximale sera en général celle qui correspond au plus grand $|\alpha_n|$, donc à $n=1$. Ceci mène à un paramètre d'ordre supraconducteur $\Delta_{\mathbf{k}}\propto\cos k_{\perp}b$, que nous appelons "de type d" pour la raison suivante : sur un réseau isotrope, la supraconductivité $d_{x^2-y^2}$ serait décrite par

$$\frac{1}{2}\{\delta_{x_{\|},y_{\|}}(\delta_{x_{\perp},y_{\perp}-b}+\delta_{x_{\perp},y_{\perp}+b})-(\delta_{x_{\|},y_{\|}-a}+\delta_{x_{\|},y_{\|}+a})\delta_{x_{\perp},y_{\perp}}\}\ .$$

Comme nous ne tenons de toute façon pas compte de la dépendance en $k_{\|}$ de l'interaction, nous nous limitons au premier terme, qui, pour un système quasi-unidimensionnel, reproduit bien les propriétés essentielles de cette symétrie, notamment celles concernant le signe du paramètre d'ordre à différents points de la surface de Fermi, voir la Fig. 2.16.

Dans le paragraphe précédent, nous avons uniquement considéré un appariement singulet. Les équations (2.15) et (2.16) montrent que, en absence de fluctuations de charge, l'interaction entre paires singulet est favorisée, par rapport à celle entre paires triplet, d'un facteur 3. Le couplage g_C est en principe susceptible de rétablir un équilibre entre g_s et g_t. Dans le modèle de Hubbard, c'est le contraire, puisque g_C et g_S sont de signes opposés. La renormalisation dans un système purement unidimensionnel mène à un changement de signe de g_C, mais pour une interaction de Hubbard nue répulsive, même dans un système unidimensionnel, on a toujours $g_S > g_C$, de sorte que les fluctuations de spin sont plus fortes que les fluctuations de charge. Cette image peut cependant changer en présence d'interactions de plus longue portée, point auquel nous reviendrons dans la section 4.3.

Paramètres d'ordre dans un supraconducteur quasi-unidimensionnel

Nous allons caractériser les différents paramètres d'ordre supraconducteurs possibles dans des systèmes quasi-unidimensionnels selon leurs changements de signe le long de la surface de Fermi. Comme celle-ci peut être paramétrée en fonction de $(r, k_\perp)$, nous ferons de même pour $\Delta_{\mathbf{k}}$. Une liste de quelques paramètres d'ordre est donnée dans le tableau suivant :

nom	spins	$\Delta_{\mathbf{k}}$
s	singulet	1
$p_\parallel$ $p_\perp$	triplet	r $\sin k_\perp$
d	singulet	$\cos k_\perp b$ ou $r\ \sin k_\perp b$
f	triplet	$r\ \cos k_\perp b$ ou $\sin 2k_\perp b$
g	singulet	$\cos 2k_\perp b$
h	triplet	$r \cos 2k_\perp b$

2.4 Quels peuvent être les effets de l'ordre anionique ?

Dans la famille des sels de Bechgaard $(TMTSF)_2X$, le cas du perchlorate ($X=ClO_4$) représente un cas à part. Les anions ClO_4^- ne sont pas centrosymétriques. Leur orientation mène à un potentiel additionnel qui influence le mouvement des porteurs. Si on refroidi ce matériau suffisamment lentement, les orientations des anions s'ordonnent en-dessous de $T_{AO} = 24K$, voir par exemple la revue de Pouget et Ravy [153]. On parle d'état relaxé. Si on refroidit plus rapidement (on "trempe"), ou au-dessus de T_{AO}, le potentiel dû aux anions est désordonné. La phase ordonnée de basse température dans le perchlorate trempé est une onde de densité de spin, avec une température de transition de l'ordre de 5K ; par contre, le matériau relaxé devient supraconducteur à $T_c \approx 1.2$K. Le potentiel anionique change donc fondamentalement les propriétés électroniques de ce composé.

2.4.1 Le potentiel périodique transversal

L'ordre orientationnel des anions génère un potentiel périodique dans la direction b, de période $2b$,

$$H_{AO} = \sum_{\mathbf{x}=(x_\parallel, lb)} (-1)^l V c^\dagger_{\mathbf{x}} c_{\mathbf{x}} \ . \tag{2.21}$$

L'ordre de grandeur de V reste à ce jour un objet de débat. Intuitivement, on s'attendrait à un gap d'anions $2V$ du même ordre de grandeur que la température à laquelle l'ordre s'établit, $2V \sim T_{AO}$, donc plutôt faible en comparaison avec $t_{a,b}$. D'un autre côté, même si les interactions *entre anions*, qui sont à l'origine de l'établissement de l'ordre anionique, sont probablement de l'ordre de T_{AO}, le potentiel V, qui mesure l'interaction des électrons avec les anions, peut tout à fait être différent de cette énergie [89]. L'argument donné dans [153], qui met en relation la valeur de V et les déviations de l'emboîtement parfait, ne tient pas non plus ; la relation de dispersion (section 5.1) montre que l'emboîtement de la surface de Fermi correspondant au vecteur $\mathbf{Q}_0$ n'est pas affecté par V. Les calculs de structure de bande [149] indiquent au contraire une valeur de V plus forte, de l'ordre de $t_\perp$. Des mesures sous champ magnétique de la forme de la surface de Fermi semblent aussi donner $V \sim 0.8t_\perp$ [199]. Radić *et al* [155, 156, 157] ont résolu exactement le problème à une particule dans $(TMTSF)_2ClO_4$ sous champ magnétique. Leur solution présente des oscillations réminiscentes des "oscillations rapides" observées dans un grand nombre de propriétés thermodynamiques de ces matériaux. Les périodes expérimentales et théoriques s'accordent bien si on suppose à nouveau $V \sim 0.8t_\perp$. Avec la même valeur de V, le diagramme de phases sous champ calculé en RPA [157] coïncide qualitativement avec le diagramme expérimental, mais pas quantitativement. Un meilleur accord quantitatif a été obtenu pour une valeur plutôt faible du potentiel anionique, $V \sim t_\perp/30$, dans une approche perturbative en V, mais en utilisant un critère de Stoner simplifié et des interactions assez fortement renormalisées [83].

Dans les calculs présentés dans la suite, nous allons balayer tout un domaine de valeurs de V. Par l'intermédiaire de la variation du taux de refroidissement ou de la pression [149], on peut accéder expérimentalement à des valeurs différentes de V, mais rappelons que, dans une telle situation, un potentiel désordonné prend la place du potentiel périodique transversal, tandis que les résultats de cette thèse sont restreints au cas sans désordre.

2.4.2 La dimensionnalité

Si $V \gg t_\perp$, le potentiel anionique découple approximativement les chaînes paires ($\epsilon_{AO} > 0$) des chaînes impaires ($\epsilon_{AO} < 0$). On aura donc affaire à deux systèmes de chaînes couplées, mais avec un couplage interchaînes bien plus faible que celui du système sans ordre anionique. Pour des valeurs de V plus modérées, les deux systèmes de chaînes restent couplés, mais la différence de potentiel entre les deux rend les sauts d'une chaîne à l'autre plus difficiles. On peut estimer la température T_{x1} du passage dimensionnel dû au saut interchaînes d'une particule comme suit : la fonction de Green à une particule

du système sans interaction s'écrit, si $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\parallel} + \epsilon_{\perp}$,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \frac{-1}{i\omega_n - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \\ &= \frac{G^{1D}(k_{\parallel}, i\omega_n)}{1 + \epsilon_{\perp} G^{1D}(k_{\parallel}, i\omega_n)} \ , \end{aligned}$$

où $\omega_n = (2n+1)\pi T$ est une fréquence de Matsubara fermionique et μ le potentiel chimique. On ne peut certainement plus négliger le terme en $\epsilon_{\perp}$ au dénominateur dès que

$$\left|\epsilon_{\perp} G_{1D}(k_{\parallel}, i\omega_0)\right| = 1 \ .$$

Dans le cas $V = 0$, on a $\epsilon_{\perp} \sim t_{\perp}$ et

$$T_{x1} \sim \frac{t_{\perp}}{\pi} \ .$$

Pour $V > 0$, introduisons des opérateurs de création et d'annihilation de particule sur les chaînes paires ($c_p^{(\dagger)}$) ou impaires ($c_i^{(\dagger)}$),

$$\begin{aligned} c_{p,\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{P}}) \ , \\ c_{i,\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{P}}) \ , \text{ où} \\ \mathbf{P} &= (0, \frac{\pi}{b}) \ . \end{aligned}$$

Le Hamiltonien libre s'écrit

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \ (c^{\dagger}_{p,\mathbf{k}}, \ \ c^{\dagger}_{i,\mathbf{k}}) \ \begin{pmatrix} \epsilon_{\parallel} + V & \epsilon_{\perp} \\ \epsilon_{\perp} & \epsilon_{\parallel} - V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{p,\mathbf{k}} \\ c_{i,\mathbf{k}} \end{pmatrix} ,$$

et la fonction de Green libre à une particule devient, avec la définition $G^{1D}_{\pm} = G^{1D}|_{\mu=\pm V}$,

$$\begin{aligned} G &= \begin{pmatrix} G^{1D}_{-} & -\epsilon_{\perp} \\ -\epsilon_{\perp} & G^{1D}_{+} \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{1 - \epsilon_{\perp}^2 G^{1D}_{+} G^{1D}_{-}} \begin{pmatrix} G^{1D}_{+} & \epsilon_{\perp}^2 G^{1D}_{+} G^{1D}_{-} \\ \epsilon_{\perp}^2 G^{1D}_{+} G^{1D}_{-} & G^{1D}_{-} \end{pmatrix} \ . \end{aligned}$$

Les termes en $\epsilon_{\perp}$ doivent être pris en compte au plus tard quand

$$\epsilon_{\perp}^2 G^{1D}_{+} G^{1D}_{-} \sim 1 \ .$$

Comme $\left|G^{1D}_{+} G^{1D}_{-}\right| \leq \frac{1}{2\pi V T}$, ceci donne

$$T_{x1} \sim \frac{t_{\perp}^2}{2\pi V} = \frac{t_{\perp}}{2V} T_{x1}\big|_{V=0} \ .$$

Le même résultat peut être obtenu en considérant la variation de la surface de Fermi $k_{F\|}(k_\perp)$ selon $k_\perp$, voir le chapitre 5.

Le potentiel anionique mène alors à un confinement plus fort des électrons à l'intérieur des chaînes. Il y a cependant également la possibilité d'un déconfinement induit par le saut aux chaînes seconds-voisins, $t'_\perp$, qui représente donc une limite inférieure à T_{x^1}.

2.4.3 L'emboîtement et les fluctuations de spin

L'ordre anionique double la maille dans la direction **b** et réduit la première zone de Brillouin d'un facteur 2. Les nombres quantiques **k** et $(\mathbf{k}+\mathbf{P})$ deviennent équivalents. En échange, il y a désormais deux bandes au niveau de Fermi (Fig. 2.16). La Fig. 2.17 montre les nouvelles surfaces de Fermi pour V faible et V fort. Le vecteur de meilleur emboîtement (pour $t'_\perp = 0$ et $V = 0$) devient $\mathbf{Q}_0 \mapsto (2k_F^{1D}, 0)$. Comme on peut le voir sur la Fig. 2.17, ce vecteur superpose des nappes de la surface de Fermi de la bande extérieure sur celles de la bande intérieure, et vice versa. Il s'agit d'un emboîtement *interbandes*. Si $t'_\perp = 0$, cet emboîtement est parfait, *indépendamment de la valeur de* V. La formation des ondes de densité de spin est tout de même affectée par l'ordre anionique, parce que les états propres qui correspondent à ces surfaces parfaitement emboîtées ne sont plus des ondes planes, mais des états dont le recouvrement sur une chaîne donnée devient de moins en moins bon quand V augmente (si les états appartiennent à deux bandes différentes). Comme le paramètre d'ordre associé aux ondes de densité de spin fait intervenir des paires particule-trou sur la même chaîne, $\Delta_{ODS} \propto \langle c_\downarrow^\dagger(x) c_\uparrow(x) \rangle$, ceci supprime l'onde de densité interbandes à V fort. On pourrait cependant imaginer que, dans la limite de V fort, où on a affaire à deux systèmes de chaînes presque découplés entre eux, des fluctuations de spin pourraient se développer indépendamment dans les deux systèmes. Dans cette limite, chaque bande correspond à un système de chaînes, de sorte qu'il s'agirait de corrélations de spin *intrabande*. Le calcul en RPA montre que, pour V suffisamment fort, l'emboîtement intrabande pour des vecteurs de translation $\mathbf{Q}_\pm \sim (2k_F^{1D} \mp 2V/v_{F\|}, \pi/2b)$ (Fig. 2.17) devient effectivement suffisamment bon pour stabiliser une phase onde de densité dont la modulation contient une composante de période doublée dans la direction transversale. (Le groupe de renormalisation montrera cependant que cette phase est plus affectée par les fluctuations unidimensionnelles que l'onde de densité interbandes à faible V, à cause de l'unidimensionnalisation additionnelle venant du fort potentiel anionique.) Finalement, pour des valeurs de V intermédiaires, les deux sortes de fluctuations de spin vont en général coexister. Le diagramme de phases obtenu par la RPA est montré à la Fig. 2.18.

Nous allons discuter des résultats du calcul en RPA plus en détail dans le chapitre 5. Pour l'instant, mentionnons seulement une complication importante de plus. Nous avons constaté plus haut que les nombres quantiques

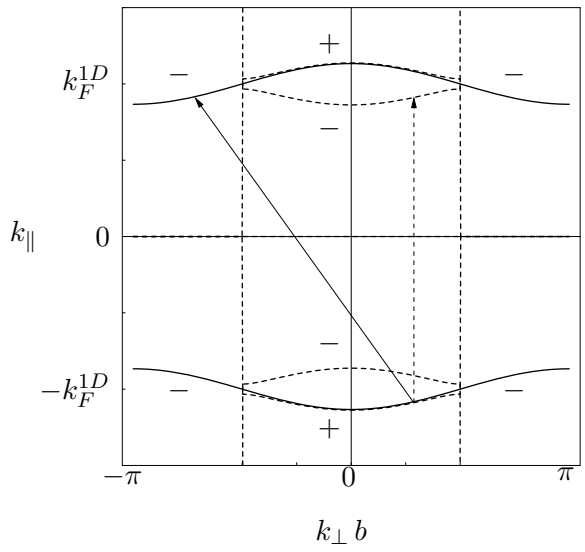


FIG. 2.16 – Zone de Brillouin et surface de Fermi sans ($V = 0$, lignes noires) et avec ($V = 0.5t_\perp$, lignes pointillées) ordre anionique, ainsi que le vecteur $\mathbf{Q}_0 = (2k_F^{1D}, \pi/b) \hat{=} (2k_F^{1D}, 0)$. On voit qu'un gap s'ouvre aux bords de la nouvelle première zone de Brillouin, $\pm\pi/2b$. Les signes indiquent la phase d'un paramètre d'ordre supraconducteur de type "d" à la surface de Fermi.

$\mathbf{k}$ et $(\mathbf{k}+\mathbf{P})$ sont identifiés en présence de l'ordre anionique. Par contre, les ondes planes avec modulation $\mathbf{k}$ et $(\mathbf{k}+\mathbf{P})$ restent bien distinctes. Il se trouve (section 5.1) que les états propres de H_0 couplent les ondes planes $\mathbf{k}$ et $(\mathbf{k}+\mathbf{P})$. Il en résulte que les susceptibilités deviennent non diagonales [202, 173] : un champ de modulation $\mathbf{q}$ peut induire une aimantation de modulation $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$,

$$M_{\mathbf{q}} = \chi(\mathbf{q},\mathbf{q}')h_{\mathbf{q}'} \text{ , où } \mathbf{q}' = \mathbf{q} \text{ ou } \mathbf{q}' = \mathbf{q}+\mathbf{P} \text{ .}$$

Ceci mène à un critère de Stoner généralisé [202, 173]

$$0 = \big(1 - g_S\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q})\big)\big(1 - g_S\chi_0(\mathbf{q}+\mathbf{P},\mathbf{q}+\mathbf{P})\big) - g_S^2\big(\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})\big)^2 \text{ .}$$

Les fluctuations de modulation $\mathbf{q}$ et celles de modulation $\mathbf{q}+\mathbf{P}$ sont alors couplées, et les ondes de densité de spin qu'on trouve en RPA contiennent *deux* composantes de Fourier.

Pour les mêmes raisons, la supraconductivité fait intervenir non seulement des paires de Cooper de vecteur d'onde total $\mathbf{0}$, mais aussi $\mathbf{P}$.

Tournons maintenant notre attention vers la supraconductivité qui est susceptible d'être induite par ces différentes sortes de fluctuations de spin.

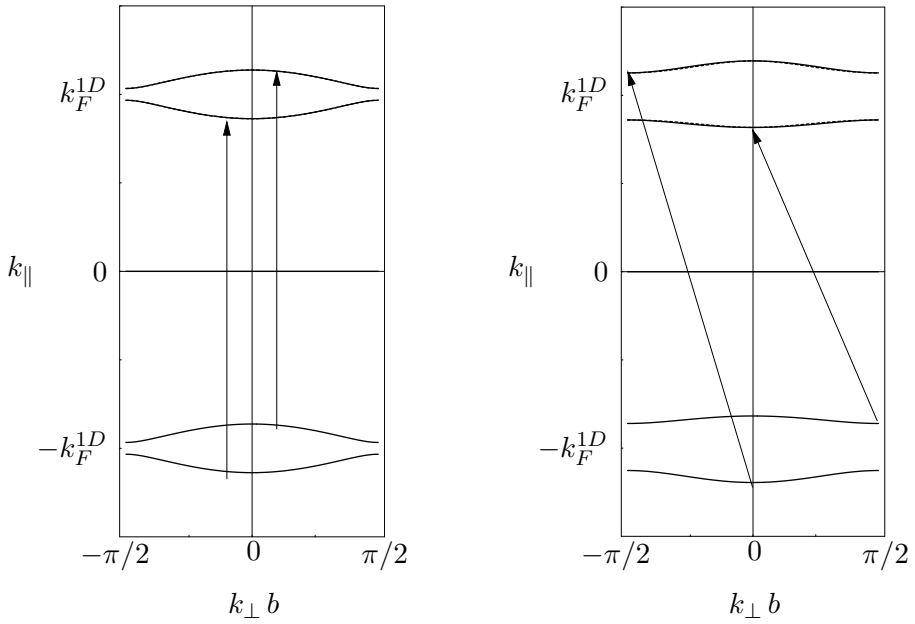


FIG. 2.17 – A gauche : emboîtement interbandes pour un potentiel anionique faible ($V = 0.5t_\perp$, $t'_\perp = 0$). A droite : emboîtement intrabande pour un V fort ($V = 2t_\perp$, $t'_\perp = 4.8 \times 10^{-2} \times t_\perp$). On prend toujours $\Lambda_0 = 15t_\perp$.

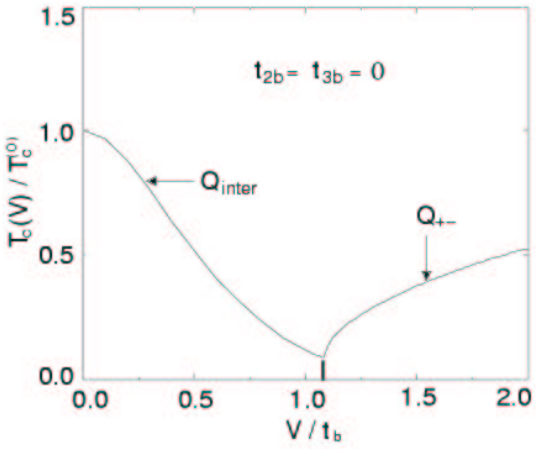


FIG. 2.18 – La température de transition vers la phase onde de densité de spin, selon la RPA, en présence du potentiel anionique, pour un emboîtement interbandes parfait ($t'_\perp = 0$). D'après [173].

2.4.4 La supraconductivité dans $(TMTSF)_2ClO_4$

Comme déjà mentionné, il y a plusieurs expériences sur le perchlorate qui montrent que la supraconductivité dans ce matériau est très fortement affectée par le désordre, qu'il soit introduit par un refroidissement trop rapide [73, 187, 106] ou par alliage avec triméthyl-TTF [105], IO_4^- [81] ou ReO_4^- [12, 186, 106]. Le paramètre d'ordre supraconducteur dans $(TMTSF)_2ClO_4$ doit donc présenter une anisotropie importante [2, 115, 130]. Il y a aussi eu des expériences sur des alliages avec TMTTF [44] et des matériaux irradiés par électrons [165] ou rayons X [81], mais, comme discuté dans la section 2.2.3, ces expériences ne peuvent pas être interprétées d'une façon non ambigüe.

Des champs critiques H_{c2} très élevés par rapport à la température critique ont également été observés dans $(TMTSF)_2ClO_4$ ([79] et références y inclues, [144]). Il est connu que, si on trempe ce matériau, la phase supraconductrice est remplacée par une phase onde de densité de spin. L'antiferromagnétisme n'est donc pas loin, et même l'existence de phases mixtes a été envisagée [73]. Le même argument que dans le cas du $(TMTSF)_2PF_6$ peut donc être invoqué : il est possible que le champ passe davantage par des domaines antiferromagnétiques. Il n'y a pas eu de mesures du déplacement de Knight dans $(TMTSF)_2ClO_4$. La question de savoir si les paires de Cooper sont triplet ou singulet dans ce matériau n'est donc pas encore tranchée.

La forme orbitale du paramètre d'ordre supraconducteur n'est pas non plus connue. Nous avons déjà vu qu'il doit être très anisotrope. Dans des mesures du temps de relaxation T_1 en résonance magnétique nucléaire (RMN) [181] sondant les protons, aucun pic de Hebel-Slichter [90] n'a été observé. Ceci peut avoir de nombreuses origines. Une supraconductivité de type d ou f donnerait un pic très petit [88]. La durée de vie finie des quasi-particules, qui forment les paires de Cooper, peut elle aussi donner lieu à une réduction du pic [184]. La littérature spécialisée sur les cuprates est plus vaste que celle sur les supraconducteurs quasi-unidimensionnels. Dans ce cadre, l'influence de la transition supraconductrice sur les fluctuations de spin, et donc sur les résultats des expériences en RMN, a également été prise en compte, voir par exemple [35, 36, 131, 185, 13].

Takigawa *et al* [182] ont aussi exploré le comportement du temps de relaxation T_1 à des températures plus basses que T_c. Ils trouvent une variation en T^3. Une telle dépendance en loi de puissance pour T tendant vers 0 indiquerait une densité d'états finie même pour des énergies basses et donc l'existence de nœuds dans le gap d'énergie de la phase supraconductrice [130]. Comme les expériences rapportées dans [182] ne descendent pas en-dessous de $T_c/2$, on ne peut cependant pas conclure de cette façon-ci. Belin et Behnia [15] trouvent que la contribution électronique au transport de chaleur dans la phase supraconductrice est largement inférieure à celle dans l'état normal, $\kappa_{sc} \ll \kappa_{normal}$ déjà à $T \sim T_c/3$. Ceci laisse supposer que le gap supraconducteur est fini tout au long de la surface de Fermi, donnant ainsi

lieu à un comportement activé (proportionnel à $\exp(-T/|\Delta|)$) et donc très faible pour des températures basses.

Un paramètre d'ordre qui change de signe en différents endroits à la surface de Fermi sans y avoir de nœuds est tout à fait concevable dans un système quasi-unidimensionnel grâce à la forme ouverte de la surface de Fermi. Il suffit que le changement se fasse au moment où on passe d'un feuillet de cette surface à un autre. L'exemple le plus simple serait une supraconductivité de type $p_{\|}$. Il ne serait par contre pas évident de comprendre l'origine d'une telle symétrie à partir d'interactions répulsives. Une autre possibilité, spécifique au perchlorate car liée à l'ordre anionique et au dédoublement associé de sa bande de conduction, serait une supraconductivité d, dont les nœuds se trouveraient juste à l'endroit où le gap d'anions s'ouvre [32, 177], voir la Fig. 2.16. C'est le scénario que trouve Shimahara [177] dans un calcul similaire à nos considérations exposées dans la section 2.3.2.

En réalité, les choses sont un peu moins simples, à cause justement de l'ordre anionique. L'appariement d, exprimé en fonction des ondes de Bloch du système *avec* ordre anionique, n'a plus la forme d'un simple cosinus, et ceci est vrai pour tous les paramètres d'ordre du tableau donné dans la section 5.3.1. De plus, comme mentionné dans la section précédente, les fluctuations particule-particule de moment total $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{P}$ sont désormais couplées. Finalement, les fluctuations de spin, origine probable de l'appariement, sont déjà plus compliquées que dans le cas à une seule bande. (Dans [177], seules les fluctuations de spin à $\mathbf{Q}_0$, et des paires de Cooper de moment total $\mathbf{0}$ sont prises en compte.) La susceptibilité de spin contient des pics à *plusieurs* vecteurs d'onde, correspondant aux emboîtements interbandes ainsi qu'intrabande. Les fluctuations de spin interbandes sont celles qu'on a déjà dans le système à une bande. Comme nous l'avons vu dans la section 2.3.2, elles donnent alors lieu à un appariement de type d, ou f dans le cas d'une symétrie triplet, c'est à dire à un appariement sur chaînes premiers-voisins. Les fluctuations intrabande, de vecteurs d'onde $q_\perp = \pi/2b$, mènent par contre à un appariement entre électrons sur chaînes *seconds-voisins*, comme on peut bien se l'imaginer en se rappelant que, pour $V \gg t_\perp$, on a affaire à deux réseaux de chaînes intercalés, avec une distance $2b$ entre chaînes du même système. Des paires sur chaînes seconds-voisins correspondraient à un paramètre d'ordre "g", ou "h" dans le cas d'une supraconductivité triplet. Il est alors très probable que la coexistence de plusieurs sortes de fluctuations de spin mène à un paramètre d'ordre supraconducteur qui fasse intervenir les deux composantes de Fourier, $\cos k_\perp b$ (d, f) et $\cos 2k_\perp b$ (g, h). La complexité du problème fait appel à des méthodes de calcul plus contrôlées que celle que nous avons présentée dans la section 2.3.2. Une telle méthode est le groupe de renormalisation.

2.5 Pourquoi la renormalisation ?

Nous avons vu que les sels de Bechgaard sont des matériaux très anisotropes, au point de présenter un grand nombre de caractéristiques connues de la physique unidimensionnelle. Une de ces caractéristiques est l'importance des corrélations, et ceci dans plusieurs "canaux" : dans tout système fermionique avec symétrie par renversement du temps, les corrélations particule-particule ("canal de Cooper") jouent un rôle important à basse température. Ceci est un des ingrédients de base de la transition supraconductrice. Dans les systèmes qui présentent aussi une symétrie d'emboîtement de la surface de Fermi, il y a de plus d'importantes corrélations particule-trou ("canal de Peierls"), qui peuvent mener à des transitions vers des phases de type onde de densité. Finalement, plus un système est unidimensionnel, plus ces différentes sortes de fluctuations sont couplées. Si ce couplage est trop important, il peut mener à la suppression des transitions de phase, comme c'est le cas dans les systèmes unidimensionnels à température finie. D'un autre côté, s'il n'est pas trop fort, mais tout de même présent, il peut induire de transitions de phase additionnelles. Nous en avons discuté un exemple à la section 2.3.2, où des fluctuations particule-trou donnent lieu à des corrélations particule-particule.

Comment ces propriétés se reflètent-elles dans les calculs ? Les symétries $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$ (renversement du temps) et $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ (emboîtement) font que le développement perturbatif selon le terme d'interaction contient des divergences à tous les ordres si la température tend vers 0. S'il n'y avait qu'un seul canal de corrélations divergentes, on pourrait resommer les termes divergents, seuls, à tous les ordres ; c'est la RPA. Si on veut par contre tenir compte du couplage entre les différents canaux de corrélations, il faut resommer une classe encore plus grande de termes de perturbation. Le groupe de renormalisation permet de faire exactement ça.

Il y a bien sûr d'autres approches, notamment des approches non perturbatives, comme par exemple le calcul Monte Carlo quantique. Par rapport à ces méthodes, le groupe de renormalisation a l'avantage d'exiger des ressources de calcul numérique plutôt modestes, et d'être une approche relativement *transparente* au niveau physique : dans plusieurs cas, on arrive encore à retracer les différents mécanismes en œuvre. Nous allons en donner quelques exemples dans le chapitre 4. Mais avant de nous tourner vers l'application de cette méthode aux systèmes quasi-unidimensionnels, discutons-la plus en détail.

Chapitre 3

Le groupe de renormalisation : aspects techniques

Dans ce chapitre, nous allons introduire la méthode et dériver les équations de renormalisation qui seront utilisées dans le reste de la thèse. Après une présentation des idées de base (section 3.1) et la définition des objets formels (section 3.2), la dérivation des équations sera esquissée dans la section 3.3. Différents schémas de renormalisation seront comparés au 3.4. Les implications du changement d'échelle seront discutées dans la section 3.5.

3.1 La méthode

Après quelques notes historiques, nous exposons les idées de base de la renormalisation selon Wilson. Ensuite, nous discutons les problèmes rencontrés quand on applique cette méthode aux systèmes fermioniques de dimension supérieure à un. Ces problèmes nous motivent pour utiliser une méthode légèrement différente, qui sera décrite dans la suite.

3.1.1 Quelques remarques historiques

La technique du groupe de renormalisation a été au départ développée dans le cadre de la théorie quantique des champs par Stückelberg et Petermann [180] et par Gell-Mann et Low [74] afin d'éliminer des divergences qui apparaissent dans certains calculs de perturbation. Wilson [195, 193, 194] a introduit un nouveau concept de renormalisation dans le contexte de la physique des phénomènes critiques, basé sur l'idée de Kadanoff [107] d'établir une théorie effective valable à grandes distances en éliminant successivement les degrés de liberté liés à des distances plus petites. La renormalisation en théorie des champs peut être reformulée dans les termes de l'approche de Wilson, voir par exemple [148].

Appliqué aux systèmes de fermions en interaction, un succès important du groupe de renormalisation a été la solution du problème de Kondo [3, 143, 193, 113]. Les équations pour un système fermionique unidimensionnel se trouvent déjà dans un article de Bychkov *et al* [38], où elles sont dérivées à partir d'une resommation des diagrammes "parquet". La renormalisation a été appliquée au problème fermionique purement unidimensionnel d'une façon exhaustive par Sólyom, voir [179] et références y inclues. Ces travaux ont permis d'identifier le liquide de Luttinger comme un point fixe de renormalisation. Cela est aussi vrai, en dimension supérieure à 1, pour le liquide de Fermi [175, 151, 176, 92, 40, 52, 158, 41, 51, 125]. Ainsi le groupe de renormalisation a permis de justifier certaines hypothèses qui sont à la base de la théorie de Landau de ces liquides. Le groupe de renormalisation a également permis d'établir le diagramme de phases du modèle de Hubbard bidimensionnel à faible interaction. Après plusieurs études restreintes aux environs des singularités de van Hove [56, 168, 118], Zanchi et Schulz [200, 203, 204] ont été les premiers à prendre en compte toute la surface de Fermi, suivis de Halboth *et al* [84] et Honerkamp *et al* [99]. L'essentiel des calculs de renormalisation appliqués aux systèmes fermioniques quasi-unidimensionnels, qui nous intéresseront dans la suite, a été développé par Bourbonnais et Caron [27, 30, 26]. Duprat et Bourbonnais [50] ont étudié en renormalisation ces matériaux dans leur régime bidimensionnel. Pour une approche mathématiquement plus rigoureuse de la renormalisation pour les systèmes fermioniques, voir les travaux de Benfatto et Gallavotti [16] et de Feldman et al [69, 70, 64, 65, 66, 63, 67, 68].

3.1.2 La renormalisation d'après Wilson

Action effective de basse énergie

Rappelons brièvement les idées de base de la renormalisation selon Wilson en regardant l'exemple d'un système de fermions en faible interaction. (Pour plus de détails, consulter l'article de revue de Shankar [176].) La thermodynamique d'un tel système peut être décrite par une fonction de partition Z exprimée sous forme d'une intégrale de chemins sur des variables de Grassmann $\psi_{\mathbf{k}}$ associées aux degrés de liberté $\mathbf{k}$,

$$\begin{aligned} Z &= Tr\left(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\right) \\ &= \int \mathcal{D}\psi e^{-S(\psi)} \ , \end{aligned}$$

où S est l'action du système en question. Dans les applications du groupe de renormalisation aux systèmes fermioniques à N corps, on ordonne d'habitude les différents degrés de liberté selon leur énergie plutôt que selon l'échelle de longueur qui leur est associée. Pour les systèmes bosoniques, les deux reviennent essentiellement au même, vu que les basses énergies sont

normalement attribuées aux grandes longueurs d'onde ($\mathbf{k} \to 0$), tandis que dans le cas des fermions, les basses énergies sont liées aux longueurs d'onde de Fermi ($\mathbf{k} \to \mathbf{k}_F$). Nous pouvons donc trier les degrés de liberté en comparant leurs énergies ($\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F$), ϵ_F étant l'énergie de Fermi du système, à une échelle d'énergie Λ donnée. On définira $\psi_<$ (resp. $\psi_>$) correspondant à un dégré de liberté pour lequel $|\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_F| < \Lambda$ (resp. $> \Lambda$). Ceci nous permet de définir une action effective S_Λ^{eff} à l'échelle Λ par

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\psi_< \int \mathcal{D}\psi_> e^{-S(\psi_<,\psi_>)} \\ &= \int \mathcal{D}\psi_< \, e^{-S_\Lambda^{eff}(\psi_<)} \, . \end{aligned}$$

On obtient alors l'action effective de basse énergie en calculant une trace partielle sur les dégrés de liberté de haute énergie. Cette action effective décrit la même physique de basse énergie que l'action originale, mais en faisant intervenir moins de dégrés de liberté. En échange, ses paramètres, comme par exemple celui qui décrit l'interaction à deux particules, g, ont changé, afin de tenir compte de l'effet des dégrés de liberté qui ne sont plus présents explicitement. Les paramètres dans l'action dépendent donc désormais de l'échelle d'énergie Λ, $g \mapsto g_\Lambda$. Le calcul de la trace partielle est souvent facilité si l'on procède par des pas infinitésimaux en Λ. C'est ainsi qu'on obtient des équations différentielles pour les paramètres dont dépend l'action, les équations de renormalisation.

Points fixes

Un concept très utile dans les études en renormalisation est celui du point fixe. Afin de pouvoir profiter de cette notion, nous devons d'abord assurer la possibilité de comparer deux actions effectives à différentes énergies Λ. Ceci nous obligera à faire un changement d'échelle à chaque pas de renormalisation : l'action effective $S_\Lambda^{eff}(\psi_<)$ ne dépend que des degrés de liberté dont l'énergie est inférieure à Λ. Λ représente alors une coupure ultraviolet, et S_Λ^{eff} décrit un système physique de largeur de bande $\leq 2\Lambda$. Si nous voulons comparer deux actions effectives $S_{\Lambda_1}^{eff}$ et $S_{\Lambda_2}^{eff}$, nous devons donc, soit prendre en compte cette différence en largeur de bande, soit faire un changement d'échelle qui ramène Λ_1 à Λ_2. Dans un grand nombre d'applications, c'est ce deuxième choix que l'on fait, en ramenant Λ à chaque pas de renormalisation à sa taille originale Λ_0. Un pas de renormalisation, une "transformation de renormalisation" consiste donc en l'évaluation d'une trace partielle suivie d'un changement d'échelle. Ainsi, il est en principe possible que l'action après un pas de renormalisation soit exactement la même qu'avant le pas. Si la transformation de renormalisation dépend uniquement de l'action à l'étape précédente, l'action reste invariante. Une telle action s'appelle un point fixe de la transformation de renormalisation. Dans une théorie où les degrés de

liberté sont éliminés selon l'échelle de longueur à laquelle ils correspondent, un point fixe indique alors une invariance d'échelle du système en question. En particulier, ceci implique que les longueurs de corrélation du système ne peuvent pas dépendre de l'échelle de longueur choisie, en d'autres mots, elles doivent être 0 ou ∞, la seconde possibilité étant la signature d'un point critique. La notion de point fixe permet donc d'identifier les points critiques possibles d'un système physique donné. Indépendamment de cet aspect, il y a beaucoup de situations où un grand nombre de systèmes physiques a priori différents évoluent, pendant un enchaînement de transformations de renormalisation, dit "flot" de renormalisation, vers un même point fixe. Ceci est l'origine de l'universalité dans les phénomènes critiques. Pour connaître le comportement physique (à basse énergie, voire à grande distance) de toute cette classe de systèmes, il suffit alors d'étudier le seul point fixe.

Variables pertinentes, marginales et non pertinentes

Une autre notion importante est celle des grandeurs pertinentes, marginales ou non pertinentes. Supposons qu'une certaine variable de l'action diffère légèrement de la valeur qu'elle devrait prendre à un point fixe donné. Si cette déviation est augmentée pendant la renormalisation (de sorte que le flot s'éloigne alors du point fixe), la variable est dite "pertinente au sens du groupe de renormalisation". Si la déviation est renormalisée vers 0, la variable est dite non pertinente. Si la déviation reste inaffectée par les transformations de renormalisation, la variable est marginale. Pour en donner un exemple, considérons des fermions à une dimension. Leur interaction est décrite par une fonction g, qui dépend des vecteurs d'onde k des particules avant et après une collision. Si g est faible devant la largeur de bande, le système – avant renormalisation – se trouve proche du point fixe libre ($g = 0$). On peut déduire des règles de transformation de renormalisation (voir [176]) que la dépendance de g en $|k|$ sera supprimée pendant le flot. Dans cet exemple, cette dépendance est donc non pertinente au sens du groupe de renormalisation.

3.1.3 Problèmes avec des Fermions en dimension supérieure à 1

Contrairement aux bosons, ou aux fermions à une dimension, le problème des fermions en interaction en dimension supérieure à un souffre de complications additionnelles, introduites par le fait que les degrés de liberté de basse énergie ne sont plus limités à quelques points isolés, mais constituent toute une surface de Fermi. Ceci implique que l'interaction à deux particules est décrite par une fonction $g(\mathbf{k})$ dont la dépendance en vecteur d'onde n'est plus forcément non pertinente au sens du groupe de renormalisation. L'action ne contient donc plus seulement un petit nombre de paramètres qui changent

pendant le flot, mais des fonctions entières qui doivent être renormalisées. On parle de renormalisation fonctionelle.

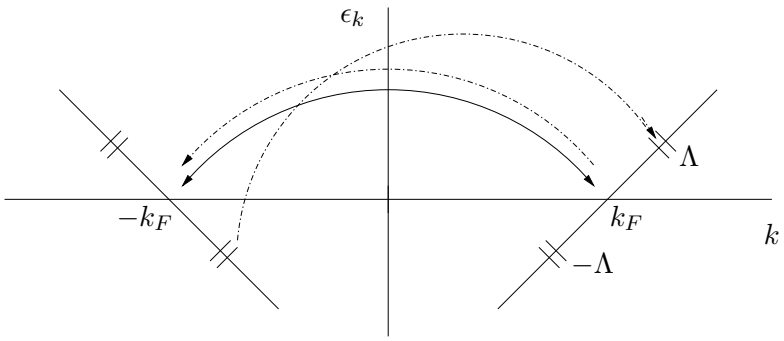


FIG. 3.1 – Renormalisation pour des fermions à une dimension : un processus d'interaction où les particules, aussi bien avant qu'après la collision, ont leur vecteur d'onde sur l'un des deux points de Fermi, $k = \pm k_F$, et un deuxième processus (flèches en pointillé), qui intervient dans la renormalisation du précédent. Les particules qui ne font pas partie du processus à renormaliser se trouvent toutes les deux dans la couche d'énergie Λ.

Un problème encore plus délicat concerne la question du traitement correct des termes qui ne donneraient pas de divergence logarithmique dans un calcul de perturbation, mais des contributions pourtant appréciables, comme par exemple celles dues aux corrélations particule-trou dans un système avec emboîtement *imparfait*. Plus généralement, la question se pose de comment prendre en compte des processus d'interaction où toutes les particules ne se trouvent pas dans des états de basse énergie. A priori, on aurait tendance à dire que de tels processus ne jouent pas de rôle à basse énergie. Le problème est que, même s'ils ne sont pas *présents* dans une action effective de basse énergie S_Λ^{eff}, ces processus entrent dans la renormalisation des processus qui font partie de S_Λ^{eff}. Pour le dire plus naïvement, ils sont présents au second membre des équations de renormalisation. Ces équations ont la forme suivante :

$$\frac{dg(\{\mathbf{k}_j\})}{d(-\ln\Lambda)} = f\Big(g(\{\mathbf{k}_j, \mathbf{k}, \mathbf{k}'\})\Big) \ ,$$

où l'état $\mathbf{k}$ est choisi tel que $|\epsilon_\mathbf{k} - \epsilon_F| = \Lambda$, et où $\mathbf{k}'$ est fixé par la conservation du vecteur d'onde total. L'état $\mathbf{k}'$ peut alors se trouver très loin de la bande d'énergie $\epsilon_\mathbf{k} \in [\epsilon_F - \Lambda, \epsilon_F + \Lambda]$. Dans un calcul de renormalisation selon Wilson, son énergie devrait cependant aussi être égale à Λ. Pour

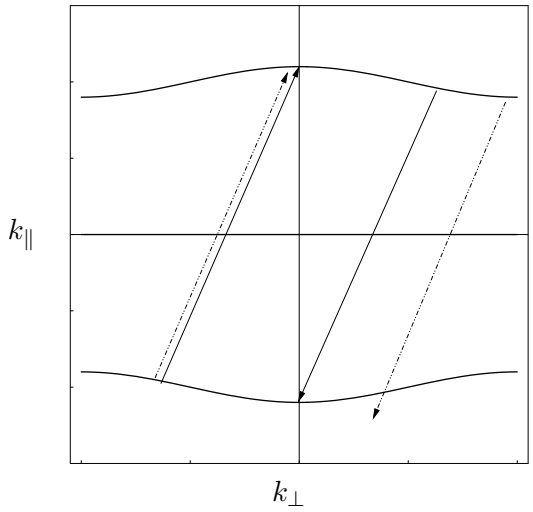


FIG. 3.2 – Renormalisation pour un système bidimensionnel, pour le cas où $\Lambda \to 0$: un processus d'interaction où toutes les particules se trouvent près du niveau de Fermi (flèches noires), et un deuxième processus (flèches pointillés), qui intervient dans la renormalisation du précédent. On voit qu'un des vecteurs d'onde se trouve très loin de la surface de Fermi, et donc loin de la couche d'énergie $|\epsilon_{\mathbf{k}}| \approx \Lambda$.

un système purement unidimensionnel, et pour une renormalisation à une boucle, le problème ne se pose pas. Les interactions qui sont importantes à basse énergie ($\Lambda \to 0$) sont celles avec toutes les particules aux points de Fermi, $\pm k_F$. Les processus qui participent à la renormalisation d'une interaction $g(k_1', k_2', k_2, k_1)$ font intervenir les états k_1', k_2', k_2, k_1, ainsi que des états avec énergie $\pm\Lambda$. Nous devons donc trouver des interactions entre des particules dans les états $\pm k_F$, $\pm k_F + \Lambda/v_F$ et $\pm k_F - \Lambda/v_F$, tout en assurant la conservation du moment total. A une dimension, il est facile de trouver de tels processus, au moins dans la limite de basse énergie, où l'on peut linéariser la relation de dispersion, voir la Fig. 3.1. Considérons maintenant la Fig. 3.2. L'exemple montre que pour une dimension supérieure à un, il n'y a que très peu de processus susceptibles de satisfaire toutes ces conditions à la fois. Seule une fraction très petite de la première zone de Brillouin participe alors à la renormalisation des interactions de basse énergie si l'on prend à la lettre la prescription de renormalisation selon Wilson. Cela donne la renormalisation à l'ordre logarithmique, ou supérieur, appliquée aux systèmes fermioniques par Shankar [176]. Cette méthode est cependant problématique. Elle ne voit pas, par exemple, les effets de la quasi-unidimensionnalité, ni d'un emboîtement imparfait, voir la section 4.1.6.

Il est possible d'inclure des processus d'énergies supérieures à la coupure Λ dans un calcul de renormalisation à la Wilson [51, 203], en tenant compte de processus à trois particules, qui sont générés pendant le flot de renormalisation, mais les équations de renormalisation qui en résultent sont non locales par rapport à l'échelle d'énergie Λ : l'évolution du flot de renormalisation ne dépend plus seulement de l'action effective à l'étape Λ, mais aussi de son histoire. Mis à part le fait que la résolution de ces équations est fortement compliquée par cette non-localité, il en résulte aussi que l'existence d'un point fixe commun à une grande classe de systèmes physiques devient bien moins probable. Dans la littérature, la plupart des schémas de renormalisation sont appelés "wilsoniens". Quand, dans ce mémoire, nous parlons de la renormalisation "selon Wilson", il s'agit du schéma non local.

C. Bourbonnais et collaborateurs ont développé une méthode de renormalisation qui contourne le problème discuté plus haut, de la façon suivante : Ils fixent les énergies de seulement trois des quatre états d'un processus qui intervient dans la renormalisation d'un autre, et laissent la quatrième énergie complètement libre. Ceci fait qu'on intègre parfois des états de basse énergie, qui devraient encore faire partie de l'action effective, point qui n'est pas évident à accorder avec la philosophie de Wilson. Nous verrons dans la section 4.1.5 que ceci peut mener à des résultats peu physiques.

Nous allons décrire dans les sections qui suivent, et utiliser dans le reste de cette thèse, une autre méthode de renormalisation, pas strictement wilsonienne, qui permet de prendre en compte toutes les contributions, qu'elles soient logarithmiques ou non, d'une façon assez mécanique, tout en donnant des équations locales en Λ. En échange, nous perdrons la notion de point fixe, ce qui ne constitue pas une perte importante dans notre cas, où les points fixes vers lesquels le flot se dirige ne seraient de toute façon pas faciles à caractériser. Un autre avantage de cette nouvelle méthode consiste dans le fait qu'on n'a pas besoin de faire de changement d'échelle. Comme un tel changement devrait réduire la première zone de Brillouin non pas vers l'origine, comme dans les problèmes bosoniques, mais vers la surface de Fermi, il mènerait en général à une distortion de l'espace réciproque, ce qui rendrait la description de la conservation du vecteur d'onde total lors d'une collision assez compliquée. D'un autre côté, le changement d'échelle permettrait de distinguer d'une manière très simple les variables pertinentes, marginales et non pertinentes. Mais il y a une possibilité de retrouver l'argument correspondant, du moins dans certains cas, même si on ne fait pas de changement d'échelle [112]. Nous allons revenir sur ce point à la section 3.5.

3.1.4 Renormalisation avec coupure infrarouge

Le schéma de renormalisation que nous allons utiliser dans la suite a été développé par Honerkamp *et al* [93, 99], en s'appuyant sur les travaux de Polchinski [150], Keller *et al* [110], Bonini *et al* [23], Morris [134], Wetterich

et al [191, 183] et Salmhofer [161, 162, 163, 164]. La motivation de ce schéma est bien sûr similaire à celle de la renormalisation selon Wilson. On cherche à calculer des grandeurs physiques par petits pas. L'intérêt est de couper en plusieurs parties un calcul qui mettrait en relation un grand nombre de degrés de liberté à la fois, en commençant avec très peu de degrés de liberté et en y ajoutant quelques-uns à chaque étape. Dans les systèmes fermioniques, on a souvent affaire à des divergences à basse énergie. On va donc commencer le calcul avec les degrés de liberté de haute énergie et puis s'approcher systématiquement des divergences à basse énergie. Pour mettre ceci en œuvre, on ajoute une coupure *infrarouge* Λ_{IR} à l'action, que l'on réduit pas à pas. Une telle coupure peut être réalisée en remplaçant le propagateur libre C par [86, 93, 19] :

$$\begin{aligned} C_{\mathbf{k}}(\Lambda) &= C_{\mathbf{k}} \cdot \Theta_\delta(|\epsilon_{\mathbf{k}}| - \Lambda) \text{ , où} \\ \Theta_\delta(x) &= \begin{cases} 1 & \text{si } x > \delta \text{ ,} \\ 0 & \text{si } x < -\delta \text{ .} \end{cases} \end{aligned} \tag{3.1}$$

Théoriquement, on devrait utiliser une fonction lisse comme coupure ; en pratique, on prend la limite $\delta \to 0$, ce qui ramène Θ_δ à une simple fonction de Heaviside (voir aussi [98]). Dans tout diagramme perturbatif, on supprime ainsi les lignes de propagation qui correspondent aux basses énergies. On a alors affaire à un système physique qui ne contient que des états de *haute* énergie. Si l'on baisse la coupure infrarouge Λ, on récupère de plus en plus de degrés de liberté, pour arriver au vrai système physique quand $\Lambda \to 0$.

Faisons la comparaison avec l'approche selon Wilson. Dans la renormalisation wilsonienne, donc avec coupure ultraviolet, l'action change pendant le flot de renormalisation, mais elle décrit le même système physique à chaque étape. Les paramètres de l'action, comme, par exemple, la fonction d'interaction g, évoluent, mais si l'on calculait une fonction de corrélation, on obtiendrait toujours le même résultat. Dans la renormalisation avec coupure infrarouge, le seul paramètre de l'action qui change est la coupure Λ (qui fait partie de l'action libre S_0 parce que S_0 contient le propagateur libre, voir la section 3.2.2). Sinon, les paramètres de l'action ne sont pas affectés par le flot. Par contre, le système physique décrit par cette action change pendant la renormalisation, et avec lui les fonctions de Green, les vertex, toutes les fonctions de corrélation. $S_{\Lambda_{IR}}$ ne décrit donc le système physique en question que dans la limite $\Lambda_{IR} \to 0$.

Dans ce nouveau schéma aussi, on peut définir une action effective de basse énergie avec une coupure ultraviolet et ainsi établir un lien avec l'approche wilsonienne [134], voir la section 3.3.2. Ceci nous permettra notamment de connaître les valeurs de départ des grandeurs que nous cherchons à calculer en renormalisation. De plus, l'action effective de basse énergie peut servir pour le calcul de certaines grandeurs non divergentes dont l'évaluation serait empêchée par une coupure infrarouge, comme la suscepti-

bilité uniforme de spin ou la compressibilité de charge, voir par exemple [200, 86, 93, 19], mais aussi [96] pour une solution alternative.

La coupure infrarouge, équation (3.1), est transmise via l'action libre à la fonction de partition Z et aux fonctions génératrices des fonctions de Green, que l'on obtient en ajoutant des termes de source à l'action (section 3.2.2). Toutes ces fonctions acquièrent alors une dépendance en Λ. Si l'on prend la dérivée par rapport à Λ de la fonction génératrice $\mathcal{G}_c$ des fonctions de Green connectées, on obtient une équation différentielle qui a la même forme qu'une équation trouvée par Polchinski [150] (dans un travail qui s'inscrivait cependant dans le cadre de la renormalisation à la Wilson). Si on développe cette équation en monômes de champs de source ("J" dans les notations de la section 3.2.2) pour obtenir les équations de renormalisation pour les fonctions de Green connectées G^c, on rencontre les mêmes problèmes de non localité en Λ que dans l'approche selon Wilson. Une issue proposée par Salmhofer ([164] et références ci-inclues) consiste à appliquer un ordre de Wick aux monômes de champs de source, et puis à faire un développement de l'équation de Polchinski par rapport aux monômes ainsi ordonnés. La forme "ordonnée Wick" $\Omega(\prod_j J_j)$ d'un monôme $(\prod_j J_j)$ est un polynôme des champs J_j. (Par exemple, s'il n'y a qu'une seule variable, les monômes ordonnés Wick sont les polynomes d'Hermite, à un facteur de normalisation près [164].) Les polynômes ainsi obtenus forment un système complet, et on peut développer $\mathcal{G}_c$ en $\Omega(\prod_j J_j)$ au lieu de $(\prod_j J_j)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_c &\sim \sum_m G^c_m \prod_{j=1}^m J^*_{j'} J_j \\ &\sim \sum_m G^W_m \ \Omega(\prod_{j=1}^m J^*_{j'} J_j) \ . \end{aligned}$$

Les coefficients G^W_m de ce nouveau développement (dont l'interprétation physique est, bien sûr, moins évidente que dans le cas des fonctions de Green) obéissent à des équations différentielles qui sont locales en Λ.[1] Nous allons cependant voir dans la section 3.4 que ce schéma de renormalisation pose aussi des problèmes.

Le schéma de renormalisation utilisé ici est encore différent. Si on fait une transformation de Legendre sur $\mathcal{G}_c$ pour obtenir la fonction génératrice des vertex à une particule irréductibles (section 3.2), les équations de renormalisation pour ces vertex sont aussi locales en Λ [23, 134, 191, 183, 99]. La dérivation de ces équations sera décrite dans la section 3.3. B. Binz [19] les a redérivées à partir d'une sommation "parquet" [38] ; il a aussi montré que la seule différence entre les trois approches ("non locale", "ordre de Wick" et "à une particule irréductible") consiste en des différences de domaines d'in-

[1] Des équations de même structure se trouvent déjà chez Wieczerkowski [192].

tégration des propagateurs internes de ces diagrammes. Nous allons revenir sur les différences entre les divers schémas dans la section 3.3.2.

Le modèle de Hubbard bidimensionnel a été étudié à l'aide de ce schéma par Honerkamp *et al* [93, 99, 94, 96, 97, 100, 98] et Binz *et al* [19, 20, 21], et, dans l'approche avec ordre de Wick, par Halboth et Metzner [86, 84]. Busche *et al* ont réussi à calculer la fonction spectrale à une particule pour un liquide de Luttinger unidimensionnel dans le schéma à une particule irréductible [37].

3.2 Fonctions de Green et vertex à m particules

Nous allons écrire des équations de renormalisation pour les fonctions de vertex Γ_m. Commençons par quelques rappels de quelques définitions et propriétés de ces fonctions. Cette section sert essentiellement à fixer les notations et les conventions de signes. Pour plus de détails et notamment des preuves des résultats évoqués ici, se référer au livre de J. W. Negele et H. Orland [140].

3.2.1 Leur signification physique

Les fonctions de Green G_m sont les valeurs moyennes de produits d'opérateurs $c_K^\dagger$ et c_K respectivement de création et d'annihilation de fermions dans un état K,

$$G_m(K'_1, ..., K'_m; K_m, ..., K_1) = \langle c_{K'_1} ... c_{K'_m} c^\dagger_{K_m} ... c^\dagger_{K_1} \rangle \ .$$

(Plus précisément, le multiplet K est composé de tous les nombres quantiques qui caractérisent un état à une particule, et une fréquence de Matsubara.) Elles décrivent la propagation de m particules injectées dans le système physique en question dans les états K_1, ..., K_m et retirées des états K'_1, ..., K'_m. Si, dans un développement en diagrammes de Feynman de ces fonctions, on ne retient que les diagrammes connectés, on obtient les fonctions de Green connectées G^c_m. Il se trouve que [140]

$$\begin{aligned} G_1(K';K) &= G^c_1(K';K), \\ G_2(1',2';2,1) &= G_1(1';1)G_1(2';2) - G_1(1';2)G_1(2';1) \\ &\quad + G^c_2(1',2';2,1) \ . \end{aligned}$$

Diagrammatiquement, cette dernière équation est représentée dans la Fig. 3.4. La restriction aux diagrammes à une particule irréductibles (1PI) donne enfin les vertex Γ_m si, en plus, on retire les propagateurs externes des diagrammes. Un diagramme est dit 1PI s'il est impossible de le rendre déconnecté en coupant une seule ligne de propagation interne. Pour comprendre

la signification physique de ces fonctions, considérons d'abord le cas $m = 1$. Plutôt que d'étudier Γ_1, on définit d'habitude l'énergie propre

$$\Sigma = \Gamma_1^{(0)} - \Gamma_1 \ , \tag{3.2}$$

où $\Gamma_1^{(0)}$ est le vertex à une particule pour le système sans interactions. Dans des systèmes sans symétrie brisée, on a [140]

$$G_1(K';K) = -\Gamma_1^{-1}(K';K) \tag{3.3}$$

et donc

$$G_1^{-1} = {G_1^{(0)}}^{-1} + \Sigma \ .$$

Ce résultat implique l'équation de Dyson pour le propagateur à une particule,

$$G_1 = G_1^{(0)} - G_1^{(0)}\Sigma G_1^{(0)} + G_1^{(0)}\Sigma G_1^{(0)}\Sigma G_1^{(0)} - ... \ ,$$

voir la Fig. 3.3. On voit donc que l'énergie propre contient toute l'information sur l'effet des interactions sur la propagation d'une particule dans le système physique en question. De la même façon, le vertex Γ_2 décrit l'interaction effective entre deux particules injectées dans le système :

$$\begin{aligned} G_2^c(K_1', K_2'; K_2, K_1) = & \\ -\frac{T}{N} \sum_{L_1' L_2' L_2 L_1} & G_1(K_1'; L_1') G_1(K_2'; L_2') G_1(L_2; K_2) G_1(L_1; K_1) \times \\ & \times \Gamma_2(L_1', L_2'; L_2, L_1) \ . \end{aligned} \tag{3.4}$$

Diagrammatiquement, on a donc la Fig. 3.5. La connaissance du propagateur libre $G_1^{(0)}$, de l'énergie propre Σ et du vertex à deux particules Γ_2 suffit alors pour calculer les fonctions de Green à une et deux particules.

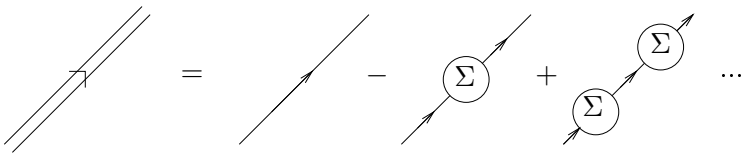


FIG. 3.3 – Relation entre le propagateur complet G_1 (ligne double), le propagateur libre G_1^0 (ligne simple) et l'énergie propre Σ.

3.2.2 Leur calcul à l'aide des intégrales de chemin

Dans le formalisme de l'intégrale de chemins, la fonction de partition est donnée par

$$Z = \int \mathcal{D}[\psi^*, \psi] e^{-S[\psi^*, \psi]} \ ,$$

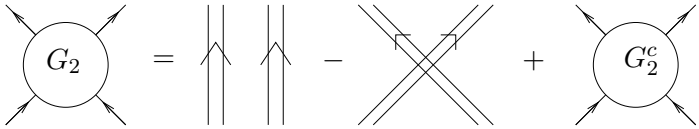


FIG. 3.4 – Relation entre G_2 et G_2^c. Les lignes doubles désignent le propagateur complet G_1.

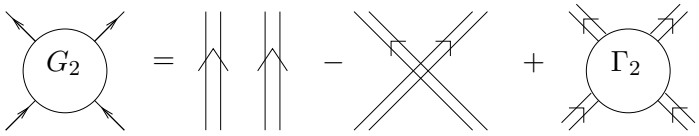


FIG. 3.5 – Relation entre G_2 et Γ_2.

où ψ^* et ψ sont des variables de Grassmann qui correspondent aux opérateurs de création et d'annihilation de fermions. L'action se décompose en

$$S = S_0 + S_I \ ,$$

sa partie libre s'écrit

$$S_0 = \sum_K \psi_K^* C_K^{-1} \psi_K \ .$$

A partir d'ici, K désigne l'ensemble de nombres quantiques qui caractérisent les états propre du Hamiltonien libre H_0 et inclût une fréquence de matsubara. C_K est le propagateur libre,

$$\begin{aligned} C_K &= G_1^{(0)}(K;K) = \frac{-1}{ik_0 - \xi_K} \ , \\ \xi_K &= \epsilon_K - \mu \ , \end{aligned}$$

où ϵ_K est l'énergie propre de l'état K et μ le potentiel chimique. On obtient les autres termes de l'action si on remplace les opérateurs $c_K^\dagger$, c_K par des champs Grassmanniens ψ^*, ψ dans les parties non-libres du Hamiltonien. Pour l'intégrale de chemins, nous utilisons la notation

$$\int \mathcal{D}[\psi^*, \psi] = \prod_K \int d\psi_K^* \int d\psi_K \ .$$

On rappelle que, dû au spin, le nombre d'états est pair, de sorte que l'échange de tous les ψ_K^* et ψ_K ne change pas les signes des expressions dans cette section. Notons par ailleurs que la fonction de partition pour un système sans interactions est tout simplement

$$Z_0 = \int \mathcal{D}[\psi^*, \psi] e^{-S_0} = \det C^{-1} \ .$$

Nous nous plaçons d'abord dans une situation où tous les termes de l'action conservent le nombre de particules. Un cas plus général sera traité dans l'annexe B.1. Dans ce formalisme, les fonctions de Green sont données par

$$\begin{aligned} &G_m(K'_1,...,K'_m;K_m,...,K_1) \\ &\qquad =\frac{1}{Z}\int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]e^{-S[\psi^*,\psi]}\psi_{K'_1}...\psi_{K'_m}\psi^*_{K_m}...\psi^*_{K_1} \\ &\qquad =(-1)^m\prod_{j=1}^{m}\frac{\delta^2}{\delta J^*_{K'_j}\delta J_{K_j}}\mathcal{G}[J^*,J]\Big|_{J^*_K=0=J_K} \ , \end{aligned} \tag{3.5}$$

si on définit la fonction génératrice

$$\mathcal{G}[J^*,J]=\frac{1}{Z}\int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]e^{-S[\psi^*,\psi]-(J^*,\psi)-(\psi^*,J)} \ , \tag{3.6}$$

où nous avons utilisé la notation

$$(J^*,\psi)=\sum_K J^*_K\psi_K \ .$$

En d'autres mots, le développement de $\mathcal{G}$ selon les sources grassmanniennes J^*_K, J_K est donné par

$$\mathcal{G}[J^*,J]=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(m!)^2}\sum_{\substack{K'_1...K'_m\\K_1...K_m}}G_m(K'_1,...,K'_m;K_m,...,K_1)\prod_{j=1}^{m}J^*_{K'_j}J_{K_j} \ .$$

Les mêmes équations tiennent pour les fonctions de Green connectées G^c_m au lieu des G_m si on remplace $\mathcal{G}$ par

$$\mathcal{G}_c[J^*,J]=\ln\mathcal{G}[J^*,J] \ . \tag{3.7}$$

La fonction génératrice pour les vertex est la transformée de Legendre de $\mathcal{G}_c$ par rapport à des champs ϕ^*, ϕ, qui sont définis comme les valeurs moyennes de $c^\dagger_K$, c_K en présence des sources J^*_K, J_K :

$$\begin{aligned} \phi^*_K &:= \langle c^\dagger_K\rangle_J \qquad (3.8)\\ &= \frac{1}{Z_J}\int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]\psi^*_K e^{-S[\psi^*,\psi]-(J^*,\psi)-(\psi^*,J)} \\ &= \frac{\delta}{\delta J_K}\mathcal{G}_c[J^*,J] \ , \\ \phi_K &:= \langle c_K\rangle_J \qquad (3.9)\\ &= \frac{1}{Z_J}\int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]\psi_K e^{-S[\psi^*,\psi]-(J^*,\psi)-(\psi^*,J)} \\ &= -\frac{\delta}{\delta J^*_K}\mathcal{G}_c[J^*,J], \text{ où} \\ Z_J &:= \int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]e^{-S[\psi^*,\psi]-(J^*,\psi)-(\psi^*,J)} = Z\,\mathcal{G}. \end{aligned}$$

La transformation de Legendre s'écrit

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi] = &-\mathcal{G}_c\big[J^*[\phi^*,\phi],J[\phi^*,\phi]\big] \\ &-\big(\phi^*,J[\phi^*,\phi]\big)-\big(J^*[\phi^*,\phi],\phi\big)\ .\end{aligned} \tag{3.10}$$

On a donc, pour les champs de source,

$$J_K^* = \frac{\delta}{\delta\phi_K}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi]\ , \tag{3.11}$$

$$J_K = -\frac{\delta}{\delta\phi_K^*}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi]\ . \tag{3.12}$$

A partir de $\mathcal{G}_\Gamma$, les vertex s'obtiennent par

$$\Gamma_m(K_1',...,K_m';K_m,...,K_1) = \left(\frac{N}{T}\right)^{m-1}\prod_{j=1}^{m}\frac{\delta^2}{\delta\phi^*_{K_j'}\delta\phi_{K_j}}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi]\bigg|_{J_K^*=0=J_K}\ .$$

Définissons

$$\Gamma_{\phi_P^{(*)}\phi_K^{(*)}} := \frac{\delta^2\mathcal{G}_\Gamma}{\delta\phi_P^{(*)}\delta\phi_K^{(*)}}$$

(en gardant les sources $J^{(*)}\neq 0$) et

$$\bar\Gamma_{PK} := \begin{pmatrix}\Gamma_{\phi_P^*\phi_K} & \Gamma_{\phi_P^*\phi_K^*}\\ \Gamma_{\phi_P\phi_K} & \Gamma_{\phi_P\phi_K^*}\end{pmatrix}\ . \tag{3.13}$$

On peut démontrer que [140]

$$\big(\bar\Gamma^{-1}\big)_{KP} = \begin{pmatrix}\frac{\delta^2\mathcal{G}_c}{\delta J_K^*\delta J_P} & -\frac{\delta^2\mathcal{G}_c}{\delta J_K^*\delta J_P^*}\\ -\frac{\delta^2\mathcal{G}_c}{\delta J_K\delta J_P} & \frac{\delta^2\mathcal{G}_c}{\delta J_K\delta J_P^*}\end{pmatrix} \tag{3.14}$$

Dans des systèmes sans symétrie brisée, les fonctions de Green avec des nombres différents de créateurs et d'annihilateurs s'annulent, de sorte que l'on obtient l'équation (3.3).

3.3 Dérivation des équations de renormalisation

La dérivation des équations de renormalisation reproduite ici est tirée de la thèse de C. Honerkamp [93]. On peut démontrer des équations presque identiques à partir d'une sommation des diagrammes "parquet", voir la thèse de B. Binz [19].

Dans cette section, nous allons considérer une action de la forme

$$S(x) = S_0(x) + S_I\ ,$$

qui dépend d'un paramètre x uniquement dans sa partie quadratique, S_0 :

$$S_0(x) = \sum_K \psi_K^* C_K^{-1}(x) \psi_K \ .$$

Dans notre cas, x est une coupure infrarouge Λ, voir l'équation (3.1). Ainsi, Z, $\mathcal{G}$ et toutes les grandeurs calculées à partir de $\mathcal{G}$, acquièrent une dépendance en Λ. Nous allons d'abord écrire une équation de renormalisation pour la fonction génératrice $\mathcal{G}_\Gamma(x)$ et ensuite la développer selon les champs $\phi^{(*)}$ afin d'obtenir les équations correspondantes pour les vertex Γ_m.

3.3.1 L'équation de Polchinski

D'après l'équation (3.10), la dépendance explicite de $\mathcal{G}_\Gamma$ en x vient d'une part de la dépendance explicite de $\mathcal{G}_c$ en x, d'autre part de la dépendance en x des $J_K^{(*)}[\phi^*, \phi; x]$, qui s'obtiennent par inversion des équations (3.8) et (3.9) pour $\phi_K^{(*)}[J^*, J; x]$. On trouve

$$\frac{d}{dx}\mathcal{G}_c\big[J^*[\phi^*,\phi;x], J[\phi^*,\phi;x]; x\big] = \frac{\partial}{\partial x}\mathcal{G}_c - \big(\phi^*, \frac{dJ}{dx}\big) - \big(\frac{dJ^*}{dx}, \phi\big)$$

et donc

$$\frac{d}{dx}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi;x] = -\frac{\partial}{\partial x}\mathcal{G}_c\big[J^*[\phi^*,\phi;x], J[\phi^*,\phi;x]; x\big] \ . \tag{3.15}$$

$\mathcal{G}_c$ obéit à l'équation de Polchinski (cf. l'annexe B.2) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\mathcal{G}_c[J^*, J; x] = &\sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx} G_1(K;K) \\ &- \big(\frac{\delta \mathcal{G}_c}{\delta J}, \frac{dC^{-1}}{dx}\frac{\delta \mathcal{G}_c}{\delta J^*}\big) \\ &- \big(\frac{\delta}{\delta J}, \frac{dC^{-1}}{dx}\frac{\delta}{\delta J^*}\big)\mathcal{G}_c \ .\end{aligned} \tag{3.16}$$

Avec (3.15) et (3.14), ceci implique pour $\mathcal{G}_\Gamma$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi;x] = &-\sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx} G_1(K;K) \\ &- \sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx}\phi_K^*\phi_K \\ &+ \sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx} \ \cdot \ \big(\bar{\Gamma}^{-1}\big)_{22;KK} \ .\end{aligned} \tag{3.17}$$

3.3.2 La renormalisation à une boucle

L'équation (3.17) est exacte. Afin d'obtenir les équations de renormalisation pour les vertex Γ_m, nous allons maintenant la développer selon ϕ^* et ϕ, en faisant l'approximation de négliger tous les vertex à plus de deux particules,

$$\Gamma_{m>2} := 0 \ .$$

Dans ce schéma, ceci revient à prendre en compte la renormalisation des vertex à une et deux particules à une boucle seulement, voir l'annexe B.3.1. Nous ne tiendrons donc pas entièrement compte des processus à trois, ou plus, particules, ni de leur effet sur les interactions à deux particules. Au départ, dans l'interaction nue, ces processus ne sont pas présents, mais ils seront en général générés par les interactions à deux particules. Il est cependant probable qu'ils resteront faibles si les interactions qui sont à leur origine le restent elle-mêmes. Mais il n'est bien sûr pas garanti que ces processus ne jouent pas de rôle important et ne mériteraient pas de traitement plus complet.

Le calcul se trouve dans l'annexe B.3. Les résultats pour la renormalisation à une boucle de l'énergie propre et du vertex à deux particules sont :

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dx}\Sigma(1';1) = \sum_K G_S(K)\Gamma_2(1',K;1,K) \ , \\
&\frac{d}{dx}\Gamma_2(1',2';2,1) = \mathrm{Cooper}(\mathcal{C}) + \mathrm{Landau}(\mathcal{L}) + \mathrm{Peierls}(\mathcal{P}) \\
&= \sum_{KK'} \big\{ G_S(K)G_1(K';K') + G_S(K')G_1(K;K) \big\} \times \\
&\quad \times \big\{ -\frac{1}{2}\Gamma_2(1',2';K,K')\Gamma_2(K',K;2,1) \\
&\qquad + \Gamma_2(1',K;K',1)\Gamma_2(K',2';2,K) \\
&\qquad - \Gamma_2(1',K;2,K')\Gamma_2(K',2';K,1) \big\} \ ,
\end{aligned} \tag{3.18}$$

où

$$G_S(K) := -G_1(K;K)\frac{dC_K^{-1}}{dx}G_1(K;K) \ .$$

Si on néglige les effets de l'énergie propre, on obtient

$$G_S(K) = \frac{d}{d\Lambda}C_K(\Lambda) \ .$$

Les équations de renormalisation à deux boucles ont été calculées par Busche *et al* [37].

Les équations de renormalisation sont schématisées dans la Fig. 3.6. Elles ont la même structure que celles obtenues dans les schémas de renormalisation selon Wilson, de Bourbonnais *et al*, ou avec ordre de Wick (voir la

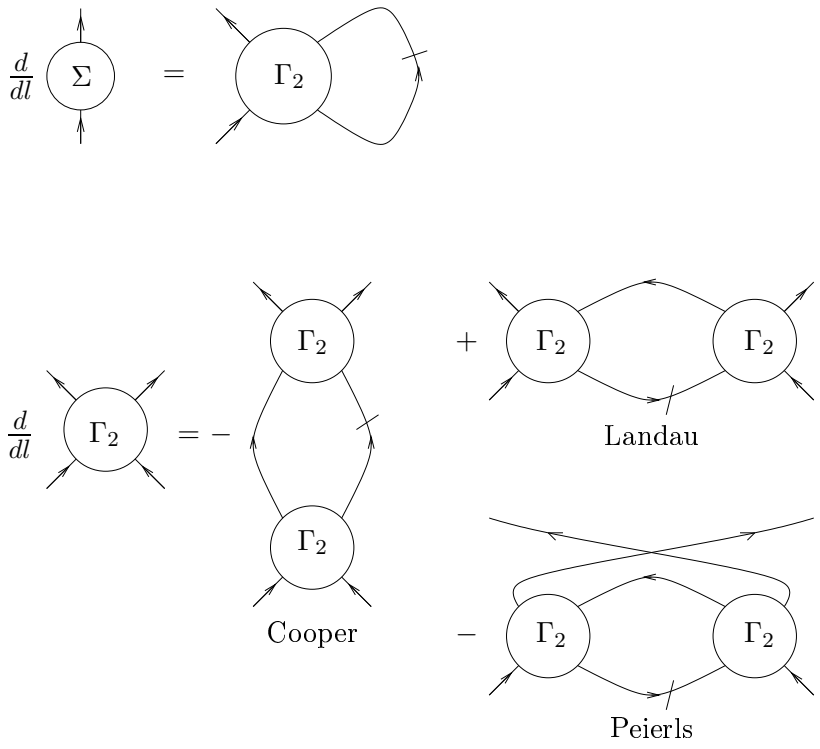


FIG. 3.6 – Renormalisation à une boucle de l'énergie propre Σ et du vertex Γ_2. Le propagateur barré représente G_S.

section 3.1.4), aux différences suivantes près : Dans tous les schémas, un des propagateurs internes correspond à une énergie $|\epsilon_{\mathbf{k}}|$ *sur* la coupure Λ, "G_S" dans notre notation. Dans notre approche et celle selon Wilson, l'énergie $|\epsilon_{\mathbf{k}'}|$ associée à la deuxième ligne interne d'un diagramme doit être supérieure ou égale à Λ. Si on prend Wilson "à la lettre" (approche restreinte à l'ordre logarithmique), la deuxième ligne interne doit *aussi* être sur la coupure. Dans le schéma "ordre de Wick", elle doit être *inférieure* ou égale à Λ, et Bourbonnais la laisse libre. La différence entre le schéma selon Wilson et le nôtre consiste dans le fait que pour Wilson, les vertex Γ_Λ qui interviennent au membre droit de l'équation (3.18) ne sont pas ceux de l'étape actuelle de renormalisation, mais de l'étape où la coupure correspondait à l'énergie de la deuxième ligne interne, $\Lambda' = |\epsilon_{\mathbf{k}'}|$ [200, 51]. Nous allons discuter quelques conséquences de ces différences à la section 3.4.

Pour déterminer les valeurs de départ, nous profitons de l'équivalence suivante entre les vertex en renormalisation et les paramètres de l'action effective de basse énergie [134] : si toutes les énergies associées aux arguments $K_j^{(\prime)}$ du vertex $\Gamma_m(K_1'...K_m';K_m...K_1)$ sont inférieures à la coupure infrarouge Λ, Γ_m est égale à la fonction d'interaction entre m particules g_m^{eff}

qui apparaît dans l'action effective de basse énergie S_Λ^{eff}. Comme au départ, $S_\Lambda^{eff} = S$, les valeurs de départ pour les vertex sont $\Gamma_{2,0} = g$, l'interaction nue. De même, l'énergie propre avant renormalisation est $\Sigma_0 = 0$.

3.3.3 Equations de renormalisation pour des systèmes anisotropes

Comme nous aurons toujours affaire à des systèmes quasi-unidimensionnels, nous allons réécrire les équations de renormalisation sous une forme plus proche des formulations standard de la physique unidimensionnelle.

A partir du vertex Γ, qui apparaît dans l'équation de renormalisation (3.18), on peut définir des fonctions $\Gamma_{1,2}$, $\Gamma_{C,S}$ et $\Gamma_{s,t}$ d'une façon analogue à nos définitions des paramétrisations "g-ologique", charge-spin ou singulet-triplet pour les interactions g, à partir de l'interaction générale w de l'équation (2.6), introduites dans le chapitre 2. (Voir aussi l'annexe A pour une vue d'ensemble.) Rappelons que dans ces paramétrisations, les signes des arguments $k_\parallel$ des vertex Γ_α sont fixés : on a toujours $\Gamma_\alpha(RLLR)$, où $R \Leftrightarrow (k_\parallel > 0)$ et $L \Leftrightarrow (k_\parallel < 0)$.

Les indices K associés aux états qui diagonalisent la partie libre du Hamiltonien sont désormais

$$\begin{aligned} K &= (k, m, \sigma) \text{ , où} \\ k &= (k_0, \mathbf{k}) \text{ ,} \\ \mathbf{k} &= (k_\parallel, k_\perp) \text{ ,} \end{aligned}$$

k_0 est une fréquence de Matsubara fermionique, m un indice de bande, et $\sigma = \pm 1$ la projection du spin selon l'axe z. Nous utilisons une forme sans dimension du vertex,

$$\tilde{\Gamma} = \frac{a}{\pi v_F} \Gamma \text{ .}$$

voir aussi la section 2.1.2.

Dans cette thèse, nous tenons uniquement compte de contributions qui *peuvent* mener à des divergences logarithmiques. Ceci n'est pas le cas pour le canal de Landau, ni pour les processus g_4 de collision de deux particules qui se dirigent dans le même sens le long des chaînes. De plus, nous négligeons les processus Umklapp. Sous ces conditions, on trouve alors les équations

([86] et annexe B.4)

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\alpha((k_1',m_1'),(k_2',m_2'),(k_2,m_2),(k_1,m_1)) = \\
&\frac{T}{N}\sum_{\substack{k_L,k_R\\ m_L,m_R}} D^{pp}((k_L,m_L),(k_R,m_R);k_1+k_2)\times \\
&\qquad\times\sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i((k_1',m_1'),(k_2',m_2'),(k_L,m_L),(k_R,m_R))\times \\
&\qquad\qquad\times\tilde{\Gamma}_j((k_R,m_R),(k_L,m_L),(k_2,m_2),(k_1,m_1)) \\
&+\frac{T}{N}\sum_{\substack{k_L,k_R\\ m_L,m_R}} D^{pt}((k_L,m_L),(k_R,m_R);k_1'-k_2)\times \\
&\qquad\times\sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i((k_1',m_1'),(k_L,m_L),(k_2,m_2),(k_R,m_R))\times \\
&\qquad\qquad\times\tilde{\Gamma}_j((k_R,m_R),(k_2',m_2'),(k_L,m_L),(k_1,m_1))\ ,\ \text{où}
\end{aligned}
\tag{3.19}
$$

$$
\begin{aligned}
D^{pp}((k,m),(k',m');q) &= \frac{\pi v_{F\|}}{a}\delta_{k'+k,q}\times \qquad (3.20)\\
&\quad\times\frac{d}{dl}\left(G^{(0)}_l(k,m)G^{(0)}_l(k',m')\right), \\
D^{pt}((k,m),(k',m');q) &= \frac{\pi v_{F\|}}{a}\delta_{k'-k,q}\times \qquad (3.21)\\
&\quad\times\frac{d}{dl}\left(G^{(0)}_l(k,m)G^{(0)}_l(k',m')\right),
\end{aligned}
$$

et $l=-\ln\Lambda$. On remarque que les D ne contiennent pas de contrainte sur les indices de bande m, m' des lignes internes (comme c'est au contraire le cas en ce qui concerne les k, k') ; les sommes sur ces indices dans (3.19) sont complètement libres. Les indices α, i, j se réfèrent aux spins : Dans le modèle g-ologique, les matrices de coefficients $C^{\mathcal{C},\mathcal{P}}_{\alpha,ij}$ sont données par (dans l'ordre $\left(\begin{smallmatrix}1,1 & 1,2\\ 2,1 & 2,2\end{smallmatrix}\right)$)

$$
\begin{aligned}
C^{\mathcal{C}}_1 &= \begin{pmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, & C^{\mathcal{P}}_1 &= \begin{pmatrix}2 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix}, \qquad (3.22)\\
C^{\mathcal{C}}_2 &= -\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, & C^{\mathcal{P}}_2 &= -\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\ .
\end{aligned}
$$

Pour la renormalisation des couplages charge-spin, on obtient (dans l'ordre

$\left(\begin{smallmatrix} CC & CS \\ SC & SS \end{smallmatrix}\right)$)

$$C_C^{\mathcal{C}} = -\frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & -3 \end{pmatrix}, \qquad C_C^{\mathcal{P}} = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.23}$$
$$C_S^{\mathcal{C}} = -\frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 5 \end{pmatrix}, \qquad C_S^{\mathcal{P}} = -\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

ou pour les couplages singulet-triplet (avec $\left(\begin{smallmatrix} ss & st \\ ts & tt \end{smallmatrix}\right)$) :

$$C_s^{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad C_s^{\mathcal{P}} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & -3 \end{pmatrix}, \tag{3.24}$$
$$C_t^{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad C_t^{\mathcal{P}} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Le canal de Cooper est donc diagonal dans la représentation singulet-triplet, et le canal de Peierls dans l'écriture charge-spin.

3.3.4 Susceptibilités

Pour la dérivation des équations de renormalisation pour les fonctions de réponse, nous suivons essentiellement C. Halboth [86].

Afin d'évaluer la susceptibilité d'un système physique à réagir à un champ externe h (qu'on prendra infinitésimal) qui se couple via un opérateur O, on ajoute un terme

$$S_{ext} = \sum_q h^*(q)O(q) + h.c. \tag{3.25}$$

à l'action. Pour décrire une onde de densité, on prendra les O de la forme

$$\begin{aligned} O_{OD}(q) &= \sum_{K'K} f_{OD}(K', K; q)\psi^*_{K'}\psi_K \quad \text{avec} \\ f_{OD\alpha} &\propto \delta_{k',k-q}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}, \end{aligned} \tag{3.26}$$

où les $\sigma^{(S_{x,y,z})}$ sont les matrices de Pauli, et $\sigma^{(C)}_{\sigma'\sigma} = \delta_{\sigma',\sigma}$, voir aussi la section 2.3.1 et l'annexe A. Pour étudier la supraconductivité, on utilisera des opérateurs d'appariement

$$\begin{aligned} O_{SC}(q) &= \sum_{K'K} f_{SC}(K', K; q)\psi_{K'}\psi_K, \\ f_{SC\alpha} &\propto \delta_{k',-k+q}\tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Les matrices $\tau^{(\alpha)}$ décrivent les orientations de spin des électrons qui constituent la paire ; elles sont définies dans (A.10) (voir aussi la section 2.3.2). On note que la fonction f_{SC} peut être choisie telle qu'elle soit antisymétrique par rapport à l'échange de K' et K.

Les valeurs moyennes sont donc données par

$$\langle O(q)\rangle = \frac{\delta}{\delta h^*(q)}\mathcal{G}_c[h;J^*,J]\Big|_{\substack{h=0\\J^*,J=0}} ,$$

et la susceptibilité correspondante est

$$\begin{aligned}
\chi(q',q) &= \langle O(q')O^*(q)\rangle - \langle O(q')\rangle\langle O^*(q)\rangle && (3.28)\\
&= \frac{\delta^2}{\delta h^*(q')\delta h(q)}\mathcal{G}_c[h;J^*,J]\Big|_{\substack{h=0\\J^*,J=0}} && (3.29)\\
&= \frac{\delta^2}{\delta h^*(q')\delta h(q)}G_0^c\Big|_{h=0} && (3.30)\\
&= -\frac{\delta^2}{\delta h^*(q')\delta h(q)}\Gamma_0\Big|_{h=0} , && (3.31)
\end{aligned}$$

où G_0^c et Γ_0^c sont les parties constantes, par rapport aux champs de source J, de $\mathcal{G}_c$ et $\mathcal{G}_\Gamma$, respectivement.

L'inclusion de S_{ext} dans l'action nous oblige à généraliser les expressions présentées dans la section 3.2.2. Les développements des fonctions génératrices contiennent désormais des contributions qui ont des nombres différents de variables grassmanniennes conjuguées et non conjuguées, voir l'annexe B.1.

Nous allons toujours étudier des fonctions de réponse où les q sont tels que $r = -r'$. Grâce à l'invariance par parité des systèmes étudiés ici, il suffit dans ce cas de considérer les coefficients $f(K',K;q)$ avec $r = +$, $r' = -$. Avec $k_{L\|} < 0$ et $k_{R\|} > 0$, nous définissons $z_{C/S}(k_L,k_R;q)$ à l'aide de l'équation

$$f_{OD\alpha}(K_L,K_R;q) = \delta_{k_L,k_R-q}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma_L\sigma_R}z_\alpha((k_L,m_L),(k_R,m_R);q) \qquad (3.32)$$

et $z_{s/t}(k_L,k_R;q)$ par

$$f_{SC\alpha}(K_L,K_R;q) = \delta_{k_L,-k_R+q}\tau^{(\alpha)}_{\sigma_L\sigma_R}z_\alpha((k_L,m_L),(k_R,m_R);q). \qquad (3.33)$$

Avant renormalisation, les z sont égaux, dans une base d'ondes planes, à un pour les ondes de densité et à des fonctions décrivant la symétrie orbitale des paires d'électrons pour la supraconductivité, voir le tableau dans la section 2.3.2.

Sous les mêmes hypothèses que celles énumérées dans la section 3.3.3, les équations de renormalisation sont (voir l'annexe B.3.2)

– dans le cas des ondes de densité de charge ($\alpha = C$) ou de spin ($\alpha = S$) :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl} z_\alpha((p_L, m'_L), (p_R, m'_R); q) = \\ - \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pt}((k_L, m_L), (k_R, m_R); 2k_F^{1D} + q) \times \\ \times z_\alpha((k_L, m_L), (k_R, m_R); q) \times \\ \times \tilde{\Gamma}_\alpha((k_R, m_R), (p_L, m'_L), (k_L, m_L), (p_R, m'_R))\end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl}\tilde{\chi}_\alpha(q', q) \quad = \quad 2 \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pt}((k_L, m_L), (k_R, m_R); 2k_F^{1D} + q) \times \\ \times z_\alpha((k_L, m_L), (k_R, m_R); q') \times \\ \times z_\alpha((k_L, m_L), (k_R, m_R); q)^*\end{aligned} \tag{3.35}$$

– dans celui de la supraconductivité singulet ($\alpha = s$) ou triplet ($\alpha = t$) :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl} z_\alpha((p_L, m'_L), (p_R, m'_R); q) = \\ \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L, m_L), (k_R, m_R); q) \times \\ \times z_\alpha((k_L, m_L), (k_R, m_R); q) \times \\ \times \tilde{\Gamma}_\alpha((k_R, m_R), (k_L, m_L), (p_L, m'_L), (p_R, m'_R))\end{aligned} \tag{3.36}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl}\tilde{\chi}_\alpha(q', q) \quad = \quad -2 \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L, m_L), (k_R, m_R); q) \times \\ \times z_\alpha((k_L, m_L), (k_R, m_R); q') \times \\ \times z_\alpha((k_L, m_L), (k_R, m_R); q)^*\end{aligned} \tag{3.37}$$

$\tilde{\chi}$ est défini comme

$$\tilde{\chi} = \frac{\pi v_{F\|}}{a} \chi \ . \tag{3.38}$$

Avant renormalisation, $\tilde{\chi}\big|_{l=0} = 0$.

3.4 Comparaison des différents schémas

L'avantage de notre méthode de renormalisation par rapport à celle selon Wilson est que la nôtre est *locale* par rapport au paramètre de flot Λ. Nous

allons maintenant comparer notre schéma de renormalisation ("à une particule irréductible", "1PI") à celui avec ordre de Wick ("Wick"), et celui utilisé par C. Bourbonnais et collaborateurs ("BC"), à l'aide d'un calcul exemplaire simple.

Pour un système de fermions libres, la susceptibilité par rapport aux fluctuations de spin à vecteur d'onde

$$q = 2k_F + \tilde{q}$$

est donnée par

$$\begin{aligned}\chi(q) &= \frac{a}{4\pi v_F}\int_{-\Lambda_0}^{\Lambda_0} d\epsilon_k \frac{n_{FD}(\epsilon_k) - n_{FD}(\epsilon_{k'})}{\epsilon_k - \epsilon_{k'}}\Big|_{k'=k-q} \\ &\approx \frac{a}{2\pi v_F}\left[\ln\frac{2\gamma\Lambda_0}{\pi T} + \Psi(\frac{1}{2}) - \mathrm{Re}\Psi(\frac{1}{2} + i\frac{v_F\tilde{q}}{4\pi T})\right] \text{ si } T,\ |v_F\tilde{q}| \ll \Lambda_0,\end{aligned}$$

où Ψ est la fonction digamma et $\gamma \approx 1.783$ l'exponentielle de la constante d'Euler. Si $\tilde{q} = 0$, $\chi(q)$ diverge logarithmiquement en température. Sur la Fig. 3.7, χ est représentée en fonction de la température pour différentes valeurs de q. Plus q dévie de $2k_F$, plus la susceptibilité est faible. Par contre, les déviations ne se font sentir qu'à basse température. $|\chi(T)|$ atteint même un maximum à une température finie, avant de saturer à une valeur légèrement plus basse lorsque $T < v_F\,|\tilde{q}|\,/4\pi$.

En renormalisation, χ se calcule selon

$$\frac{d\chi}{dl} \propto \sum_{\nu=\pm 1} \frac{n_{FD}(\epsilon_k) - n_{FD}(\epsilon_{k'})}{\epsilon_k - \epsilon_{k'}}\Big|_{\substack{\epsilon_k=\nu\Lambda(l)\\ k'=k-q}} \tag{3.39}$$

$$\Lambda(l) = \Lambda_0 e^{-l}\,, \tag{3.40}$$

voir aussi la Fig. 3.8. L'énergie ϵ_k est placée sur la coupure $\pm\Lambda$. Les valeurs permises pour la deuxième énergie $\epsilon_{k'}$ dépendent du schéma de renormalisation. Dans notre schéma (1PI), elle doit être supérieure à la coupure, $|\epsilon_{k'}| \geq \Lambda(l)$, dans le schéma avec ordre de Wick, $|\epsilon_{k'}| \leq \Lambda(l)$, alors que Bourbonnais la laisse libre. Dans le schéma de Wilson, mais restreint à l'ordre dominant (Shankar [176]), on exige que les *deux* propagateurs soient placés sur la coupure. Ceci donnerait une contribution uniquement pour $q = 2k_F$, ce schéma se restreint aux diagrammes qui donnent une divergence au moins logarithmique (voir aussi la section 4.1.6). On voit déjà que, parmi les trois autres, seul le schéma 1PI limite l'intégration aux degrés de liberté de haute énergie, ce qui est un point important si l'on veut construire une action effective de basse énergie (voir la section 3.1.2).

Les expressions complètes sont (voir les sections précédentes ainsi que

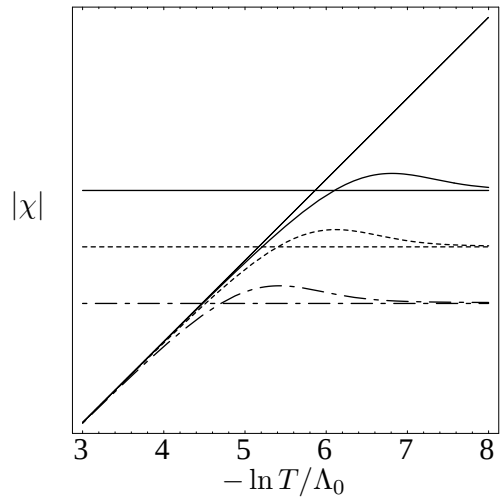


FIG. 3.7 – Susceptibilité de spin (en unités arbitraires) de fermions libres à une dimension en fonction de la température pour, du haut vers le bas, $v_F\tilde{q}/\Lambda_0 = 0,\ 0.005,\ 0.01,\ 0.02$. Les lignes horizontales indiquent la limite $T \to 0$.

l'annexe B.5), en posant

$$
\begin{aligned}
f(A,E) &= \frac{a}{2\pi v_F}\,\frac{E}{2E+A}\,\left(\tanh\frac{E}{2T}+\tanh\frac{E+A}{2T}\right)\\
&\overset{T\to 0}{\to} \frac{a}{\pi v_F}\,\frac{E}{2E+A}\ :\\
\chi_{1PI}(l;q) &= \sum_{\nu=\pm 1}\int_0^{\Lambda(l)} dx\ \Theta\left(\Lambda_0-|\Lambda(x)+\nu v_F\,|\tilde{q}||\right)\times\\
&\qquad\qquad \times\Theta\left(|\Lambda(x)+\nu v_F\,|\tilde{q}||-\Lambda(x)\right)\times\\
&\qquad\qquad \times f(\nu v_F\,|\tilde{q}|\,,\Lambda(x))\ ,\\
\chi_{Wick}(l;q) &= \int_0^{\Lambda(l)} dx\ \Theta\left(\Lambda(x)-v_F\,|\tilde{q}|\right) f(-v_F\,|\tilde{q}|\,,\Lambda(x))\ ,\\
\chi_{BC}(l;q) &= \frac{1}{2}\sum_{\nu=\pm 1}\int_0^{\Lambda(l)} dx\ \Theta\left(\Lambda_0-|\Lambda(x)+\nu v_F\tilde{q}|\right) f(\nu v_F\tilde{q},\Lambda(x))\\
&= \frac{1}{2}\left(\chi_{1PI}(l;q)+\chi_{Wick}(l;q)\right)\ .
\end{aligned}
$$

La première fonction Θ vient du fait que k' doit faire partie de la bande, $k' \in [\pm k_F - \Lambda_0, \pm k_F + \Lambda_0]$. Mis à part cette contrainte de bord de bande, le schéma selon Bourbonnais est le seul à ne pas contenir des expressions en valeur absolue. Les valeurs absolues viennent du fait que nous utilisons

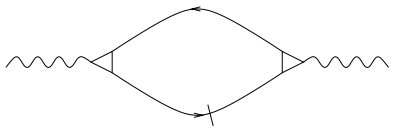


FIG. 3.8 – Calcul de la susceptibilité en renormalisation. Le propagateur barré correspond à une énergie sur la coupure. L'énergie associée à l'autre propagateur dépend du schéma, voir le texte.

une coupure franche $\Theta(\epsilon - \Lambda)$ au lieu d'une coupure lisse. Elles sont à l'origine de singularités dans $d\chi/dq$ à $q = 2k_F$ pour l fini, mais ces singularités disparaissent quand l tend vers l'infini.

On vérifie bien[2] que les trois schémas donnent le même résultat dans la limite $l \to \infty$. Or, dans les calculs présentés dans la suite de cette thèse, le flot de renormalisation diverge avant que cette limite ne soit atteinte. Pour cette raison, il est important dans notre cas de prendre en considération le comportement de χ dans les différents schémas *pendant* le flot. Plus q dévie de $2k_F$, plus le résultat final $\chi(l \to \infty)$ est petit. Il est souhaitable que ceci soit déjà vrai pendant le flot. En particulier, il est important que $|\chi(l;q)| \leq |\chi(l;2k_F)|$ indépendamment de l. Il se trouve que c'est le cas uniquement pour le schéma "1PI", voir la Fig. 3.9. On peut comprendre cet effet comme suit : à basse température, les contributions les plus importantes à la susceptibilité correspondent à sign $\epsilon_{k'} = -$sign ϵ_k. Comme $|\epsilon_k|$ est toujours sur la coupure, $|\epsilon_k| = \Lambda$, le dénominateur dans (3.39) est donc maximal si $|\epsilon_{k'}|$ l'est. On en conclut que, plus q dévie de $2k_F$, plus $|d\chi_{1PI}/dl|$ est faible, tandis que le contraire est vrai pour $|d\chi_{Wick}/dl|$. Seul le schéma 1PI garde donc le bon ordre des $\chi(q)$ pendant tout le flot de renormalisation. Pendant la première partie du flot, le schéma "Wick" inverse cet ordre. Le schéma de Bourbonnais revient à prendre la moyenne des deux autres. Dans ce schéma, pendant la première partie du flot, les susceptibilités pour différentes valeurs de q ne sont distinguées que faiblement, et ceci dans l'ordre inverse, comme dans le cas de l'ordre de Wick. Nous allons retrouver ce point dans la section

[2] en notant que

$$\begin{aligned}
\chi_{1PI}(l;q) &= \int_{\Lambda(l)}^{\Lambda_0 - v_F|\tilde{q}|} \frac{dE}{E} f(v_F|\tilde{q}|, E) \\
&\quad + \Theta\left(v_F|\tilde{q}|/2 - \Lambda(l)\right) \int_{\Lambda(l)}^{v_F|\tilde{q}|/2} \frac{dE}{E} f(-v_F|\tilde{q}|, E) \text{ et} \\
\chi_{Wick}(l;q) &= \int_{\mathrm{Max}\{v_F|\tilde{q}|/2, \Lambda(l)\}}^{\Lambda_0} \frac{dE}{E} f(-v_F|\tilde{q}|, E)
\end{aligned}$$

4.1.5, en liaison avec l'effet du saut interchaînes $t_\perp$.

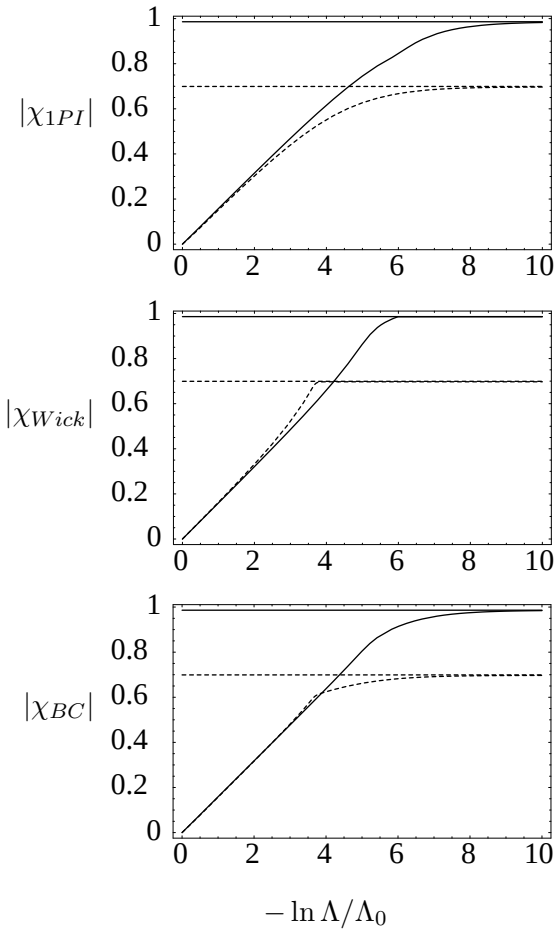


FIG. 3.9 – Flot de renormalisation, pour $T = 0$, de la susceptibilité de spin (en unités arbitraires) de fermions libres à une dimension pour $v_F\tilde{q}/\Lambda_0 = 0.005$ (en noir) et $v_F\tilde{q}/\Lambda_0 = 0.025$ (en pointillé) dans les schémas respectivement avec ordre de Wick, "1PI", et celui de C. Bourbonnais. Les lignes horizontales indiquent le résultat du calcul direct. On voit que pour le résultat final, $\chi(l \to \infty)$, la ligne en pointillé se trouve en-dessous de la ligne noire. C'est uniquement dans le schéma "1PI" que cet ordre est clairement conservé pendant tout le flot de renormalisation.

3.5 Le changement d'échelle

Le schéma de renormalisation que nous utilisons ne s'inscrit pas strictement dans le cadre de la renormalisation selon Wilson, comme discuté dans la section 3.1. En particulier, la question se pose [112] de savoir si le changement d'échelle, qui est partie intégrante de la renormalisation wilsonienne, doit aussi être inclu dans le nouveau schéma. La discussion du 3.1.4 montre que ceci n'est pas le cas. Or, le changement d'échelle, ou la "renormalisation à l'ordre 0" (en boucles), s'est avéré très utile pour démontrer la non pertinence de certaines variables [176]. Il est cependant possible, d'après un travail de Kopietz et Busche [112], de retrouver cet argument dans notre schéma, sans même changer d'échelle explicitement. Nous allons brièvement rappeler ledit argument (pour plus de détail voir Shankar [176]) et ensuite donner sa reformulation adaptée au schéma 1PI.

Nous considérons l'exemple d'un système unidimensionnel de fermions sans spin avec relation de dispersion linéaire. Commençons par l'approche selon Wilson, et par un système sans interactions. L'action est alors l'action libre,

$$S_0 = \sum_{\tilde{k}\omega} \psi^*_{\tilde{k}\omega}\big(i\omega - v_F\tilde{k}\big)\psi_{\tilde{k}\omega} \ ,$$

où $\tilde{k}$ est la distance d'un vecteur d'onde à la surface de Fermi. Nous définissons la transformation de renormalisation tel que S_0 en est un point fixe. Elle consiste en deux étapes :

1. élimination des degrés de liberté correspondants à l'intervalle d'énergie $[\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda]$;
2. changement d'échelle :
   (a) des vecteurs d'onde $\tilde{k}$ afin de conserver la largeur de bande du système initial ;
   (b) de toutes les autres grandeurs qui apparaissent dans l'action libre S_0, y compris des champs de Grassmann, afin de la rendre invariante par la transformation.

On trouve que le changement d'échelle

$$\tilde{k} \mapsto \tilde{k}' = s\tilde{k},\ \omega \mapsto \omega' = s\omega,\ \psi(k,\omega) \mapsto \psi'(k',\omega') = s^{-\frac{1}{2}}\psi(k,\omega),$$

$$\text{où } s = e^{\delta l},\ l = -\ln \Lambda/\Lambda_0,$$

laisse l'action libre inchangée. La vitesse de Fermi est la même qu'avant la transformation, $v'_F = v_F$. Comme $\omega'_n = s\omega = s(2n+1)\pi T$, la température change, $T' = sT$. Le nombre de degrés de liberté diminue, $N' = \Lambda/(v_F(\Delta k)') = s^{-1}N$.

Plaçons-nous maintenant légèrement à côté du point fixe libre, en ajoutant une interaction faible à deux particules, décrite par la fonction $g(\vec{k},\vec{\omega}) =$

$g(\tilde{k}_1, \tilde{k}_2, \tilde{k}_3, \omega_1, \omega_2, \omega_3)$:

$$S_I = \frac{T}{N} \sum_{\tilde{k}_j \omega_j} g(\vec{k}, \vec{\omega}) \psi^*_{k_F+\tilde{k}_1,\omega_1} \psi^*_{-k_F+\tilde{k}_2,\omega_2} \psi_{-k_F+\tilde{k}_3,\omega_3} \psi_{k_F+\tilde{k}_4,\omega_4} \ ,$$

où $\tilde{k}_4 = \tilde{k}_1 + \tilde{k}_2 - \tilde{k}_3$, $\omega_4 = \omega_1 + \omega_2 - \omega_3$. Si on applique la transformation de renormalisation à S_I, on voit que tous les facteurs s se simplifient. On a alors

$$g'(\vec{k}', \vec{\omega}') = g(\vec{k}, \vec{\omega}) \ . \tag{3.41}$$

g est donc marginale.

Tous les arguments évoqués dans la suite concernant la dépendance de g en $\tilde{k}$ s'appliquent également à celle en ω, que nous allons négliger à partir de maintenant. Pour les coefficients d'un développement limité de g autour des points de Fermi,

$$g(\vec{k}) = g_0 + \sum_{j=1}^{3} g_j \tilde{k}_j + \frac{1}{2} \sum_{ij} g_{ij} \tilde{k}_i \tilde{k}_j + O(\tilde{k}^3) \ , \tag{3.42}$$

ceci implique que

$$g'_j = s^{-1} g_j \ , \ g'_{ij} = s^{-2} g_{ij} \text{ etc.},$$

de sorte que tous les coefficients dans le développement convergent vers 0 au cours de la renormalisation, sauf g_0, qui reste constant. g_0 est donc marginale, par contre, la dépendance en $\tilde{k}$ de l'interaction est non-pertinente.

Cette renormalisation de g à l'ordre 0 s'écrit aussi d'une façon différentielle [112]. Le changement d'échelle pour les vecteurs d'onde revient, pour la fonction g, à remplacer $g(\vec{k})$ par $g(\frac{\vec{k}}{s})$, voir la figure 3.10 :

$$\delta g = g\left(\frac{\vec{k}}{s}\right) - g(\vec{k}) \approx \left(\vec{\nabla} g\right)(\vec{k}).(-\vec{k}\delta l) \ , \tag{3.43}$$

$$\frac{dg(\vec{k})}{dl} = -\left[(\vec{\nabla} g)(\vec{k})\right].\vec{k} \ . \tag{3.44}$$

Si on réécrit cette équation pour les coefficients du développement limité de g, on obtient

$$\frac{dg_0}{dl} = 0 \ , \ \frac{dg_j}{dl} = -g_j \ , \ \frac{dg_{ij}}{dl} = -g_{ij} \text{ etc.} \tag{3.45}$$

Nous avons revu deux façons de démontrer la non pertinence de la dépendance en $\tilde{k}$ de la fonction d'interaction $g(\vec{k})$, dans le cas où la transformation de renormalisation contient un changement d'échelle. Nous allons maintenant discuter comment on peut arriver à la même conclusion sans faire de changement d'échelle. Supposons cependant que nous suivons toujours $g(\vec{k})$

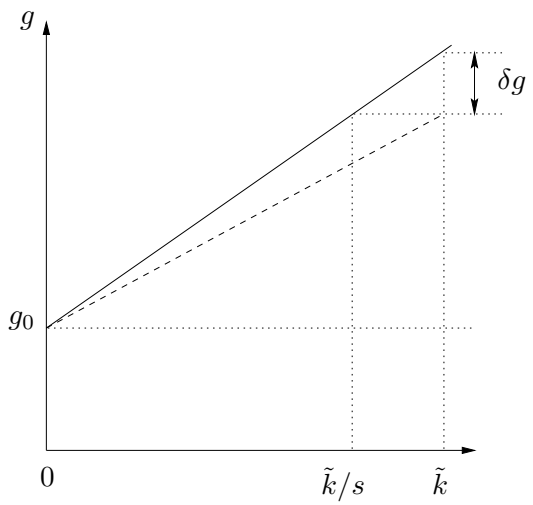


FIG. 3.10 – Renormalisation à l'ordre 0 : Dans le cas avec changement d'échelle, on passe de la ligne noire à la ligne en pointillé, tout en gardant Λ à $\tilde{k}$. Sans changement d'échelle, on reste sur la ligne noire, mais Λ passe de $\tilde{k}$ à $\tilde{k}/s$.

pour les $\tilde{k}$ qui sont placés sur la coupure Λ. $\vec{k}$ devient donc fonction de Λ. Comme (3.43) reste vrai,

$$\frac{dg\big((\vec{k}(\Lambda)\big)}{dl} = -\big(\vec{\nabla} g\big).\vec{k}\ .$$

Au lieu de remplacer la ligne noire par la ligne en pointillé sur la Fig. 3.10, nous restons alors sur la première, mais Λ s'approche de l'origine $\vec{k} = 0$. L'effet est le même, la dépendance en $\vec{k}$ devient non pertinente. Ceci marche cependant seulement parce que $g(\vec{k})$ est marginale. Dans tout autre cas, il apparaît bien moins évident d'arriver à des résultats sur la pertinence des variables sans passer explicitement par un changement d'échelle.

Notons finalement que ces arguments s'appliquent seulement si tous les $\tilde{k}$ restent à l'intérieur de la bande 2Λ. Si, par contre, un des $\tilde{k}_j$ croît à la même mesure que le coefficient associé g_j dans le développement (3.42) décroît, le terme correspondant n'est bien sûr pas négligeable. Nous allons revenir sur ce point, dans un contexte plus concret, à la section 4.2.2.

Chapitre 4

Diagramme de phases d'un conducteur quasi-unidimensionnel

Ce chapitre est consacré à l'étude, en renormalisation, des instabilités de basse température dans un conducteur quasi-unidimensionnel comme $(TMTSF)_2PF_6$. Les équations sont présentées dans la section 4.1, où nous discutons aussi une série de limites simples, qui nous permettront de bien comprendre le contenu physique très riche de ces équations, avant de passer à leur solution numérique (section 4.2). Dans la section 4.3, l'effet des interactions entre électrons de chaînes voisines est discuté.

Une étude similaire a déjà été présentée par Duprat et Bourbonnais [50, 48]. Les équations utilisées ne sont pas exactement les mêmes (section 4.1.7), mais les résultats se ressemblent beaucoup. Les calculs présentés dans la section 4.2.2 n'ont pas encore été faits ailleurs. La section 4.3, par contre, est de nouveau basée sur une idée de Duprat et Bourbonnais [49] et reproduit en partie (section 4.3.1) leurs résultats.

4.1 Les équations, et quelques limites simples

4.1.1 Equations de renormalisation pour un système quasi-unidimensionnel

Appliquons les équations de renormalisation au modèle le plus simple d'un conducteur quasi-unidimensionnel avec une seule bande au niveau de Fermi, avec dispersion

$$\begin{aligned} \epsilon(r, k_\parallel, k_\perp) &= v_F(rk_\parallel - k_F^{1D}) + \epsilon_\perp(k_\perp), \\ \epsilon_\perp(k_\perp) &= -2t_\perp \cos k_\perp b - 2t'_\perp \cos 2k_\perp b. \end{aligned}$$

Dans un premier temps, nous allons négliger la dépendance en $k_\parallel$ des vertex (voir la section 4.1.3). Les équations de renormalisation pour les vertex sont (annexe B.5.2)

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\alpha(k'_{1\perp},k'_{2\perp},k_{2\perp},k_{1\perp}) \\
&\qquad = \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b}\Big\{\, B_{\mathcal{C}}(T;k_\perp,q_{\mathcal{C}\perp})\times \\
&\qquad\quad \times \sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i(k'_{1\perp},k'_{2\perp},-k_\perp+q_{\mathcal{C}\perp},k_\perp)\times \\
&\qquad\qquad\qquad \times\tilde{\Gamma}_j(k_\perp,-k_\perp+q_{\mathcal{C}\perp},k_{2\perp},k_{1\perp})\,\Big\}\,\Big|_{q_{\mathcal{C}\perp}=k_{1\perp}+k_{2\perp}} \\
&\qquad - \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b}\Big\{\, B_{\mathcal{P}}(T;k_\perp,q_{\mathcal{P}\perp},\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel})\times \\
&\qquad\quad \times \sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i(k'_{1\perp},k_\perp,k_{2\perp},k_\perp+q_{\mathcal{P}\perp})\times \\
&\qquad\qquad\qquad \times\tilde{\Gamma}_j(k_\perp+q_{\mathcal{P}\perp},k'_{2\perp},k_\perp,k_{1\perp})\,\Big\}\,\Big|_{q_{\mathcal{P}\perp}=k'_{1\perp}-k_{2\perp}}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Les $C_{\alpha,ij}$ sont donnés par (3.22) à (3.24), et

$$\begin{aligned}
B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(T;k,q) &= \sum_{\nu=\pm1}\Theta(|\nu\Lambda+A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(k,q)|-\Lambda)\times \\
&\qquad \times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\nu\Lambda}{2T}+\tanh\frac{\nu\Lambda+A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(k,q)}{2T}\right)\times \\
&\qquad \times\frac{\Lambda}{2\nu\Lambda+A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(k,q)} \\
&\overset{T\to0}{\longrightarrow} \frac{\Lambda}{2\Lambda+|A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(k,q)|}\ , \text{ où} \\
A_{\mathcal{C}}(k_\perp,q_\perp) &= -\epsilon_\perp(k_\perp)+\epsilon_\perp(-k_\perp+q_\perp) \text{ et} \\
A_{\mathcal{P}}(k_\perp,q_\perp,\tilde{q}_\parallel) &= -\epsilon_\perp(k_\perp)-\epsilon_\perp(k_\perp+q_\perp)-v_F\tilde{q}_\parallel\ .
\end{aligned}$$

Rappelons que nous considérons $\Theta(0)=\frac{1}{2}$ dans ces équations (annexe B.5). Si nous tenions compte de la dépendance en $k_\parallel$ des vertex, $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel} := q_{\mathcal{P}\parallel}-2k_F^{1D}$ serait donné par $q_{\mathcal{P}\parallel}=k'_{1\parallel}-k_{2\parallel}$. Le choix de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ dans nos calculs sera discuté dans la section 4.1.3.

Pour la largeur de bande $2\Lambda_0$, on prendra une valeur du même ordre de grandeur, mais tout de même inférieure à sa taille originale $4t_\parallel$. On n'intègre donc pas toute la première zone de Brillouin, ceci n'aurait pas beaucoup de sens vu la linéarisation du spectre. Il se présente cependant deux voies possibles : soit on coupe la bande à une énergie $|\Lambda_0|$ constante, soit à des vecteurs $\kappa_{\parallel 0}$ constants en direction parallèle (voir la Fig. 4.1). Quand on

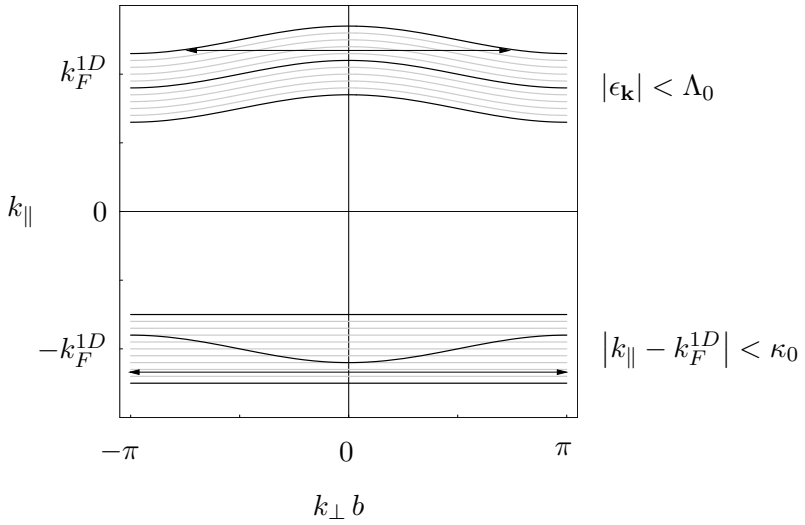


FIG. 4.1 – Deux façons de limiter la bande des états à un électron après linéarisation de la dispersion. On voit que pour une bande limitée selon l'énergie, tous les intégrales de $k_\perp$ ne s'étendent pas sur la première zone de Brillouin complète.

calcule la susceptibilité magnétique libre à $(2k_F, q_\perp)$ pour les deux choix, on s'aperçoit que la coupure *en énergie*, qui serait a priori le choix le plus naturel pour le groupe de renormalisation, fait que certaines intégrales sur $k_\perp$ ne parcourent pas toutes les valeurs entre $-\pi$ et π. Ainsi, la susceptibilité contient des termes en puissances impaires de $|t_\perp|$, ce qui n'est pas en accord avec la définition (2.11) qui ne fait intervenir que des paires particule-trou intrachaîne. Par contre, une coupure parallèle aux bords de la zone de Brillouin donne bien une susceptibilité en puissances paires de $t_\perp$. Le deuxième choix est donc plus physique. Les calculs numériques montrent cependant que l'effet de cette contrainte n'est pas très grand, de sorte que nous la négligerons dans la suite. Pour illustration, nous l'avons tout de même explicitée dans l'annexe B.5.2 dans les expressions concernant le canal de Cooper.

La renormalisation des fonctions de réponse est donnée par les équations suivantes. Pour les ondes de densité ($\alpha = C, S$) :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl} & z_\alpha(p_\perp, p_\perp + q_\perp; q_\perp) \\ &= \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} B_{\mathcal{P}}(T; k_\perp, q_\perp, \tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}) \times \\ &\qquad \times z_\alpha(k_\perp, k_\perp + q_\perp; q_\perp) \tilde{\Gamma}_\alpha(k_\perp + q_\perp, p_\perp, k_\perp, p_\perp + q_\perp) \ ,\end{aligned} \tag{4.2}$$

$$\frac{d}{dl}\tilde{\chi}_\alpha(q_\perp) = -\int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} B_{\mathcal{P}}(T;k_\perp,q_\perp,\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel})\,|z_\alpha(k_\perp,k_\perp+q_\perp;q_\perp)|^2 \ . \qquad (4.3)$$

Pour l'appariement ($\alpha = s,t$) :

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dl}z_\alpha(-p_\perp+q_\perp,p_\perp;q_\perp)\\ &= \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} B_{\mathcal{C}}(T;k_\perp,q_\perp)\times \qquad (4.4)\\ &\qquad \times z_\alpha(-k_\perp+q_\perp,k_\perp;q_\perp)\tilde{\Gamma}_\alpha(k_\perp,-k_\perp+q_\perp,-p_\perp+q_\perp,p_\perp)\ ,\end{aligned}$$

$$\frac{d}{dl}\tilde{\chi}_\alpha(q_\perp) = -\int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} B_{\mathcal{C}}(T;k_\perp,q_\perp)\,|z_\alpha(-k_\perp+q_\perp,k_\perp;q_\perp)|^2 \ . \qquad (4.5)$$

4.1.2 La signification de $q_{\mathcal{C}}$ et $q_{\mathcal{P}}$

Considérons pour un instant le terme Peierls dans l'équation (4.1). On observe bien que les "$q_{\mathcal{P}\perp}$" appartenant aux vertex $\tilde{\Gamma}_{i,j}$ qui apparaissent dans ce terme sont les mêmes que celui du vertex $\tilde{\Gamma}_\alpha$ qui se trouve dans le terme de gauche de cette équation :

$$k'_{1\perp} - k_{2\perp} = (k_\perp + q_{\mathcal{P}\perp}) - k_\perp = q_{\mathcal{P}\perp}.$$

Tous les autres facteurs de ce terme ne dépendent que de ν et $k_\perp$ (qui sont sommés) et de $q_{\mathcal{P}\perp}$. On en déduit que, *s'il n'y avait que le canal de Peierls,* la renormalisation d'un couplage dans ce canal serait entièrement déterminée par son $q_{\mathcal{P}\perp}$ et que tous les couplages qui interviennent dans cette renormalisation seraient renormalisés exactement de la même façon (pourvu qu'ils soient égaux à l'instant initial). Un argument analogue s'applique au canal de Cooper, qui serait entièrement caractérisé par le $q_{\mathcal{C}\perp}$ du couplage en question s'il n'y avait pas le canal de Peierls. Mais, comme les deux canaux sont présents en même temps, le terme de Cooper mélange les différents $q_{\mathcal{P}\perp}$ et le terme de Peierls les différents $q_{\mathcal{C}\perp}$, de sorte qu'il y aura des différences entre deux couplages de même $q_{\mathcal{P}\perp}$ si leurs $q_{\mathcal{C}\perp}$ ne sont pas les mêmes. On constate cependant que ces différences ont exclusivement pour origine le couplage entre les deux canaux.

4.1.3 La dépendance en $q_\parallel$

Les vertex Γ dépendent de trois variables indépendantes $\mathbf{k}_j$, qui varient dans toute la première zone de Brillouin. Avec les moyens de calcul numérique standards d'aujourd'hui, il est impossible de calculer le flot de renormalisation de tous ces couplages. Il faut se restreindre à un nombre limité de vertex représentatifs. Pour les systèmes bidimensionnels avec surface de Fermi, on peut décrire la dépendance en $\mathbf{k}$ à l'aide de variables (φ,d), où φ indique la position de la projection de $\mathbf{k}$ sur la surface de Fermi et d sa distance à

cette surface. Comme pour les systèmes quasi-unidimensionnels, la surface de Fermi est presque plane, on peut représenter φ par $k_\perp$, et $d = k_\parallel - k_{F\parallel}(k_\perp)$. Il est connu que la dépendance en φ ne peut pas être négligée. Ceci est confirmé par nos résultats, voir par exemple les Figs. 4.4 et 4.5. Nous devons donc essayer de trouver des vertex avec des valeurs de d représentatives.

Dans les calculs de renormalisation appliqués à un système de fermions unidimensionnel, ou à un système bosonique de n'importe quelle dimension, on choisit d'habitude comme représentants les couplages qui ne font intervenir que des dégrés de liberté d'énergie nulle. Comme nous l'avons discuté dans la section 3.1.3 (voir aussi la Fig. 3.2 et la section 4.1.6), ce choix est trop restrictif dans notre cas. Dans les applications du groupe de renormalisation au modèle de Hubbard bidimensionnel isotrope, on choisit d'habitude trois variables $\mathbf{k}$ sur la surface de Fermi ($d = 0$), en laissant la quatrième libre, voir par exemple [200, 86, 93]. Nous faisons ici un choix un peu différent. Comme discuté dans la section 4.1.2, la renormalisation d'un vertex est gouverné par les *combinaisons* $\mathbf{q}_\mathcal{C}$ et $\mathbf{q}_\mathcal{P}$ des variables $\mathbf{k}$. Pour cette raison, nous ne fixons pas les $k_\parallel$, mais plutôt $q_{\mathcal{C}\parallel}$ et $q_{\mathcal{P}\parallel}$, en choisissant les valeurs qui donnent la renormalisation la plus importante dans le canal respectif. Pour le canal de Cooper, c'est bien sûr $q_{\mathcal{C}\parallel} = 0$. Le choix de $q_{\mathcal{P}\parallel}$ s'avère plus délicat. Dans un premier temps, nous utilisons $q_{\mathcal{P}\parallel} = 2k_F^{1D}$ [50], la composante parallèle aux chaînes du vecteur $\mathbf{Q}_0$ de meilleur emboîtement à haute température (voir la section 2.3.1). L'effet de la variation de $q_{\mathcal{P}\parallel}$ est discuté dans la section 4.2.2.

Nous allons donc seulement calculer le flot de renormalisation pour les vertex avec des valeurs fixes de $q_{\mathcal{C}\parallel}$ et $q_{\mathcal{P}\parallel}$. Dans le membre de droite des équations de renormalisation (4.1), toutes les valeurs de $q_{\mathcal{C}\parallel}$ et $q_{\mathcal{P}\parallel}$ vont en général intervenir. Nous devons alors projeter les vertex dans le membre de droite de ces équations sur celles que nous renormalisons. Nous avons vu dans la section 4.1.2 que, à l'intérieur d'un canal, les différents $\mathbf{q}$ correspondant à ce canal ne se mélangent pas, mais qu'ils sont mélangés par l'autre canal,

$$\frac{d}{dl}\Gamma(\mathbf{q}_\mathcal{C}, \mathbf{q}_\mathcal{P}) = \sum_{\mathbf{q}'_\mathcal{P}} \text{Cooper}\big(\Gamma(\mathbf{q}_\mathcal{C}, \mathbf{q}'_\mathcal{P})\big) + \sum_{\mathbf{q}'_\mathcal{C}} \text{Peierls}\big(\Gamma(\mathbf{q}'_\mathcal{C}, \mathbf{q}_\mathcal{P})\big) \ .$$

Il s'agit alors d'une approximation qui intervient au niveau du couplage entre canaux. Le fait que nous utilisons les $q_\parallel$ qui donnent la renormalisation la plus importante dans leur canal respectif va donc en général mener à une surestimation du couplage entre les canaux dans nos calculs.

Il est possible que le choix de placer un maximum de vecteurs d'onde sur la surface de Fermi capte mieux la physique de basse énergie des systèmes en question, notamment pour les systèmes à deux bandes discutés dans le chapitre 5. Un travail correspondant est en cours.

4.1.4 Le passage dimensionnel

Les équations de renormalisation (4.1) font bien apparaître le changement de dimensionnalité connu pour les systèmes quasi-unidimensionnels, voir par exemple Emery [59]. Considérons le terme

$$\frac{\Lambda}{2\Lambda + |A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_\perp)|} \ ,$$

où nous avons posé $q_{\mathcal{P}\parallel} = 2k_F^{1D}$, voir la section 4.1.3. Pour des échelles d'énergie $\Lambda \gg t_\perp$, $|A_{\mathcal{P}}|$ est négligeable pour toutes valeurs de $k_\perp$, $q_\perp$. Dans ce régime, l'influence de la dépendance en $k_\perp$ des fonctions de couplage disparaît de la renormalistion, et on retrouve les équations des systèmes unidimensionnels (cf. la section 4.1.5). Quand on baisse l'échelle d'énergie Λ, les termes de saut interchaîne deviennent de plus en plus importants, et le système devient bidimensionnel lorsque Λ est du même ordre que $t_\perp$.

Dans le régime unidimensionnel, la renormalisation ne dépend pas de $k_\perp$. Tous les couplages sont renormalisés et par le terme de Cooper et par le terme de Peierls. Les deux canaux sont entièrement couplés. Dans le régime bidimensionnel, plus Λ est petit devant $A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}$, plus le terme correspondant est supprimé. En général,

$$A_{\mathcal{C},\mathcal{P}} \sim t_\perp,$$

sauf pour des valeurs spécifiques de $q_\perp$:

$$\begin{aligned} A_{\mathcal{C}}(q_{\mathcal{C}\perp} = 0) &= 0, \text{ et} \\ A_{\mathcal{P}}(q_{\mathcal{P}\perp} = \pi) &\sim t'_\perp \ll t_\perp. \end{aligned}$$

Si on prend de plus en compte que dans un canal donné, les différents $q_\perp$ ne sont pas mélangés (cf. la section 4.1.2), on voit que la renormalisation est de moins en moins importante pour toutes les autres valeurs de $q_\perp$ au fur et à mesure que Λ décroît. Comme il n'y a que très peu de couplages qui satisfont $q_{\mathcal{C}\perp} = 0$ et $q_{\mathcal{P}\perp} = \pi$ à la fois, ceci correspond *presque* à un découplage des deux canaux dans le régime bidimensionnel. Nous allons voir dans la suite que c'est le couplage entre les canaux *dans le régime bidimensionnel* qui permet d'obtenir de la supraconductivité à partir des interactions répulsives. Il est donc important que le découplage ne soit pas total. Par contre, l'instabilité de type onde de densité n'est pas beaucoup affectée par ce couplage dès qu'on a atteint le régime bidimensionnel. C'est pour cela qu'on peut traiter la transition vers l'ordre onde de densité de spin dans les sels de Bechgaard en RPA, en utilisant des interactions renormalisées par le régime unidimensionnel (voir aussi l'annexe C).

4.1.5 Le régime unidimensionnel

Equations de renormalisation purement 1D

Pour des hautes échelles d'énergie par rapport au saut interchaîne, $\Lambda \gg t_\perp$, les équations de renormalisation (4.1) reproduisent la physique d'un système unidimensionnel (cf. par exemple [179, 26, 170, 76]). Comme à une dimension, les dégrés de liberté de charge et de spin se découplent (la "séparation spin-charge"), l'interaction dans ces systèmes est souvent paramétrée par

$$g_\rho := g_1 - 2g_2 \text{ et } g_\sigma := g_1 \ ,$$

qui sont associés aux fluctuations de charge et de spin à grande longueur d'onde. Les définitions pour les vertex $\Gamma_{\rho,\sigma}$ sont analogues. Si, dans les équations de renormalisation (4.1), on pose $t_\perp^{(l)} = 0$, on obtient

$$B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(T) = \frac{1}{2} \tanh \frac{\Lambda}{2T} \stackrel{T\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{2} \ ,$$

de sorte que, pour $T = 0$,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\sigma &= -\tilde{\Gamma}_\sigma^2 \text{ et} \\ \frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\rho &= 0 \ . \end{aligned}$$

La solution pour $\tilde{\Gamma}_\sigma$ est

$$\tilde{\Gamma}_\sigma(l) = \frac{\tilde{g}_\sigma}{1 + \tilde{g}_\sigma \cdot l} \ .$$

Si l'interaction nue est répulsive, $\tilde{g}_1$, $\tilde{g}_2 > 0$, le vertex $\tilde{\Gamma}_\sigma$ diminue au cours de la renormalisation. La limite $l \to \infty$ donnerait le point fixe

$$\tilde{\Gamma}_\sigma \to 0 \ , \ \tilde{\Gamma}_\rho = \tilde{g}_\rho(0)$$

(correspondant à un liquide de Luttinger), mais cette limite ne sera pas atteinte dans nos calculs, où le saut interchaîne fini $t_\perp$ mène à un passage dimensionnel.

Contrairement à $g_{\rho,\sigma}$, $g_{C,S}$ comme définis dans la section 2.3.1 correspondent aux fluctuations de charge et de spin à $\lambda \sim (2k_F^{1D})^{-1}$. Pour ces dernières, et pour les fluctuations de paires particule-particule à vecteur d'onde total ~ 0, les fonctions de réponse sont renormalisées selon [30]

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} \ln z_j &= \frac{1}{2}\tilde{\Gamma}_j \ , \\ \frac{d}{dl}\tilde{\chi}_j &= -z_j^2 \end{aligned}$$

avec $j = s$, t, C, S. Pour le modèle de Hubbard répulsif, l'interaction nue est, dans la paramétrisation charge-spin, $g_C = -U$ et $g_S = U$. (Dans la

paramétrisation singulet-triplet, on a $g_s = -2U$, $g_t = 0$.) Dans la limite $l \to \infty$ et pour un système purement unidimensionnel, Γ_C et Γ_S tendent tous les deux vers la même valeur $+U/2$. (Dans la même limite, $\Gamma_s, \Gamma_t \to -\frac{U}{2}$.) Les fluctuations de spin restent tout de même dominantes dans ce cas.

Corrections dues au saut interchaîne

Les sauts interchaînes génèrent des interactions entre porteurs sur différentes chaînes. Dans le régime unidimensionnel, cet effet peut être décrit par un développement limité des expressions pour les bulles en $\frac{2t_\perp}{\Lambda}$ [30]. Considérons par exemple le canal de Peierls, et négligeons $t'_\perp$:

$$\frac{\Lambda}{2\Lambda + |A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_{\mathcal{P}\perp})|} \approx \frac{1}{2}\Big(1 - \frac{2t_\perp}{\Lambda}\left|\cos\frac{q_{\mathcal{P}\perp}b}{2}\right| \cdot \left|\cos(k_\perp b + \frac{q_{\mathcal{P}\perp}b}{2})\right| + \left(\frac{2t_\perp}{\Lambda}\right)^2 \cdot \frac{1}{2}(1+\cos q_{\mathcal{P}\perp}b) \cdot \frac{1}{2}(1+\cos(2k_\perp b + q_{\mathcal{P}\perp}b))\Big)$$

Définissons $\Gamma(k_{\perp j}) = \Gamma_{1D} + \delta\Gamma(k_{\perp j})$, et négligeons $\delta\Gamma(k_{\perp j})$ dans le membre de droite des équations de renormalisation. Ceci fait que dans la renormalisation de $\delta\Gamma(k_{\perp j})$, les canaux de Cooper et de Peierls se découplent. $\delta\Gamma(k_{\perp j})$ dépend donc uniquement de $q_{\mathcal{C}\perp}$ et $q_{\mathcal{P}\perp}$ (voir la section 4.1.2). La somme sur les $k_\perp$ donne

$$\int_{-\pi/b}^{\pi/b} \frac{dk_\perp}{2\pi} \frac{\Lambda}{2\Lambda + |A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_{\mathcal{P}\perp})|} \approx \frac{1}{2}\Big(1 - \frac{2t_\perp}{\Lambda}\cdot\frac{2}{\pi}\left|\cos\frac{q_{\mathcal{P}\perp}b}{2}\right| + \left(\frac{2t_\perp}{\Lambda}\right)^2 \cdot \frac{1}{4}(1+\cos q_{\mathcal{P}\perp}b)\Big).$$

On vérifie bien que pour un transfert de vecteur d'onde correspondant à l'emboîtement parfait, donc avec $q_{\mathcal{P}\perp} = \pi/b$, les corrections en $t_\perp$ s'annullent, et on obtient la même divergence logarithmique dans ce canal que dans le cas purement unidimensionnel. Pour $q_{\mathcal{P}\perp} = 0$, par contre, chacune des corrections est maximale, la première, qui affaiblit la divergence, étant dominante. Ceci est une des raisons pour notre choix de schéma de renormalisation. Dans un schéma de renormalisation où les énergies des propagateurs dans les bulles seraient forcées d'être égales ou *inférieures* à la coupure Λ, comme dans la renormalisation en théorie des champs ou le formalisme avec ordre de Wick, la correction linéaire en $t_\perp$ à $q_{\mathcal{P}\perp} = 0$ *renforcerait* la divergence. Dans le schéma utilisé par Duprat et Bourbonnais, les termes impairs en $t_\perp$ s'annullent pour tous les $q_{\mathcal{P}\perp}$. Or, comme il a été constaté par L. Hubert [101], le terme en $t_\perp^2$ renforce la divergence pour des $q_{\mathcal{P}\perp} \neq \pi/b$ plutôt que de l'affaiblir. Ces effets non physiques ne sont supprimés que lorsque les termes en $\Lambda/(2\Lambda - |A_{\mathcal{P}}|)$ sont coupés par les facteurs de Fermi.

On voit donc que le saut interchaînes fait que l'interaction ne reste pas constante en $k_\perp$. Elle devient non-locale dans la direction transverse déjà

dans le régime unidimensionnel, en favorisant le transfert de vecteur d'onde $q_\perp = \pi/b$, qui correspond au meilleur emboîtement.

4.1.6 Le régime bidimensionnel : Renormalisation à l'ordre logarithmique

Une première idée très simplifiée du régime bidimensionnel est fournie par la renormalisation restreinte à l'ordre logarithmique, que l'on obtient si on prend Wilson "à la lettre" [176]. Elle consiste à prendre en compte uniquement ces contributions où *tous* les propagateurs internes des diagrammes de renormalisation correspondent à des énergies *sur* la coupure Λ,

$$D_{pp,pt} \mapsto D_{pp,pt} \times \delta_{|\epsilon(\mathbf{k})|,\Lambda}\delta_{|\epsilon(\mathbf{k}')|,\Lambda} \ . \tag{4.6}$$

Il s'agit des termes pour lesquels les fonctions $A_{\mathcal{C},\mathcal{P}} = 0$, ce qui entraîne des divergences logarithmiques quand $\Lambda, T \to 0$. Un vertex pour lequel on n'a pas $\mathbf{q}_\mathcal{C} = 0$ ou $\mathbf{q}_\mathcal{P} = \mathbf{Q}_0 = (2k_F^{1D}, \pi/b)$ n'est pas renormalisé dans ce schéma, parce que (4.6) est seulement satisfait à quelques points singuliers dans l'intégrale sur $k_\perp$ au second membre de l'équation de renormalisation. De plus, parmi l'infinité de vertex avec $\mathbf{q}_\mathcal{C} = 0$, il n'en y a que 2 pour lesquels $\mathbf{q}_\mathcal{P} = \mathbf{Q}_0$. Les vertex avec $\mathbf{q}_\mathcal{C} = 0$ sont donc renormalisés indépendemment de ceux pour lesquels $\mathbf{q}_\mathcal{P} = \mathbf{Q}_0$, et tous de la même façon, pourvu qu'ils soient tous égaux à $l = 0$. Avec

$$\begin{aligned} V_\alpha &:= \Gamma_\alpha(k', -k', -k, k) \text{ et} \\ W_\alpha &:= \Gamma_\alpha(k' + (\mathbf{Q}_0, 0), k - (\mathbf{Q}_0, 0), k', k) \ , \end{aligned}$$

on a, à $T = 0$,

$$\frac{dV_\alpha}{dl} = \frac{1}{2}V_\alpha^2 \ , \tag{4.7}$$

$$\frac{dz_\alpha}{dl} = \frac{1}{2}V_\alpha z_\alpha \ , \tag{4.8}$$

pour $\alpha = s, t$, et

$$\frac{dW_\alpha}{dl} = \frac{1}{2}W_\alpha^2 \ , \tag{4.9}$$

$$\frac{dz_\alpha}{dl} = \frac{1}{2}W_\alpha z_\alpha \ , \tag{4.10}$$

pour $\alpha = C, S$. Les équations qui contiennent W sont vraies seulement si l'emboîtement est parfait. Sinon, (4.6) n'est pas satisfaite, et $dW_\alpha/dl = 0$; de même pour $z_{C,S}$. D'une façon similaire, la renormalisation dans le canal particule-particule serait nulle si notre système n'était pas invariant par renversement du temps, $\epsilon_{\mathbf{k},\uparrow} \neq \epsilon_{-\mathbf{k},\downarrow}$.

Dans ce schéma de renormalisation, les deux canaux de corrélations sont entièrement découplés. Cette méthode ne voit donc pas la quasi-unidimensionnalité de notre système. Mais elle permet de retrouver les résultats de l'approche de champ moyen, c'est à dire supraconductivité singulet "s" pour une interaction nue attractive, et onde de densité de spin si l'interaction de départ est répulsive. D'un autre côté, il est bien sûr impossible d'obtenir de la supraconductivité à partir d'une interaction répulsive avec les équations (4.7) à (4.10).

L'origine de cet échec devient évident si on considère un développement perturbatif. Si l'emboîtement est parfait, les termes associés aux diagrammes particule-trou divergent logarithmiquement quand la température tend vers 0. Dès que l'emboîtement est imparfait, il n'y a plus de divergence, mais les diagrammes particule-trou mènent toujours à des contributions *très grandes* et donc pas du tout négligeables. Il en est de même pour les vertex avec $\mathbf{q}_{\mathcal{P}} \neq \mathbf{Q}_0$, mais $\mathbf{q}_{\mathcal{P}} \approx \mathbf{Q}_0$, ou $\mathbf{q}_{\mathcal{C}} \neq 0$, mais $\mathbf{q}_{\mathcal{C}} \approx 0$: même si leur série de perturbation ne contient pas de divergence, elle contient tout de même des termes importants devant la largeur de bande. Si on inclût tous ces termes dans la renormalisation, il se trouve que les vertex avec $\mathbf{q}_{\mathcal{C}} \approx 0$ ou $\mathbf{q}_{\mathcal{P}} \approx \mathbf{Q}_0$ sont fortement renormalisés dans leur canal respectif. Ceci implique notamment que l'ensemble de vertex qui sont renormalisés d'une façon importante dans les *deux* canaux à la fois passent de quelques points isolés à des "taches" (plus précisément : à des ensembles de mesure non-nulle), et c'est par l'intermédiaire de ces taches que les fluctuations de spin entrent dans la renormalisation des corrélations particule-particule. Nous allons donc étendre nos calculs dans la suite aux contributions sous-dominantes.

B. Binz a constaté que, au-delà de l'ordre logarithmique, il n'y a plus de critère net qui permettrait de justifier la sélection de certains termes [19]. Il est vrai que nous prenons en compte tout le canal de Peierls, même si $q_{\mathcal{P}\perp}$ est loin de π/b, mais pas le canal de Landau, même si, dans le régime bidimensionnel, ce dernier donne des contributions du même ordre de grandeur que le canal de Peierls pour un "mauvais" transfert de vecteur d'onde $\mathbf{q}_{\mathcal{P}}$. D'un autre côté, ces contributions sont tellement petites que la prise en compte de quelques termes "de trop" dans le canal de Peierls ou de Cooper ne devrait pas avoir d'effet important.

4.1.7 Les équations de renormalisation d'après Duprat et Bourbonnais

Dans cette section, les équations de renormalisation (4.1) sont comparées à celles qu'utilisent Duprat et Bourbonnais [50]. Ils calculent le flot de renormalisation en deux étapes. Dans le régime unidimensionnel, ils négligent la dépendance en $k_\perp$ des vertex. Le saut interchaînes $t_\perp$ est traité en perturbation et dans le canal de Peierls seulement. Dans le régime bidimensionnel, $t_\perp$ est considéré à tous les ordres, et la dépendance en $k_\perp$ est également prise

en compte. Comme les équations de renormalisation (4.1) sont correctes à toutes les échelles d'énergie, une telle coupure entre les deux régimes dimensionnels n'est pas nécessaire. D'un autre côté, les simplifications dans le régime unidimensionnel permettent à Duprat et Bourbonnais d'aller jusqu'à deux boucles dans les diagrammes de renormalisation, et de calculer la renormalisation de $t_\perp$ par les fluctuations unidimensionnelles. Dans [48], l'effet des processus Umklapp est en plus pris en compte, dans les deux régimes de dimensionnalité.

Les équations de renormalisation qu'utilisent Duprat et Bourbonnais pour le régime bidimensionnel ne sont pas exactement les mêmes que (4.1). Comme discuté dans la section 3.3.2, leur schéma de renormalisation est différent du nôtre. Ceci fait que les expressions pour les bulles sont différentes. Pour le canal de Peierls, par exemple, ils ont

$$\begin{aligned} B_{\mathcal{P}}(T;k,q) &= \frac{1}{2}\sum_{\nu=\pm1}\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\nu\Lambda}{2T}+\tanh\frac{\nu\Lambda+A_{\mathcal{P}}(k,q)}{2T}\right)\times \\ &\qquad \times\frac{\Lambda}{2\nu\Lambda+A_{\mathcal{P}}(k,q)} \\ &\xrightarrow{T\to0} \frac{1}{2}\sum_{\nu=\pm1}\Theta(\Lambda+\nu A_{\mathcal{P}}(k,q))\times \\ &\qquad \times\frac{\Lambda}{2\Lambda+\nu A_{\mathcal{P}}(k,q)}\ . \end{aligned}$$

Les vertex Γ dépendent de trois variables indépendantes. Duprat et Bourbonnais n'en retiennent que deux, en posant $q_{\mathcal{C}\perp}=0$; ils considèrent donc uniquement les couplages qui sont le plus fortement renormalisés dans le canal de Cooper. Comme dans le membre de droite des équations de renormalisation, toutes les valeurs de $q_{\mathcal{C}\perp}$ interviennent (dans le canal de Peierls), ils sont obligés de projeter les vertex avec $q_{\mathcal{C}\perp}\neq0$ sur ceux dont ils calculent la renormalisation. Malheureusement, cette projection peut être faite de plusieurs façons *inéquivalentes*. Nous allons en donner deux exemples.

Avant de projeter $q_{\mathcal{C}\perp}\mapsto0$, il faut écrire les vertex $\Gamma(k_1',k_2',k_2,k_1)$ en fonction de *trois* variables, dont une $q_{\mathcal{C}}$. Selon le choix de ces trois variables avant la projection, les équations obtenues après la projection sont en général différentes. Nous avons vu dans la section 4.1.2 que la renormalisation d'un vertex dépend de $q_{\mathcal{C}}=k_1+k_2$ et $q_{\mathcal{P}}=k_1'-k_2$. Un choix naturel de trois variables indépendantes est donc donné par

$$\Gamma(k_1',k_2',k_2,k_1)=\Gamma(q_{\mathcal{C}}-k_1+q_{\mathcal{P}},k_1-q_{\mathcal{P}},q_{\mathcal{C}}-k_1,k_1)\ .$$

Si nous réécrivons tous les vertex dans les équations de renormalisation sous

cette forme, et posons ensuite $q_{\mathcal{C}} = 0$ partout, nous obtenons

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\alpha(k_{1\perp}; q_{\mathcal{P}\perp}) \\
&= B_{\mathcal{C}}(T; q_{\mathcal{C}\perp} = 0) \sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij} \times \\
&\quad \times \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} \Big\{ \tilde{\Gamma}_i(k_\perp; q_{\mathcal{P}\perp} - k_{1\perp} + k_\perp) \tilde{\Gamma}_j(k_{1\perp}; k_\perp + k_{1\perp}) \Big\} \\
&- \sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij} \times \\
&\quad \times \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} \Big\{ B_{\mathcal{P}}(T; k_\perp, q_{\mathcal{P}\perp}) \tilde{\Gamma}_i(k_\perp + q_{\mathcal{P}\perp}; q_{\mathcal{P}\perp}) \Big\} \tilde{\Gamma}_j(k_{1\perp}; q_{\mathcal{P}\perp}) \ .
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Ce sont les équations de renormalisation utilisées par Duprat et Bourbonnais.

Dans les équations (4.1), le canal de Landau a été négligé. Si ce canal joue un rôle, le seul choix possible de variables indépendantes est $(q_{\mathcal{C}}, q_{\mathcal{L}}, q_{\mathcal{P}})$, où $q_{\mathcal{L}} = k'_2 - k_2$ détermine la renormalisation dans le canal de Landau de la même façon que $q_{\mathcal{C}}, q_{\mathcal{P}}$ dans les autres canaux. Si on remplace

$$\begin{aligned}
&\Gamma(k'_1, k'_2, k_2, k_1) = \\
&\qquad \Gamma\big(\frac{q_{\mathcal{C}} - q_{\mathcal{L}} + q_{\mathcal{P}}}{2}, \frac{q_{\mathcal{C}} + q_{\mathcal{L}} - q_{\mathcal{P}}}{2}, \frac{q_{\mathcal{C}} - q_{\mathcal{L}} - q_{\mathcal{P}}}{2}, \frac{q_{\mathcal{C}} + q_{\mathcal{L}} + q_{\mathcal{P}}}{2}\big)
\end{aligned} \tag{4.12}$$

dans (4.1), et pose $q_{\mathcal{C}} = 0$ ensuite, on obtient

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\alpha(q_{\mathcal{L}\perp}; q_{\mathcal{P}\perp}) \\
&\quad = B_{\mathcal{C}}(T; q_{\mathcal{C}\perp} = 0) \sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij} \times \\
&\quad \times \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} \Big\{ \tilde{\Gamma}_i\big(k_\perp + \frac{q_{\mathcal{L}\perp} - q_{\mathcal{P}\perp}}{2}; k_\perp + \frac{-q_{\mathcal{L}\perp} + q_{\mathcal{P}\perp}}{2}\big) \times \\
&\qquad\qquad \times \tilde{\Gamma}_j\big(-k_\perp + \frac{q_{\mathcal{L}\perp} + q_{\mathcal{P}\perp}}{2}; k_\perp + \frac{q_{\mathcal{L}\perp} + q_{\mathcal{P}\perp}}{2}\big) \Big\} \\
&\quad - \sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij} \times \\
&\quad \times \int \frac{dk_\perp}{2\pi/b} \Big\{ B_{\mathcal{P}}(T; k_\perp, q_{\mathcal{P}\perp}) \times \\
&\qquad \times \tilde{\Gamma}_i\big(k_\perp + \frac{-q_{\mathcal{L}\perp} + q_{\mathcal{P}\perp}}{2}; q_{\mathcal{P}\perp}\big) \tilde{\Gamma}_j\big(-k_\perp + \frac{q_{\mathcal{L}\perp} - q_{\mathcal{P}\perp}}{2}; q_{\mathcal{P}\perp}\big) \Big\} \ .
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Le fait que dans le terme de Peierls dans (4.13), les *deux* vertex $\tilde{\Gamma}_{i,j}$ varient avec la variable intégrée $k_\perp$ montre que les deux projections donnent des équations de renormalisation tout à fait différentes.

Pour le choix $(q_{\mathcal{C}}, q_{\mathcal{P}}, k_1)$ de Duprat et Bourbonnais pour les trois variables indépendantes, la projection $q_{\mathcal{C}} \mapsto 0$ ne conserve pas $q_{\mathcal{L}}$. Ce choix n'est donc plus correct dès que le canal de Landau rentre en jeu.

4.1.8 Solution numérique : Aspects techniques

Il est hors question de suivre tous les vertex $\tilde{\Gamma}_\alpha(k'_{1\perp}, k'_{2\perp}, k_{2\perp}, k_{1\perp})$. Nous allons couper chaque nappe de la surface de Fermi en M segments, centrés à $k_\perp^m = \frac{m2\pi}{Mb}$, $m \in \{-\frac{M}{2}, ..., \frac{M}{2} - 1\}$, et nous limiter aux vertex avec des arguments sur les points $k_\perp^m$. Le nombre de vertex différents peut encore être réduit en profitant des symétries par rapport à $k_\perp \leftrightarrow -k_\perp$, $R \leftrightarrow L$, renversement du temps, et leurs combinaisons. Pour $M = 32$, par exemple, on passe ainsi de $2 \times 32^3 = 65536$ à 9010 vertex à prendre en compte. La discrétisation en segments ne peut pas être étendue à l'intégrale de $k_\perp$, parce que les fonctions $B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}$ présentent des pics très prononcés aux multiples entiers de $k_\perp = \frac{\pi}{4b}$, si $q_\perp = 0$ ou π/b, pour basse température et petite coupure infrarouge Λ. Nous calculons alors l'intégrale de $B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}$ à l'intérieur de chaque segment,

$$\int \frac{dk_\perp}{2\pi}\Gamma(k_\perp)B(k_\perp) \mapsto \sum_{k_\perp^m} \Gamma(k_\perp^m) \int_{k_\perp^m - \frac{\Delta k_\perp}{2}}^{k_\perp^m + \frac{\Delta k_\perp}{2}} \frac{dk_\perp}{2\pi} B(k_\perp) \ .$$

L'intégrale est calculée en utilisant une méthode Runge-Kutta à l'ordre quatre avec largeur de pas d'intégration adaptive [154, 174]. La même méthode est appliquée pour l'intégration des équations de flot selon l à $T = 0$. Les calculs à température finie sont en général faits avec des largeurs de pas imposées, mais raccourcies dans la proximité d'une divergence, afin de limiter le temps de calcul. Nous avons vérifié que le résultat avec largeur de pas fixe ne dévie que très peu de celui avec largeur de pas adaptive, voir par exemple la Fig. 4.2. Dans la même figure, on voit que le fait de doubler la discrétisation de $M = 32$ à $M = 64$ segments ne change rien non plus.

Les équations sont intégrées jusqu'à $\Lambda_{min} \approx 10^{-4} t_\perp$. La température maximale à laquelle le flot de renormalisation diverge est interprétée comme la température critique T_c. La précision sur la température est $\delta T \approx 5 \times 10^{-5} t_\perp$. Si aucune divergence n'est trouvée à $T \geq 3\delta T \gtrsim \Lambda_{min}$, on considère que $T_c = 0$. Une "divergence" du flot de renormalisation est définie numériquement par une pente trop importante. Plus précisément, dans l'algorithme avec largeur de pas adaptive, on arrête le flot dès qu'il n'est plus possible d'atteindre une précision relative locale (c'est à dire par pas d'intégration δl) souhaitée $\epsilon = 10^{-6}$ avec un pas d'intégration minimal $\delta l_{min} = 10^{-4}$. Si la largeur de pas est fixe, le critère est simplement $|dy/dl| > 10^{10}$ ($y = \Gamma$, z ou χ). Dans les deux cas, le flot atteint des régimes où les vertex deviennent grands devant la largeur de bande. Il est clair que notre approximation de tronquer le développement des équations de renormalisation à l'ordre Γ^2 n'est plus vraiment justifiée dans ce régime. Ceci n'arrive cependant que juste avant la divergence. Il faut aussi se rappeler que le groupe de renormalisation est une technique de resommation d'un nombre infini de termes de perturbation (voir par exemple [19]) : le deuxième ordre en renormalisation est loin d'être

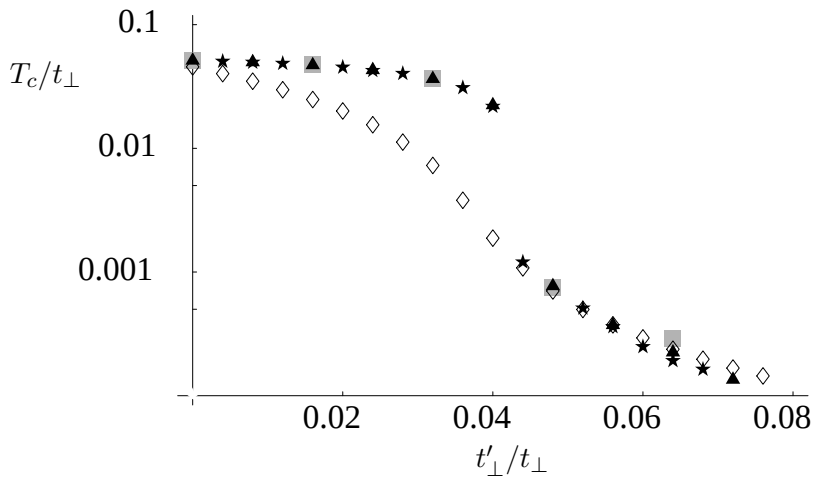


FIG. 4.2 – Aspects techniques : Température critique calculée avec notre méthode "standard" (étoiles ; largeur de pas fixe, $M = 32$ segments par feuillet de la surface de Fermi), comparée à celle obtenue avec largeur de pas adaptive (triangles), discrétisation $M = 64$ (carrés), et à la coupure infrarouge critique Λ_c dans un calcul à $T = 0$ (losanges).

comparable au deuxième ordre en perturbation.

Pour tester le programme, nous avons vérifié qu'il reproduit parfaitement les résultats pour le cas purement unidimensionnel ($t_\perp = 0$), et de la RPA ($B_\mathcal{C} = 0$).

4.1.9 La coupure infrarouge et la température

Le flot de renormalisation à une échelle $\Lambda > T$ donnée reflète souvent le comportement qu'aurait le système si la température était $T \sim \Lambda$. Ceci s'explique par le fait que, pour des grandes échelles d'énergie, le flot de renormalisation ne dépend presque pas de la température, car $B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(\Lambda \gg T) \approx B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(\Lambda; T = 0)$. D'un autre côté, il est quasiment coupé pour des petites échelles d'énergie, $B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(\Lambda \ll T) \approx 0$. Pour une grandeur f calculée en renormalisation jusqu'à la coupure infrarouge Λ pour une température $T' < \Lambda$, on a donc $f_{renorm}(T' < T)\big|_{\Lambda=T} \approx f_{exacte}(T)$. Une conséquence de ce phénomène est, par exemple, que, si l'on résoud les équations de renormalisation à $T = 0$, on trouve des divergences à des échelles critiques Λ_c du même ordre de grandeur que les températures de transition T_c (Fig. 4.2).

4.2 Le diagramme de phases

4.2.1 Le diagramme de phases d'après le groupe de renormalisation

Le diagramme de phase obtenu est reproduit dans la Fig. 4.3. On trouve une phase d'onde de densité de spin quand l'emboîtement est presque parfait, et de la supraconductivité singulet de type "d" ($\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp$) pour un emboîtement un peu moins bon. Dès que les déviations de l'emboîtement parfait deviennent trop importantes, la phase supraconductrice est elle aussi supprimée.

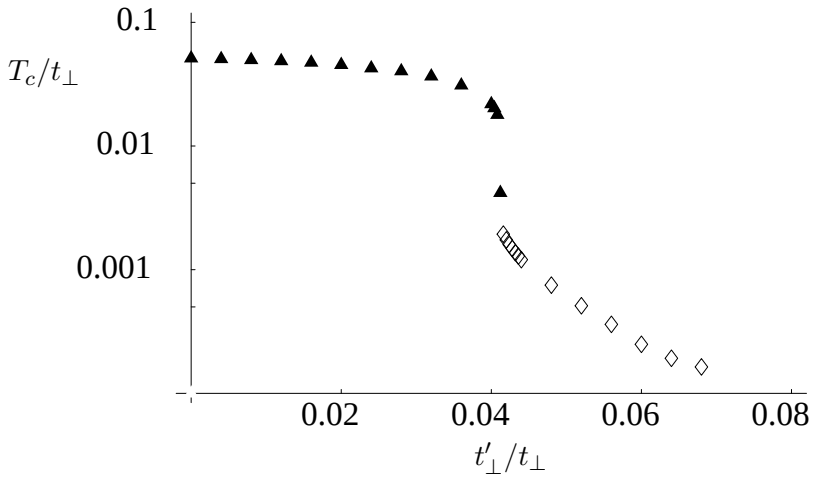


FIG. 4.3 – Le diagramme de phases d'après le groupe de renormalisation. Les triangles indiquent la température de transition pour l'onde de densité de spin, et les losanges celles de la supraconductivité d. Valeurs initiales : $\tilde{g}_{1,2} = 0.8$, $\Lambda_0 = 15t_\perp$.

A emboîtement parfait ($t'_\perp = 0$), la température critique obtenue est de l'ordre de $t_\perp/20$, donc d'environ 15K si nous supposons $t_\perp \sim 300$K (avec $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.8$). La température critique la plus élevée observée dans $(TMTSF)_2PF_6$ est plus basse de quelques kelvins, mais l'emboîtement dans ce composé n'est pas parfait. La température critique maximale pour la transition vers un ordre supraconducteur est $T_{c,SC}^{max} \approx 0.002 \times t_\perp \sim 0.6$K selon nos calculs. Ceci est du bon ordre de grandeur, mais correspond seulement à la moitié de la valeur expérimentale. Il est probable que l'interaction nue est plus importante en réalité que celle que nous utilisons dans nos calculs, qui sont restreints au couplage faible. Une interaction plus importante donnerait aussi une température de transition plus élevée. La transition de l'onde de

densité de spin à la supraconductivité est trouvée pour une valeur de $t'_\perp$ de l'ordre de $0.04 \times t_\perp \sim 12$K, en accord avec ce qu'on estime d'habitude pour les sels de Bechgaard [132]. Toutes les températures critiques sont bien plus basses que la température du passage dimensionnel $T_{x^1} \sim t_\perp$. Les instabilités vues dans ces calculs ne sont donc pas dues à des mécanismes purement unidimensionnels.

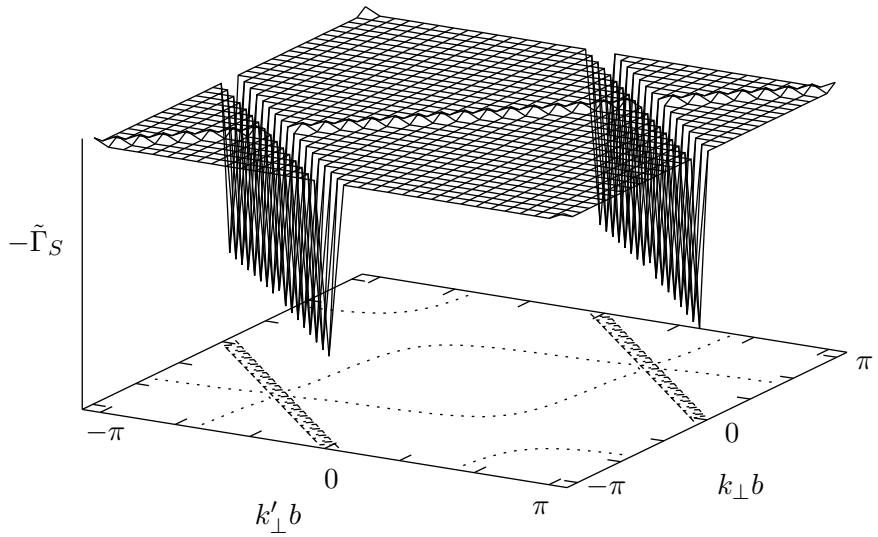


FIG. 4.4 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ pour $t'_\perp/t_\perp = 4.0 \times 10^{-2}$, c'est à dire dans le régime onde de densité de spin, juste avant la divergence. L'échelle verticale est arbitraire.

Nous utilisons deux critères indépendants pour déterminer la nature de la phase ordonnée. La façon la plus naturelle d'identifier le paramètre d'ordre en question est d'examiner le comportement des susceptibilités en fonction de la température, et d'identifier la susceptibilité la plus divergente (voir la discussion plus bas). Le diagramme de phases ainsi obtenu coïncide parfaitement avec celui que l'on trouve si on applique un critère alternatif d'identification de la phase ordonnée, dû à Duprat et Bourbonnais [50]. Il s'agit de considérer la dépendance des vertex en k près de la divergence. Deux exemples sont montrés dans les Figs. 4.4 et 4.5. Nous allons beaucoup profiter de cette méthode dans le chapitre suivant. Discutons donc de la signification des Figs. 4.4 et 4.5 plus en détail.

La représentation de $\Gamma(k', -k', -k, k)$ obtenue dans la Fig. 4.4 se comprend facilement : La divergence est restreinte aux vertex avec $q_{\mathcal{P}\perp} = k'_\perp + k_\perp = \pi/b$, il s'agit donc d'une instabilité dans le canal de Peierls. Pour apprécier la signification de la Fig. 4.5, considérons l'équation de renormalisation pour le vertex décrivant le couplage entre un champ extérieur d'appariement

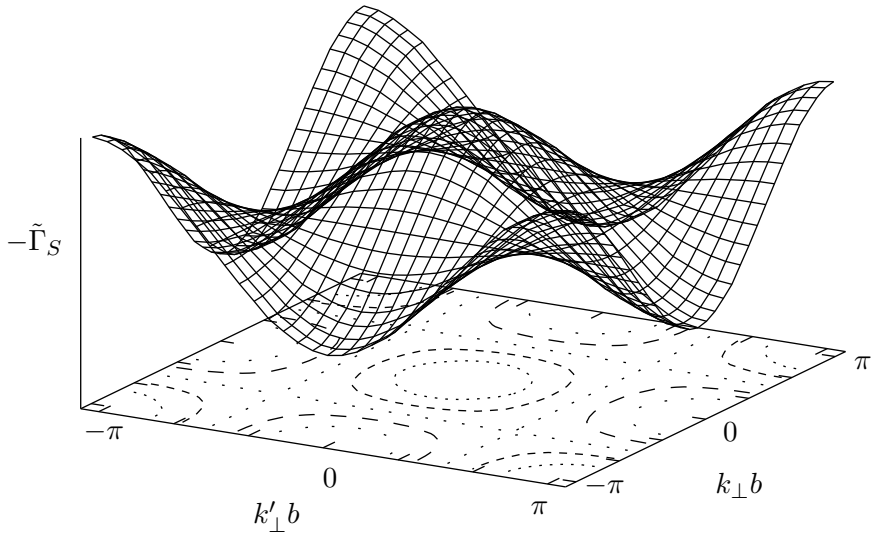


FIG. 4.5 – Comme la Fig. 4.4, mais pour $t'_\perp/t_\perp = 4.2 \times 10^{-2}$, c'est à dire dans le régime de la supraconductivité d.

et deux fermions,

$$\frac{d}{dl} z(k) \propto \frac{1}{N} \sum_{k'} \Gamma(k, -k, -k', k') z(k') \ .$$

Visiblement, $\Gamma(k', -k', -k, k)$ se factorise dans notre cas, $\Gamma(k, -k, -k', k') = h(k)h(k')$, de sorte que, schématiquement,

$$\frac{d}{dl} z(k) \propto h(k) \langle h|z\rangle \ .$$

Si z et h sont orthogonales, $\frac{d}{dl} z = 0$. Si z contient une composante $\propto h$, celle-là sera amplifiée. $\Gamma(k, -k, -k', k')$ impose donc sa structure sur $z(k)$. Le paramètre d'ordre qui sera le plus fortement renormalisé serait notamment $z(k) \propto h(k)$. C'est ce paramètre d'ordre qui mènerait alors à la susceptibilité la plus divergente. En d'autres mots, on peut déduire la partie orbitale du paramètre d'ordre supraconducteur de la divergence de $\Gamma(k', -k', -k, k)$ pourvu que celle-ci se factorise.

On peut aussi comprendre pourquoi $\Gamma(k', -k', -k, k)$ prend cette forme d'un produit de deux cosinus. Rappelons l'interaction effective dûe aux fluctuations de spin, équation (2.20). Quand $\Lambda \lesssim t'_\perp$, le canal de Peierls est essentiellement éteint ($B_\mathcal{P} \to 0$) grâce à l'imperfection de l'emboîtement. Il suffit donc de réécrire l'équation de renormalisation (4.1) seulement dans le canal de Cooper, de préférence en représentation singulet-triplet (équa-

tion (3.24)) en utilisant une interaction effective de la forme

$$\begin{aligned}\Gamma_{s,t}(k',-k',-k,k) = \\ &-\sum_n (-1)^n \alpha_n^{(s,t)} \cos(k'_\perp + k_\perp) nb \\ &= \sum_n (-1)^n \alpha_n^{(s,t)} \big(-\cos k'_\perp nb \cos k_\perp nb + \sin k'_\perp nb \sin k_\perp nb\big) \ .\end{aligned} \tag{4.14}$$

On trouve que, si n est impair, les termes en cos sont augmentés et ceux en sin supprimés, et vice versa si n est pair ($\alpha_n > 0$). Comme $\alpha_n > \alpha_m$ si $n < m$, c'est le terme en $n = 1$ qui l'emporte. Nous retrouvons donc le mécanisme esquissé dans la section 2.3.2, mais à partir d'un calcul qui est beaucoup plus contrôlé.

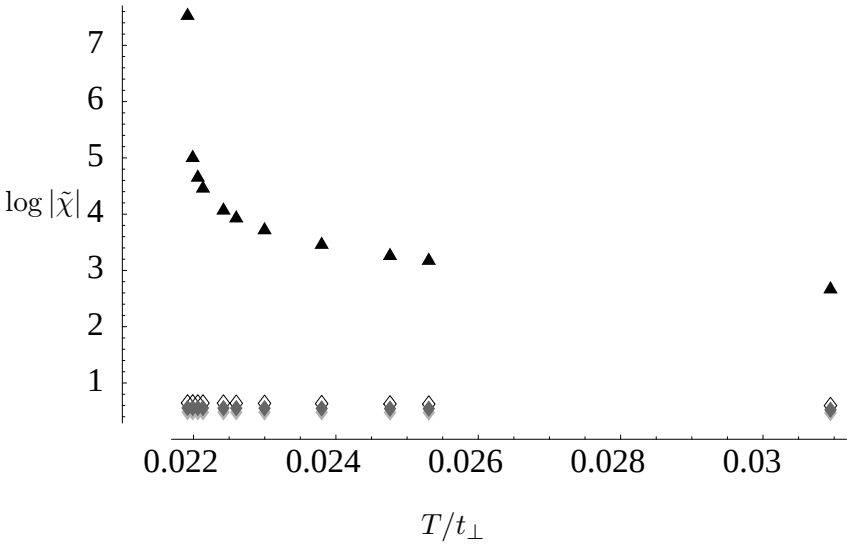


FIG. 4.6 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 4.0 \times 10^{-2}$, c'est à dire dans le régime onde de densité de spin. Les triangles correspondent à l'onde densité de spin et les losanges à différents paramètres d'ordre supraconducteur, voir la légende de la Fig. 4.7.

Les Figs. 4.6 et 4.7 représentent le comportement de certaines susceptibilités en fonction de la température. La susceptibilité la plus divergente est de nouveau désignée plutôt selon sa pente $|d\chi/dT|$ que selon sa valeur absolue. Dans le régime de l'onde de densité de spin, Fig. 4.6, on voit que les seules fluctuations divergentes sont celles de spin, et ceci même très près de la phase supraconductrice. Dans le régime supraconducteur, Fig. 4.7, les fluctuations de spin sont toujours importantes, mais ne divergent pas. C'est la susceptibilité associée au paramètre d'ordre supraconducteur d qui diverge. On remarque cependant que le paramètre d'ordre associé à un appariement sur

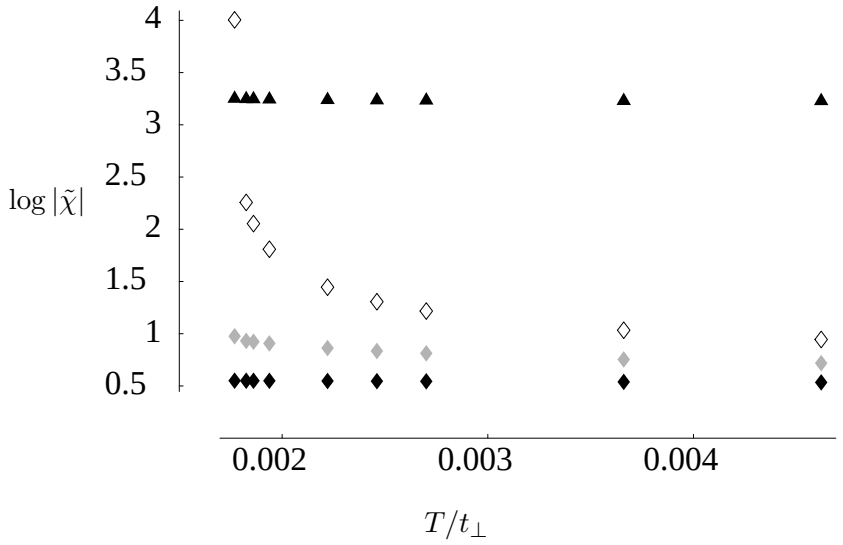


FIG. 4.7 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 4.2 \times 10^{-2}$, dans le régime supraconducteur : onde de densité de spin (triangles), supraconductivité d ($z(k_\perp) \propto \cos k_\perp b$, losanges blancs), g ($z(k_\perp) \propto \cos 2k_\perp b$, losanges gris clair) et i ($z(k_\perp) \propto \cos 3k_\perp b$, losanges gris foncé).

chaînes troisièmes-voisins, $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp 3b$, augmente aussi légèrement près de T_c. Un tel appariement est également créé par des fluctuations de spin, voir l'équation 4.14. La même équation explique pourquoi l'appariement de type g, $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp 2b$, reste négligeable : l'interaction entre électrons sur chaînes secondes voisines créée par les fluctuations de spin présentes ici a le mauvais signe, elle est répulsive et n'est donc pas renforcée par la renormalisation dans le canal de Cooper.

Sur la Fig. 4.8, nous avons tracé des suceptibilités sur une gamme de températures plus étendue. Nous montrons seulement les susceptibilités associées aux ordres onde de densité de spin et supraconductivité d, mais chacune pour plusieurs valeurs de $q_\perp$. On voit quatre régimes de température : Pour $T \gtrsim t_\perp$, la dépendance en $q_\perp$ ne joue pas de rôle, c'est le régime unidimensionnel. Les fluctuations de spin sont dominantes. En-dessous de $T \sim t_\perp$, seules les fluctuations de spin avec modulation correspondant au vecteur de meilleur emboîtement, et les fluctuations de paires avec moment total nul, continuent à augmenter ; les autres saturent. Le groupe de renormalisation retrouve donc bien le passage dimensionnel selon la température. Nous avons déjà vu dans la section 4.1.4 que ceci est également le cas pour le passage dimensionnel selon l'échelle d'énergie Λ. A partir de $T \sim t'_\perp$, la croissance de la susceptibilité de spin est coupée à cause des déviations de l'emboîtement parfait. Le canal de Cooper n'est pas affecté par $t'_\perp$. La susceptibilité asso-

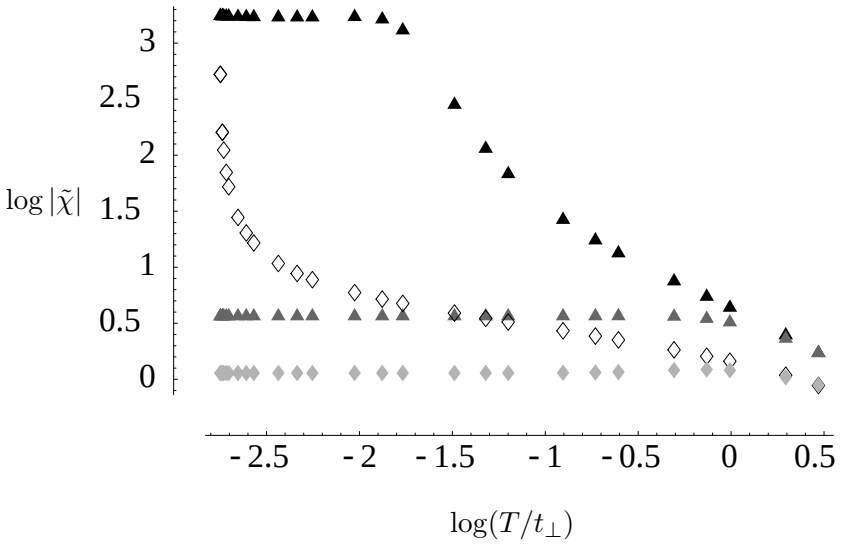


FIG. 4.8 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 4.2 \times 10^{-2}$, dans le régime supraconducteur : onde de densité de spin à $q_\perp = \pi/b$ (triangles noirs) et à $q_\perp = 0$ (triangles gris), supraconductivité d avec moment total transverse 0 (losanges blancs) et π/b (losanges gris).

ciée à la supraconductivité d continue donc toujours à augmenter, et diverge finalement au voisinage immédiat de T_c.

On note que selon nos calculs, les fluctuations de spin sont dominantes presque pour toutes les températures, et ceci malgré le fait que, pour un emboîtement assez imparfait, ces fluctuations font intervenir des états qui se trouvent relativement loin de la surface de Fermi : Les déviations de l'emboîtement parfait sont de l'ordre de 10K et les températures critiques pour la supraconductivité de l'ordre de 1K ou inférieures, voir plus haut. Honerkamp et al [95] ont remarqué que l'on surestime probablement les fluctuations de spin dans une telle situation quand on néglige la renormalisation de l'énergie propre. Si nous tenions compte du temps de vie fini des quasiparticules, les fluctuations faisant intervenir des états qui se trouvent loin de la surface de Fermi seraient probablement moins fortes.

4.2.2 Influence de $q_{\mathcal{P}\parallel}$

Dans cette section, nous examinons l'effet des variations du vecteur de meilleur emboîtement sur le flot de renormalisation, point qui sera important quand nous appliquons, dans le chapitre suivant, le groupe de renormalisation à un système avec plusieurs bandes au niveau de Fermi.

Comme expliqué dans la section 4.1.3, nous ne calculons le flot de renormalisation que pour les vertex avec $q_{\mathcal{C}\parallel}$ et $q_{\mathcal{P}\parallel}$ fixes, en essayant de choisir

les valeurs de $q_\parallel$ qui mènent aux contributions les plus fortes possibles dans leur canal respectif, et qui auront donc le poid le plus important dans les moyennes sur tous les $q_\parallel$ dans les autres canaux. Il est clair que $\mathbf{q}_\mathcal{C} = 0$ maximise la bulle particule-particule. Pour $\mathbf{q}_\mathcal{P}$, la situation est moins évidente. La RPA dans ce canal (section 2.3.1) montre que pour des valeurs de $t'_\parallel$ élevées, le vecteur qui optimise la bulle particule-trou n'est plus forcément $\mathbf{Q}_0 = (2k_F^{1D}, \pi/b)$. Afin de tenir compte de ce fait, nous avons calculé le flot de renormalisation avec des valeurs de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ qui maximisent la susceptibilité particule-trou du système sans interactions (voir l'équation (2.13)).

Aspects techniques

Un problème qui se pose dans un tel calcul est que la composante perpendiculaire des vecteurs du meilleur emboîtement $q_{opt\perp}$ n'est en général pas commensurable avec notre discrétisation. La procédure suivie était alors la suivante : pour une température donnée, nous avons calculé $\mathbf{q}_{opt}$, déterminé la valeur $q_{disc\perp}$ commensurable avec la discrétization la plus proche de $q_{opt\perp}$, puis calculé tous les $\mathbf{q}^l_{opt}$ pour $q^l_{opt\perp} = \frac{l2\pi}{Mb}$ entre $q_{disc\perp}$ et $\frac{\pi}{b}$, ainsi que les susceptibilités associées. Le $\mathbf{q}^l_{opt} = \mathbf{q}^{disc}_{opt}$ qui donnait la susceptibilité la plus importante était finalement retenu pour le calcul du flot de renormalisation. $\mathbf{q}^{disc}_{opt}$ dépend de la température. Pour le calcul du diagramme de phase, $\mathbf{q}_{opt}$ a été déterminé pour chaque nouvelle température, tandis que pour l'obtention des courbes $\chi(T)$, $\mathbf{q}^{disc}_{opt}$ a été fixé à sa valeur à T_c.

Diagramme de phases modifié

Le diagramme de phase qui en résulte est montré dans la Fig. 4.9, avec celui obtenu pour $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel} = 0$ superposé pour comparaison. Aux températures critiques de la transition vers l'onde de densité de spin trouvée par le groupe de renormalisation, le vecteur du meilleur emboîtement est toujours $\mathbf{Q}_0$. Dans ce régime, $q_{\mathcal{P}\parallel}$ ne dévie alors pas de $2k_F^{1D}$, et les résultats sont les mêmes que dans la section 4.2.1. La Fig. 4.9 montre l'effet de la variation de $q_{\mathcal{P}\parallel}$ sur la transition vers la supraconductivité. La température critique est augmentée à certains endroits, mais pas dans tous les cas. A partir de $t'_\perp/t_\perp = 0.06$, elle est même supprimée complètement. Ceci vient probablement de la discrétisation de $q_\perp$.

Dans les Figs. 4.10 et 4.11, on voit la comparaison entre $\mathbf{q}_{opt}(T = 8 \times 10^{-4}\ t_\perp)$, donc à basse température, et les $\mathbf{q}^{disc}_{opt}$ que nous avons utilisés. Le premier point, qui correspond à $t'_\perp/t_\perp = 0.04$, appartient encore au régime onde de densité de spin, où la température critique est plus élevée, de sorte que le vecteur du meilleur emboîtement est $\mathbf{Q}_0$, voir la section 2.3.1. Ensuite, $\mathbf{q}^{disc}_{opt}$ forme une courbe en marches d'escalier. Sur les Figs. 4.10 et 4.11, on ne voit que le premier palier parce qu'au moment où $\mathbf{q}^{disc}_{opt}$ passe au suivant, la température critique trouvée par le groupe de renormalisation s'annulle.

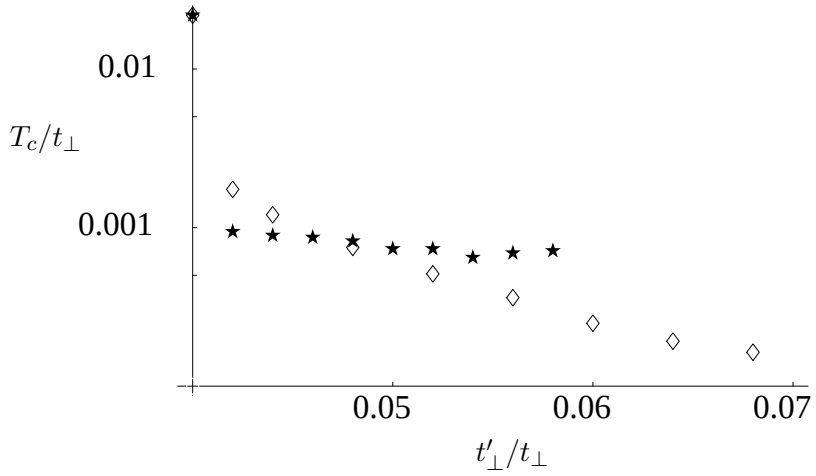


FIG. 4.9 – Températures de transition à la phase supraconductrice avec (étoiles) et sans (losanges) "optimisation" de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$, voir texte. Le premier point correspond encore à l'onde de densité de spin.

On remarque de plus que $\mathbf{q}_{opt}^{disc}$ ne correspond pas toujours au palier le plus proche de la courbe $\mathbf{q}_{opt}$, mais reste toujours du côté de $\mathbf{Q}_0$ par rapport à cette courbe. Ce comportement peut se comprendre si on considère la forme de $\chi_0(\mathbf{q})$, Fig. 2.11 : $\mathbf{q}_{opt}^{disc}$ reste toujours sur le plateau formé entre $\mathbf{Q}_0$ et $\mathbf{q}_{opt}$.

Il est évident qu'il faudrait une discrétisation beaucoup plus fine pour pouvoir vraiment profiter de l'optimisation de $q_{\mathcal{P}\parallel}$, même s'il y a effectivement une gamme de valeurs de $t'_\perp$ pour lesquelles $q_{\mathcal{P}\parallel} \neq 2k_F^{1D}$ mène à une température de transition à la supraconductivité plus élevée. Il peut apparaître surprenant que des valeurs de $\mathbf{q}_{\mathcal{P}}$ qui donnent une renormalisation plus importante dans le canal de Peierls mènent parfois à des températures de transition plus basses pour le canal de Cooper. Une explication possible pourrait être fournie par le fait que le vecteur de meilleur emboîtement varie avec la température (voir la section 2.3.1). Nous avons vu dans la section 4.1.9 que le comportement du flot de renormalisation à une coupure Λ est comparable au comportement du système à une température $T \sim \Lambda$. Dans le calcul de la susceptibilité de spin, toutes les échelles d'énergie sont intégrées. Il est très probable que le vecteur $\mathbf{q}_{opt}$ n'est favorisé par rapport à $\mathbf{Q}_0$ que par les échelles d'énergie très basses (de l'ordre de la température), pendant que les fluctuations de spin qui génèrent l'appariement d sont créées à des échelles d'énergie Λ où les contributions les plus importantes seraient encore données par $\mathbf{Q}_0$. Un calcul à base d'un vecteur $\mathbf{q} \neq \mathbf{Q}_0$ passerait alors à côté de ces

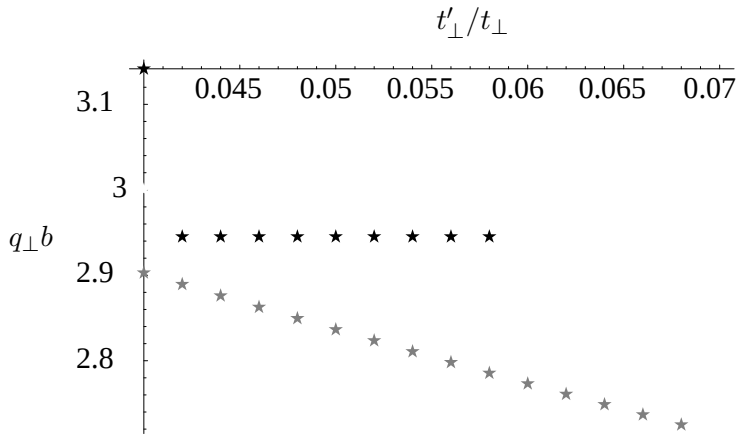


FIG. 4.10 – Comparaison des transferts de vecteur d'onde commensurables avec notre discrétisation $\mathbf{q}_{opt}^{disc}$ utilisés dans le calcul de renormalisation (étoiles foncés) avec les valeurs optimales non-commensurables $\mathbf{q}_{opt}$ (étoiles grises) à $T = 8 \times 10^{-4} t_\perp$, composante transversale.

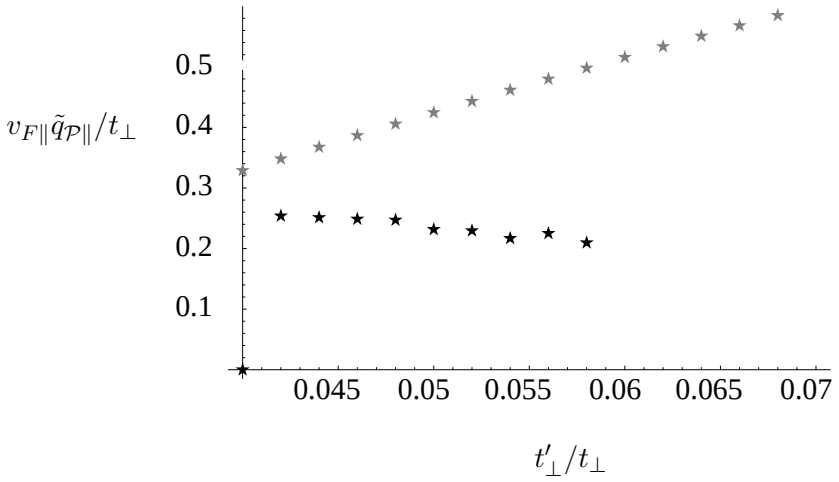


FIG. 4.11 – Comme la Fig. 4.10, mais pour la composante parallèle aux chaînes.

contributions.

En conclusion, nous avons vu que la variation de $q_{\mathcal{P}\parallel}$ peut avoir un effet considérable sur la renormalisation. Le choix du $q_{\mathcal{P}\parallel}$ qui donne la température de transition la plus élevée s'avère cependant délicat, au moins en présence d'une discrétisation de la surface de Fermi en segments. Dans une telle situaton, il faudrait en principe prendre en compte deux possibilités au moins : le vecteur de meilleur emboîtement à la température critique, et celui à une température plus élevée, inférieure à celle du passage dimensionnel, mais supérieure aux déviations de l'emboîtement parfait.

Pertinence des variables

Dans le chapitre 3.5, nous avons discuté la non-pertinence, au sens du groupe de renormalisation, de la dépendance des vertex de la distance des vecteurs d'onde de la surface de Fermi. D'un autre côté, nous venons de voir que cette distance a un effet considérable sur la renormalisation, par l'intermédiaire de $q_{\mathcal{P}\parallel}$. La question se pose comment concilier ces deux observations. La réponse a déjà été donnée dans la section 3.5 : les arguments qui prouvent la non pertinence de la dépendance en $k_\parallel$ des vertex ne s'appliquent que si tous les arguments $\mathbf{k}$ restent à l'intérieur de la bande d'énergies $[-\Lambda, \Lambda]$. Comme ceci n'est en général pas le cas pour les vertex qui interviennent dans la renormalisation pour les systèmes fermioniques (section 3.1.3), la dépendance en $k_\parallel$ peut jouer un rôle ici. Il faudrait en principe retenir toutes les différences $\Delta k_\parallel$ qui restent finies mêmes dans la limite où l'énergie tend vers 0. Ainsi, pour les systèmes bosoniques, il est en effet possible de ne considérer que $\mathbf{k} = 0$. Pour un système fermionique unidimensionnel, on peut négliger tout Δk sauf $\Delta k = 2k_F$. Pour des fermions sur une échelle (deux chaînes couplées), on doit de plus prendre en compte la distance entre les points de Fermi des deux bandes [62, 142], et pour un nombre infini de chaînes couplées, tout $|\Delta\mathbf{k}| \leq 4t_\perp / v_{F\parallel}$ peut jouer un rôle non-négligeable.

4.3 Interaction Coulombienne interchaînes et supraconductivité triplet

Même si l'interaction Coulombienne entre les porteurs est fortement écrantée dans les sels de Bechgaard, il va y avoir en général des interactions entre électrons ou trous non seulement de la même chaîne, mais aussi de chaînes premiers-voisins au moins. En ajoutant une répulsion de type g_1 (diffusion vers l'arrière) entre électrons de chaînes voisines, Duprat et Bourbonnais ont trouvé une phase supraconductrice triplet [49]. Nous avons reproduit ce résultat (section 4.3.1), et mené une étude similaire de l'effet d'une interaction g_2 entre chaînes voisines (section 4.3.2).

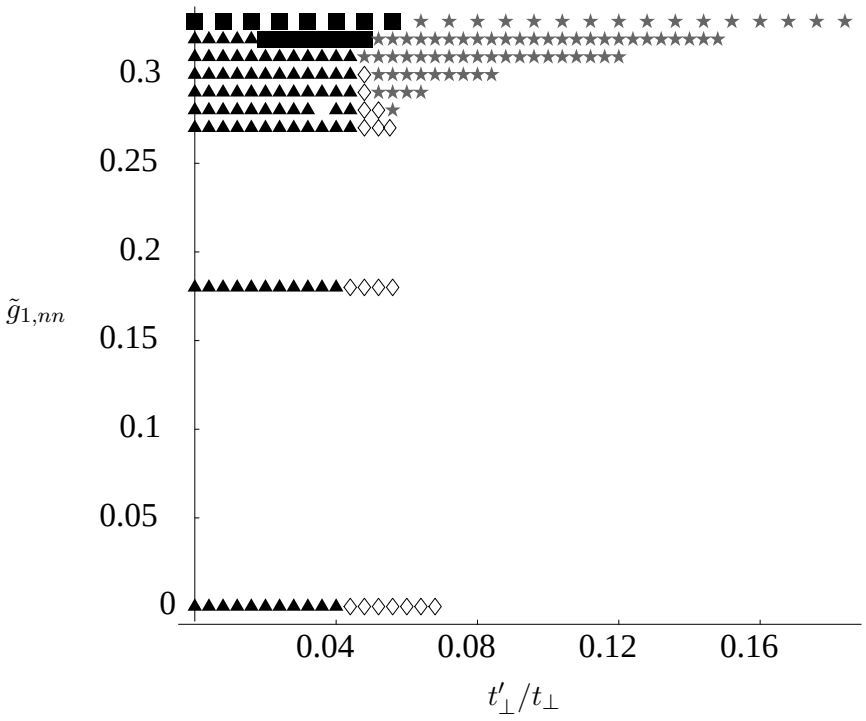


FIG. 4.12 – Phases de basse température si on varie $\tilde{g}_{1,nn}$ ($\tilde{g}_{2,nn} = 0$) : onde de densité de spin (triangles), onde de densité de charge (carrés), supraconductivité singulet avec $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp b$ (losanges), supraconductivité triplet avec $\Delta_{\mathbf{k}} \propto r \cos k_\perp b$ (étoiles).

4.3.1 Diffusion vers l'arrière sur chaînes voisines

La diffusion vers l'arrière entre électrons sur chaînes voisines s'écrit

$$
\begin{aligned}
&H_{nn,1} \\
&= \frac{1}{N_\parallel} g_{1,nn} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{k_{j\parallel}^{(\prime)}} \sum_{n=1}^{N_\perp} \delta_{k_{1'\parallel}+k_{2'\parallel},k_{2\parallel}+k_{1\parallel}} \times \\
&\qquad \times \left(R^\dagger_{k_{1'\parallel},n,\sigma} L^\dagger_{k_{2'\parallel},n+1,\sigma'} R_{k_{1\parallel},n+1,\sigma'} L_{k_{2\parallel},n,\sigma} + h.c. \right) \qquad (4.15) \\
&= \frac{2}{N_\parallel N_\perp} g_{1,nn} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}_j^{(\prime)}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1} R^\dagger_{\mathbf{k}'_1\sigma} L^\dagger_{\mathbf{k}'_2\sigma'} R_{\mathbf{k}_1\sigma'} L_{\mathbf{k}_2\sigma} \cos q_{\mathcal{P}\perp} b \ .
\end{aligned}
$$

Si on branche $g_{1,nn}$ graduellement, on obtient le diagramme de phases de la Fig. 4.12. Avec nos paramètres ($\Lambda_0 = 15t_\perp$, $\tilde{g}_1 = 0.8 = \tilde{g}_2$ pour les interactions intrachaîne), on trouve jusqu'à $\tilde{g}_{1,nn} = g_{1,nn}/\pi v_{F\parallel} = 0.27$ les mêmes phases qu'à $\tilde{g}_{1,nn} = 0$: une onde de densité de spin si l'emboîtement est suffisamment bon, de la supraconductivité singulet de symétrie "d" à emboîtement moyen et pas d'instabilité du tout pour un mauvais emboîtement. La température critique pour l'onde de densité est légèrement augméntée quand $\tilde{g}_{1,nn}$ augmente, tandis que celle de la supraconductivité singulet est diminuée ; la phase supraconductrice est ainsi supprimée plus tôt par les déviations de l'emboîtement parfait quand $\tilde{g}_{1,nn}$ croît (Fig. 4.13). Ceci change à partir de $\tilde{g}_{1,nn} \approx 0.28$, où une phase supraconductrice triplet de symétrie spatiale "f" ($\Delta_{\mathbf{k}} \propto r \cos k_\perp$, $r = \mathrm{sign} k_\parallel$) apparaît. Cette phase prend rapidement le dessus par rapport à la supraconductivité singulet d. En parallèle, les températures de transition à la supraconductivité augmentent (Fig. 4.14), et la phase associée s'élargit (en $t'_\perp$). Au-delà d'une valeur "magique" $\tilde{g}_{1,nn} \approx 0.31$, où les phases onde de densité de spin et supraconductivité triplet se touchent, l'onde de densité de spin est remplacée par une onde de densité de charge au fur et à mesure que $\tilde{g}_{1,nn}$ augmente.

Pour $\tilde{g}_{1,nn} = 0.31$, nous obtenons les températures critiques suivantes : à emboîtement parfait, $T_c \approx 0.06 \times t_\perp \sim 18$K si $t_\perp \sim 300$K. La température critique maximale pour la supraconductivité (f dans ce cas) que nous obtenons est $T_c \approx 0.002 \times t_\perp \sim 0.7$K. L'écart entre les deux valeurs est donc devenu encore plus grand que dans le cas sans interactions interchaînes (section 4.2.1), mais on rappelle que dans nos calculs, nous faisons varier uniquement $t'_\perp$, tandis que la pression hydrostatique joue aussi sur les autres paramètres ($t_\perp$, Λ_0, $\tilde{g}_j$) du Hamiltonien.

En ce qui concerne le méchanisme qui mène au diagramme de phases Fig. 4.12, remarquons que déjà dans le régime unidimensionnel, l'interaction $g_{1,nn}$ renforce les fluctuations de charge, comme on peut le voir aisément si on écrit les équations de renormalisation pour $t_\perp = 0$. Les relations entre les paramétrisations charge-spin et singulet-triplet, équations (2.15) et (2.16),

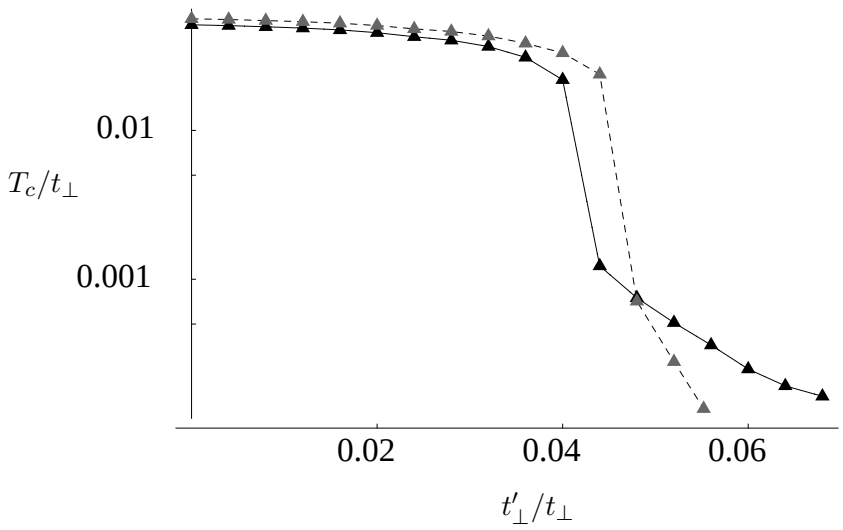


FIG. 4.13 – Températures critiques pour des petites valeurs de $\tilde{g}_{1,nn}$, avant l'apparition des phases triplet ou onde de densité de charge. La ligne noire correspond à $\tilde{g}_{1,nn} = 0.0$ et la ligne pointillée à $\tilde{g}_{1,nn} = 0.27$.

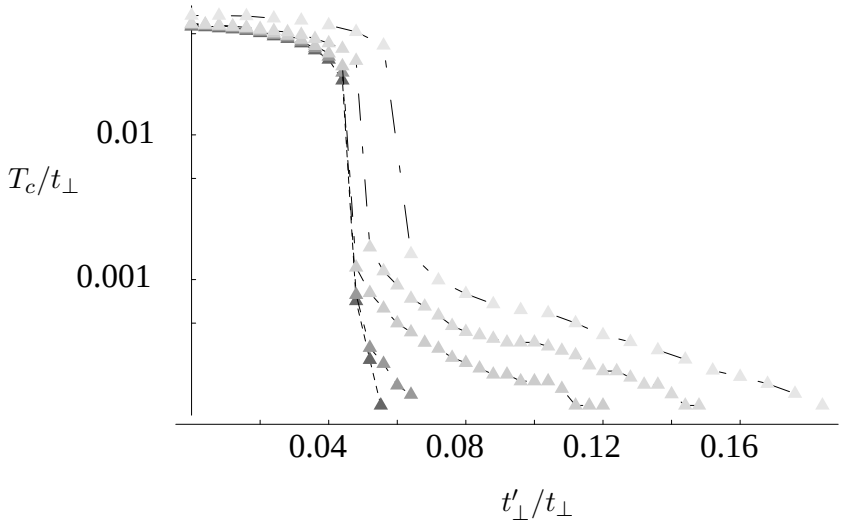


FIG. 4.14 – Températures critiques pour (du plus foncé au plus clair, et de la ligne pointillée aux traits de plus en plus espacés) : $\tilde{g}_{1,nn} = 0.27$, 0.28, 0.29, 0.30, 0.31, 0.32.

montrent ensuite que les fluctuations de charge diminuent les corrélations singulet, mais augmentent celles de symétrie triplet. De plus, l'interaction nue (4.15) est elle-même déjà favorable à un appariement triplet f : si on la réécrit dans la paramétrisation singulet-triplet pour des interactions entre paires de moment total nul, on obtient

$$g_{t,nn}(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp) = 2g_{1,nn}\big(\cos k'_\perp b \cos k_\perp - \sin k'_\perp b \sin k_\perp\big) \ ,$$

et la même contribution, mais de signe opposé, pour g_s. L'appariement singulet d n'est donc pas seulement affecté par les fluctuations de charge induites par $g_{1,nn}$, mais aussi directement par la valeur de $g_{1,nn}$.

4.3.2 Diffusion vers l'avant

La diffusion vers l'avant interchaîne est décrite par

$$\begin{aligned} H_{nn,2} \\ &= \frac{1}{N_\parallel} g_{2,nn} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{k_{j\parallel}^{(\prime)}} \sum_{n=1}^{N_\perp} \delta_{k_{1'\parallel}+k_{2'\parallel},k_{2\parallel}+k_{1\parallel}} \times \\ &\qquad \times \big(R^\dagger_{k_{1'\parallel},n,\sigma} L^\dagger_{k_{2'\parallel},n+1,\sigma'} L_{k_{2\parallel},n+1,\sigma'} R_{k_{1\parallel},n,\sigma} + h.c.\big) \qquad (4.16) \\ &= \frac{2}{N_\parallel N_\perp} g_{2,nn} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}_j^{(\prime)}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1} R^\dagger_{\mathbf{k}'_1\sigma} L^\dagger_{\mathbf{k}'_2\sigma'} R_{\mathbf{k}_1\sigma'} L_{\mathbf{k}_2\sigma} \cos q_{\mathcal{L}\perp} b \end{aligned}$$

avec $q_\mathcal{L} = k'_2 - k_2$. Comme ce terme fait intervenir le transfert de vecteur d'onde pertinent pour le canal de Landau, $q_\mathcal{L}$, il ne peut pas être traité dans l'approximation des équations de renormalisation de Duprat et Bourbonnais, voir la section 4.1.7. $g_{2,nn}$ s'ajoute à l'interaction entre paires singulets avec moment total nul, $g_s(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$, sous forme d'un terme proportionnel à

$$-\cos k'_\perp \cos k_\perp - \sin k'_\perp \sin k_\perp$$

(de même pour des paires triplets). La contribution directe de $g_{2,nn}$ à g_s s'oppose donc à celle qui provient des fluctuations de spin, voir la série (4.14), de sorte que l'appariement premiers voisins est supprimé. La divergence correspondant à ce terme est donc de plus en plus supprimée quand on augmente $g_{2,nn}$, et c'est le deuxième terme de la série (4.14), qui correspond à un appariement seconds-voisins, qui prend le relais. A cause du changement de signe entre n pair et n impair dans la somme en (4.14), c'est un terme de la forme $r \sin 2k_\perp b$, où $r = \text{sign } k_\parallel$ est nécessaire pour conserver la symétrie singulet. Comme ce terme n'est pas affecté par $g_{2,nn}$, la phase associée est stable même pour des grandes valeurs de ce paramètre. D'un autre côté, elle

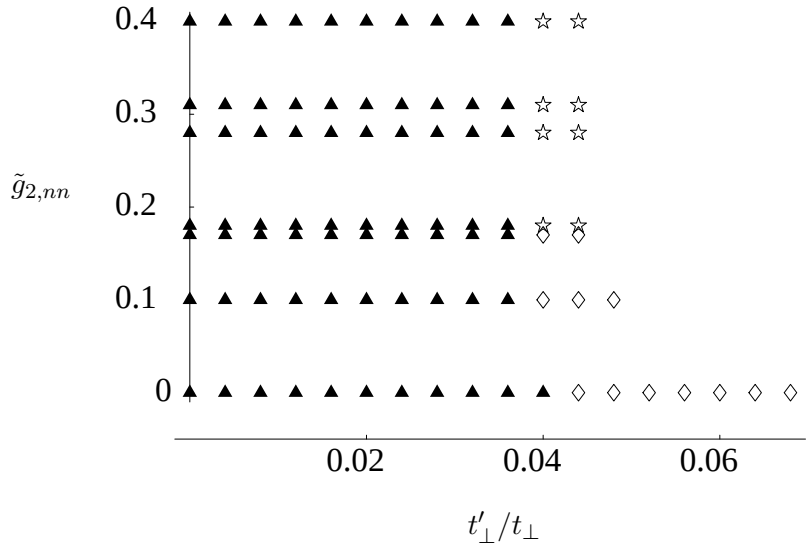


FIG. 4.15 – Phases de basse température si on varie $\tilde{g}_{2,nn}$ ($\tilde{g}_{1,nn} = 0$) : onde de densité de spin (triangles), supraconductivité singulet avec $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp b$ (losanges), supraconductivité singulet avec $\Delta_{\mathbf{k}} \propto r \sin 2k_\perp b$ (étoiles).

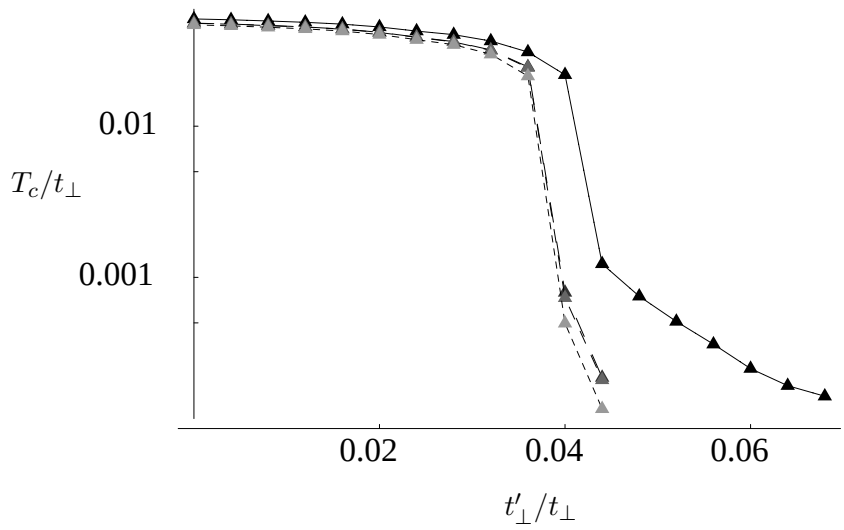


FIG. 4.16 – Températures critiques pour (du plus foncé au plus clair) : $\tilde{g}_{2,nn} =$ 0.0, 0.17, 0.18, 0.31.

est plus susceptible à la suppression des fluctuations de spin par les déviations de l'emboîtement parfait, parce que la composante de période $2b$ de ces fluctuations n'est pas très importante dès le départ.

Ce scénario est bien celui que l'on trouve dans les calculs de renormalisation, comme le montrent les Figs. 4.15 et 4.16. La première valeur pour laquelle on obtient un appariement avec paramètre d'ordre $\Delta_{\mathbf{k}} \propto r \ \sin 2k_{\perp} b$ est $\tilde{g}_{2,nn} \approx 0.18$. La température critique pour l'onde de densité de spin à emboîtement parfait n'est pas modifiée par rapport à sa valeur pour une interaction purement intrachaîne, $T_c^0 \sim 15\text{K}$. La température critique maximale pour la supraconductivité est légèrement plus basse ici que pour l'appariement sur chaînes voisines. Nous obtenons $T_{c,SC}^{max} \sim 0.4\text{K}$ si $\tilde{g}_{2,nn} \approx 0.18$.

4.4 Conclusions

Nous avons étudié les instabilités de basse température d'un système de fermions en interaction quasi-unidimensionnel, qui modélise les sels de Bechgaard sans transition structurale. Pour des hautes échelles d'énergie, le flot de renormalisation ressemble à celui d'un système purement unidimensionnel, avec notamment un fort couplage des canaux de corrélations particule-particule et particule-trou. Pour des échelles d'énergie plus basses, $\Lambda \leq t_\perp$, les canaux sont moins couplés, ce qui permet aux fluctuations de spin de se développer plus fortement et, si l'emboîtement est suffisamment bon, de donner lieu à une divergence du flot de renormalisation, que nous interprétons comme la signature d'une transition de phase de second ordre à une onde de densité de spin. Quand l'emboîtement est moins bon, les corrélations de spin cessent d'augmenter pour des échelles d'énergie en-dessous de $\Lambda \approx t'_\perp$. Si ces corrélations sont déjà suffisamment fortes à ce point, elles génèrent des corrélations de paires de particules, qui mènent à une transition supraconductrice, avec des paires de Cooper singulet d. Nous avons vu que l'inclusion d'une interaction entre électrons, ou trous, de chaînes voisines, mène à des fluctuations de charge plus importantes que dans le cas d'une interaction purement intrachaîne, ce qui donne lieu à une supraconductivité triplet. Un tel scénario est obtenu pourvu que l'interaction entre chaînes premiers-voisins soit restreinte à la diffusion vers l'arrière, g_1. Si on la restreint, par contre, à g_2, l'appariement sur chaînes voisines est supprimé, et la supraconductivité – singulet dans ce cas – se produit pour une gamme relativement étroite seulement de valeurs de $t'_\perp$, avec appariement sur les chaînes deuxièmes-voisins. Nous avons aussi étudié l'influence de la dépendance des fonctions renormalisées avec la distance des états à la surface de Fermi, c'est à dire, pour des systèmes quasi-unidimensionnels, la dépendance en $k_\parallel$. Cette dépendance s'est avérée non négligeable.

Nos résultats confirment l'excellent accord des calculs basés sur le groupe de renormalisation avec le diagramme de phases expérimental des sels de Bechgaard, dans toute sa diversité. Cette méthode reproduit la physique unidimensionnelle et le passage dimensionnel ; on retrouve les fluctuations de spin ainsi que les instabilités antiferromagnétique et supraconductrice. L'inclusion de processus Umklapp permet de plus de retrouver la localisation de Mott observée dans les sels de Fabre [26, 48, 31]. Ainsi, le groupe de renormalisation donne une description globale du diagramme de phase température-pression de ces matériaux.

En particulier, cette approche est l'une des seules à ce jour qui permet d'obtenir des phases antiferromagnétique et supraconductrice *triplet* dans un même diagramme de phases et presque côte à côte, même si les résultats obtenus pour l'instant sont restreints à une gamme relativement petite de valeurs pour les diverses interactions possibles. Il faut cependant rappeler que la comparaison du diagramme de phases Fig. 4.12 avec les expériences n'est

pas évidente parce que la pression hydrostatique n'influence pas uniquement la qualité de l'emboîtement, mais aussi la largeur de bande, la vitesse de Fermi et les interactions. Il est donc bien possible qu'une augmentation de la pression correspond à un déplacement en diagonale dans le diagramme Fig. 4.12. La fenêtre de valeurs de $g_{1,nn}$ dans laquelle on obtiendrait, et une onde de densité de spin, et une supraconductivité triplet ne serait alors pas aussi étroite qu'elle apparaît à première vue. Remarquons également que, selon le calcul présenté ici, il y a une phase de supraconductivité singulet entre les deux dans presque tous les cas. Il pourrait être très intéressant d'étudier cette question expérimentalement. En ce qui concerne les mesures sous champ magnétique, il faudrait de plus prendre en compte le scénario suivant, proposé par Shimahara [178] : même pour des valeurs de $\tilde{g}_{1,nn} < 0.27$, les corrélations triplet sont déjà appréciables, ainsi que les fluctuations de charge. L'application d'un champ magnétique, qui supprimerait la supraconductivité singulet, pourrait permettre à la supraconductivité triplet de prendre la place. Ce mécanisme mènerait aussi à un élargissement effectif de la fenêtre "onde de densité de spin + supraconductivité triplet".

Dans des calculs de Monte Carlo [114] et en approximation d'échange de fluctuations (FLEX) [145], de la supraconductivité triplet a été obtenue en prenant en compte des interactions premiers voisins *intrachaîne*. Il serait intéressant de vérifier si le groupe de renormalisation donne le même résultat, et si une telle interaction permet d'élargir la partie "triplet" du diagramme de phases théorique. Une autre possibilité de favoriser la supraconductivité triplet est de prendre en compte une interaction avec anisotropie de spin, comme elle peut être induite par les interactions dipôle-dipôle ou un couplage spin-orbite. Cette possibilité a été étudiée par Giamarchi et Schulz [78]. Ils trouvent également des phases voisines antiferromagnétique et supraconductrice triplet, en traitant la partie interchaînes du Hamiltonien en l'approximation du champ moyen, ce qui est correct s'il n'y a pas de passage dimensionnel. Le caractère bi- ou même tridimensionnel des sels de Bechgaard à basse température, notamment les effets de l'emboîtement, sont mieux pris en compte dans une approche basée sur le groupe de renormalisation. Il serait donc très intéressant d'étendre nos calculs à des interactions plus générales, comme celles considérées par Giamarchi et Schulz.

Chapitre 5

Antiferromagnétisme et supraconductivité en présence du potentiel anionique

Dans ce chapitre, nous appliquons le groupe de renormalisation à un système avec un potentiel additionnel, comme il en est créé un par l'ordre anionique dans $(TMTSF)_2ClO_4$. Nous diagonalisons d'abord le Hamiltonien libre (section 5.1). Les instabilités de spin peuvent être traitées en RPA (section 5.2). Nous écrivons les équations de renormalisation dans la section 5.3. Leur solution numérique donne le diagramme de phases discuté dans la section 5.4.

5.1 Diagonalisation de la partie H_0 à une particule du Hamiltonien

Si on supprime la dépendance en spin, le Hamiltonien est donné par

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{k_\parallel} H_{k_\parallel} \ , \\ H_{k_\parallel} &= \epsilon_\parallel \sum_{l=1}^{N_\perp} c^\dagger_{k_\parallel,l} c_{k_\parallel,l} \\ &\quad - \sum_{n>0} t_{n\perp} (c^\dagger_{k_\parallel,l} c_{k_\parallel,l+n} + h.c.) \\ &\quad + V \sum_{l=1}^{N_\perp} (-1)^l c^\dagger_{k_\parallel,l} c_{k_\parallel,l} \ , \\ \epsilon_\parallel(r,k_\parallel) &= v_{F\parallel}(rk_\parallel - k_F^{1D}) \ . \end{aligned}$$

Dû au potentiel périodique transversal $\pm V$, la maille contient deux sites. On obtient alors deux bandes dans une zone de Brioullin réduite à

$$k_\perp \in]-\frac{\pi}{2b}, \frac{\pi}{2b}] \ ,$$

où b est la distance entre deux chaînes. Définissons donc

$$c_{\mathbf{k},\vartheta=o/\pi} = \frac{1}{\sqrt{N_\perp}} \sum_{l=1}^{N_\perp} e^{-i(k_\perp b+\vartheta)l} c_{k_\parallel,l} \ .$$

Le Hamiltonien devient

$$H_{k_\parallel} = \sum_{k_\perp} H_{\mathbf{k}} \ ,$$

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{array}{c} (c^\dagger_{\mathbf{k},o}, \quad c^\dagger_{\mathbf{k},\pi}) \end{array} \left(\begin{array}{cc} \epsilon_\parallel + t_\perp^{pair} + t_\perp^{imp} & V \\ V & \epsilon_\parallel + t_\perp^{pair} - t_\perp^{imp} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} c_{\mathbf{k},o} \\ c_{\mathbf{k},\pi} \end{array} \right) ,$$

$$\begin{aligned} t_\perp^{pair/imp}(k_\perp) &= \sum_{\substack{n>0 \ pair/ \\ impair}} \epsilon_{n\perp}(k_\perp) \ , \\ \epsilon_{n\perp}(k_\perp) &= -2t_{n\perp}\cos(nk_\perp b) \ . \end{aligned}$$

La diagonalisation donne deux bandes ($m = \pm 1$). Les énergies propres sont

$$\begin{aligned} \epsilon(r, k_\parallel, k_\perp, m) &= \epsilon_\parallel(r, k_\parallel) + \epsilon_\perp(k_\perp, m) \\ \epsilon_\perp(k_\perp, m) &= t_\perp^{pair}(k_\perp) + m\sqrt{t_\perp^{imp}(k_\perp)^2 + V^2}. \end{aligned}$$

Les quatres nappes de la surface de Fermi sont décrites par

$$rk_{F\parallel}(k_\perp, m) = r(k_F^{1D} - \frac{1}{v_{F\parallel}}\epsilon_\perp(k_\perp, m)) \ (r = \pm).$$

Des exemples sont tracés à la Fig. 2.17. Les états propres sont

$$c_{\mathbf{k},m} = \sum_\vartheta \gamma_{k_\perp}^{m,\vartheta} c_{\mathbf{k},\vartheta} \quad \text{avec} \tag{5.1}$$

$$\gamma_{k_\perp}^{-,o} = \gamma_{k_\perp}^{+,\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1-\alpha_{k_\perp})^{\frac{1}{2}} \ , \tag{5.2}$$

$$\gamma_{k_\perp}^{+,o} = -\gamma_{k_\perp}^{-,\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\alpha_{k_\perp})^{\frac{1}{2}} \ , \tag{5.3}$$

$$\alpha_{k_\perp} = \frac{t_\perp^{imp}(k_\perp)}{\sqrt{t_\perp^{imp}(k_\perp)^2 + V^2}}. \tag{5.4}$$

On constate que pour les fonctions d'onde correspondantes,

$$\psi_{\mathbf{k},m}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\vartheta \gamma_{k_\perp}^{m,\vartheta} e^{ik_\parallel x_\parallel} e^{i(k_\perp + \frac{\vartheta}{b})x_\perp},$$

on obtient aux bords de la première zone de Brioullin

$$\lim_{k_\perp \downarrow -\frac{\pi}{2b}} \psi_{\mathbf{k},m}(\mathbf{x}) = m\psi_{\mathbf{k},m}(\mathbf{x})\Big|_{k_\perp=+\frac{\pi}{2b}}, \tag{5.5}$$

"discontinuité" que nous retrouverons dans les expressions pour les paramètres d'ordre supraconducteurs. Si $V = 0$, $\alpha_{k_\perp} = -1$, et on retrouve les ondes planes du système à une bande. Dans la limite opposée, $V/t_\perp \to \infty$, $\alpha_{k_\perp} \to 0$. On obtient donc aussi des ondes planes dans un schéma de zone réduite, mais maintenant localisées sur les chaînes impaires si $m = -$ et paires si $m = +$.

5.2 Les phases antiferromagnétiques

Les phases onde de densité de spin dans un système quasi-unidimensionnel avec potentiel périodique transverse ont été étudiées en RPA par Zanchi et Bjeliš [202], et en RPA ainsi qu'un développement de Ginzburg-Landau par Sengupta et Dupuis [173]. Dans cette section, nous allons reproduire les résultats de la RPA.

Le couplage entre un champ externe $h_{\mathbf{q}}$ de modulation transversale $2\pi/q_\perp$ et les états propres de H_0, indicés par les nombres quantiques $m, k_\perp$, est décrit par des fonctions $f((m', k'_\perp), (m, k_\perp); q_\perp)$ (où nous avons pour l'instant supprimé la dépendance en $k_\parallel$ et en spin de toutes les fonctions). Les valeurs possibles de $k_\perp$ sont données par la largeur $2b$ de la maille élémentaire et donc restreintes à $]-\frac{\pi}{2b}, \frac{\pi}{2b}]$. D'un autre côté, grâce à la structure interne de la maille, on distingue bien, expérimentalement, deux ondes planes $q_\perp$ et $(q_\perp + \frac{\pi}{b})$, de sorte qu'on considérera des valeurs de

$$q_\perp \in [0, \frac{2\pi}{b}[\ .$$

Comme les états propres de nombres quantiques $(m, k_\perp)$ sont des superpositions des ondes planes de modulation $k_\perp$ et $(k_\perp + \frac{\pi}{b})$, un champ externe h de modulation transverse $q_\perp$ peut générer des excitations de modulation $q_\perp + \frac{\pi}{b}$, de sorte que les susceptibilités ne sont plus diagonales en $q_\perp$.

5.2.1 Susceptibilités libres

La susceptibilité de spin $\chi_0^{(S^-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; \tau' - \tau)$ (voir la section 2.3.1) n'est plus invariante par translation, de sorte que sa transformée de Fourier dépend de $\mathbf{q}'$ et $\mathbf{q}$,

$$\chi_0^{(S^-)}(\mathbf{q}', \mathbf{q}; i\omega_0) := \\ \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_0(\tau'-\tau)} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}'} e^{-i\mathbf{q}'.\mathbf{x}'} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{q}.\mathbf{x}} \chi_0^{(S^-)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; \tau' - \tau) \ . \tag{5.6}$$

Le calcul est fait dans [173] (voir aussi [202]). Le cas des corrélations particule-particule est traité dans l'annexe D ; les deux calculs sont analogues. Pour le canal particule-trou, on obtient

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(S^-)}(\mathbf{q}',\mathbf{q};i\omega_0) = \\
&\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\sum_{m'm}\sum_{\vartheta'\vartheta}\delta_{q'_\parallel,q_\parallel}\delta_{q_\parallel,k'_\parallel-k_\parallel}\overline{\chi}_{OD}^{m'm}(\mathbf{k}',\mathbf{k};\omega_0)\times \\
&\quad\times\Big[\Big(\gamma_{k'_\perp}^{m'\vartheta'}\Big)^*\delta_{q'_\perp,k'_\perp-k_\perp}+\Big(\gamma_{k'_\perp}^{m'(\vartheta'+\pi)}\Big)^*\delta_{q'_\perp,k'_\perp-k_\perp+\frac{\pi}{b}}\Big]\Big(\gamma_{k_\perp}^{m\vartheta'}\Big)\times \\
&\quad\times\Big[\gamma_{k'_\perp}^{m'\vartheta}\delta_{q_\perp,k'_\perp-k_\perp}+\gamma_{k'_\perp}^{m'(\vartheta+\pi)}\delta_{q_\perp,k'_\perp-k_\perp+\frac{\pi}{b}}\Big]\Big(\gamma_{k_\perp}^{m\vartheta}\Big)^*
\end{aligned} \tag{5.7}$$

avec

$$\overline{\chi}_{OD}^{m'm}(\mathbf{k}',\mathbf{k};\omega_0) := -T\sum_\omega \frac{1}{i\omega-\epsilon_{R,\mathbf{k}'}^{m'}}\frac{1}{i(\omega-\omega_0)-\epsilon_{L,\mathbf{k}}^{m}}\ .$$

Dans l'équation (5.7), comme dans tout ce chapitre, les $k_\perp$ sont restreints à la première zone de Brioullin, $k_\perp \in]-\frac{\pi}{2b},\frac{\pi}{2b}]$. Si nous faisons ici une exception, nous pouvons écrire le résultat (5.7) d'une façon plus explicite :

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(S^-)}(\mathbf{q},\mathbf{q};i\omega_0) = \\
&\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\Big[\big(\overline{\chi}_{OD}^{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\overline{\chi}_{OD}^{--}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+o}+\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big)^2 \\
&\qquad+\big(\overline{\chi}_{OD}^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\overline{\chi}_{OD}^{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}-\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}\gamma_{k_\perp}^{+o}\big)^2\Big]\Big|_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}}\ ,
\end{aligned} \tag{5.8}$$

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(S^-)}(\mathbf{q},\mathbf{q}\pm\mathbf{P};i\omega_0) = \\
&\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\Big[\big(\overline{\chi}_{OD}^{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})-\overline{\chi}_{OD}^{--}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}+\gamma_{k_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big) \\
&\qquad+\big(\overline{\chi}_{OD}^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{k})-\overline{\chi}_{OD}^{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}-\gamma_{k_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big)\Big]\Big|_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}}\ ,
\end{aligned} \tag{5.9}$$

où on autorise $k'_\perp$ à varier entre $-\pi/b$ et π/b. Rappelons aussi la définition $\mathbf{P}=(0,\pi/b)$. L'intégration sur $k_\parallel$ donne

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N_\parallel}\sum_{k_\parallel}\overline{\chi}_{OD}^{m'm}(\mathbf{k}',\mathbf{k};0)\big|_{\mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}} &= \frac{a}{2\pi v_{F\parallel}}\Big\{\ln\frac{2\gamma\Lambda_0}{\pi T}+ \\
&+\Psi\big(\frac{1}{2}\big)-\mathrm{Re}\Psi\big[\frac{1}{2}+i\frac{1}{4\pi T}\big(v_{F\parallel}\tilde{q}_\parallel+\epsilon_\perp^m(k_\perp)+\epsilon_\perp^{m'}(k'_\perp)\big)\big]\Big\}\ ,
\end{aligned} \tag{5.10}$$

voir aussi l'équation (2.13). L'intégrale de $k_\perp$ doit être faite numériquement.

5.2.2 RPA matricielle

Dans le calcul de la susceptibilité de spin en RPA, nous devons prendre en compte le fait que les fluctuations à $\mathbf{q}$ et à $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$ sont couplées. A partir de l'équation

$$\chi(\mathbf{q}',\mathbf{q}) = \chi_0(\mathbf{q}',\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{q}''} \chi_0(\mathbf{q}',\mathbf{q}'') g_S \chi(\mathbf{q}'',\mathbf{q}) \ ,$$

on obtient

$$\begin{aligned}
\chi(\mathbf{q},\mathbf{q}) &= \Big\{ \chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q})\big(1 - g_S\chi_0(\mathbf{q}+\mathbf{P},\mathbf{q}+\mathbf{P})\big) \\
&\quad + g_S\big(\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})\big)^2 \Big\}/D \ , \\
\chi(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P}) &= \chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})/D \ , \\
D &= \big(1 - g_S\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q})\big)\big(1 - g_S\chi_0(\mathbf{q}+\mathbf{P},\mathbf{q}+\mathbf{P})\big) \\
&\quad - g_S^2\big(\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})\big)^2 \ .
\end{aligned}$$

Le critère de Stoner pour une transition à une phase onde de densité de spin est

$$D = 0 \ . \tag{5.11}$$

On remarque que sous cette condition, $\chi(\mathbf{q},\mathbf{q})$, $\chi(\mathbf{q}+\mathbf{P},\mathbf{q}+\mathbf{P})$ et $\chi(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})$ divergent tous les trois, sauf si $\chi_0(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P}) = 0$, comme c'est le cas pour $V = 0$. Toute instabilité de spin fera donc forcément intervenir au moins deux composantes de Fourier, $\mathbf{q}$ et $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$, à la fois.

La solution numérique de (5.11) donne le diagramme de phases Fig. 5.1. A faible V, on retrouve l'instabilité de spin du système sans ordre anionique, qui correspond ici à un vecteur d'emboîtement $\mathbf{Q}_0' \approx (2k_F^{1D}, 0)$ interbandes, voir aussi la discussion dans 2.4. Le paramètre d'ordre dans l'espace direct, $\langle c_\downarrow^\dagger(x) c_\uparrow(x)\rangle$ (voir la section 2.3.1), est intrachaîne. Plus V est grand, plus les états appartenant aux bandes $m = -$ et $m = +$ sont localisés sur une des deux familles de chaînes (paires et impaires) ; le recouvrement entre deux états de bandes différentes sur une chaîne donnée devient alors de plus en plus petit quand V augmente. Ainsi, l'onde de densité de spin interbandes est supprimée à grand V. En échange, dès que l'emboîtement *intrabande* est suffisamment bon, ce qui arrive à partir de $V \gtrsim t_\perp$, des ondes de densité de spin peuvent s'établir dans chacune des deux bandes. Les vecteurs de meilleur emboîtement sont alors $\mathbf{Q}_\pm \approx (2k_F^{1D} \mp 2V/v_{F\parallel}, \pi/2b)$. On remarque aussi que, grâce à $Q_{\pm,\perp} = \pi/2b$, cet emboîtement intrabande n'est pas affecté par le terme de saut vers une chaîne seconds-voisins, tandis que l'onde de densité à $\mathbf{Q}_0'$ l'est, bien sûr. Dans le régime où l'emboîtement interbandes est encore suffisamment bon, les trois ondes de densité, avec modulations $\mathbf{Q}_0$, $\mathbf{Q}_-$ et $\mathbf{Q}_+$, sont a priori possibles, comme le montre la Fig. 5.1 pour $t_\perp' = 0$.

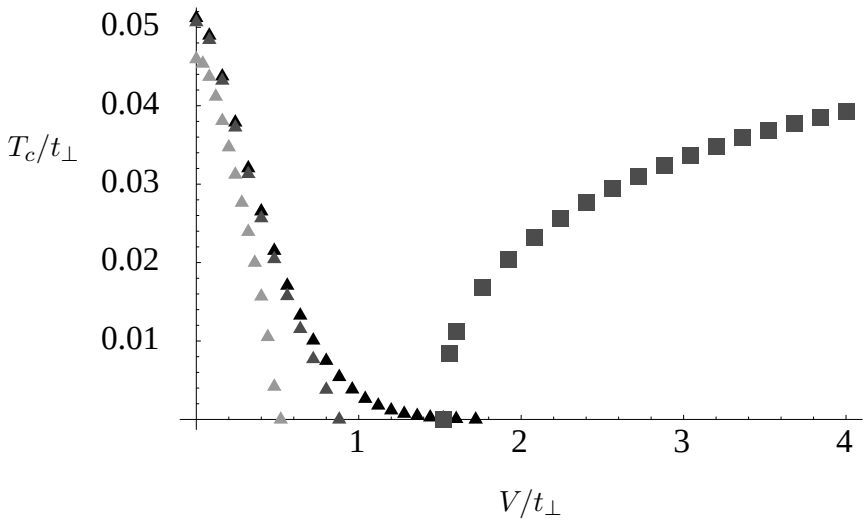


FIG. 5.1 – Températures critiques en fonction de $V/t_\perp$ avec $t'_\perp/t_\perp = 0$ (en noir), 0.008 (en gris foncé) et 0.024 (en gris clair), en RPA. L'onde de densité de spin avec modulation $q_\perp = \pi/b$ est symbolisée par des triangles, celle avec modulation $q_\perp = \pi/2b$ par des carrés. La température critique de cette dernière ne dépend pas de $t'_\perp$; nous avons donc uniquement tracé le résultat pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$.

Les phases avec $\mathbf{Q}_+$ et $\mathbf{Q}_-$ ont la même température de transition. Cette dégénérescence est levée si on inclût un terme de saut vers une chaîne troisièmes-voisins [202, 173]. Sengupta et Dupuis [173] ont cependant montré, à l'aide d'un développement de Ginzburg-Landau de l'énergie libre, que les deux phases coexistent toujours à des températures suffisamment basses.

Les composantes parallèles aux chaînes des vecteurs de meilleur emboîtement sont tracées aux Figs. 5.2 et 5.3. Les composantes perpendiculaires restent, à $T = T_c$, π/b, ou $\pi/2b$, selon le cas : les ondes de densité sont toujours commensurables avec la périodicité dans la direction b ($Q_\perp^{opt} = \pi/b$ ou $\pi/2b$ pourvu que $T_c > 0$). Il est aussi possible de calculer les amplitudes et phases relatives des différentes composantes de Fourier des ordres onde de densité de spin qui s'établissent [202, 173]. Quelques résultats exemplaires sont schématisés à la Fig. 5.4.

Comme pour $V \gg t_\perp$ l'emboîtement intrabande devient de plus en plus parfait, la température critique de la phase associée tend vers T_c^0 (la température critique du système à une bande avec emboîtement parfait, voir la section 2.3.1). Ce résultat vient cependant du fait que la RPA ne voit l'unidimensionnalisation par le potentiel anionique. La température critique pour cette phase obtenue dans les calculs de renormalisation est très différente, voir la section 5.4.1.

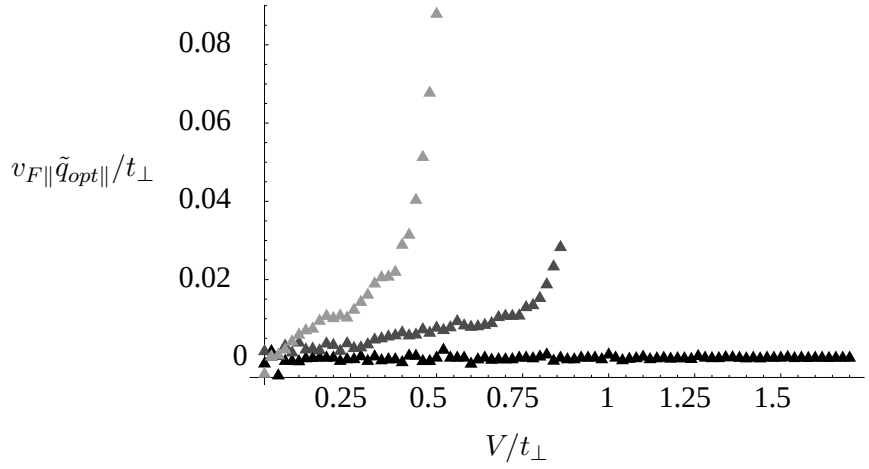


FIG. 5.2 – $\tilde{q}_{opt\|}$ en fonction de $V/t_\perp$ avec $t'_\perp/t_\perp = 0$ (en noir), 0.008 (en gris foncé) et 0.024 (en gris clair), en RPA, pour V faible. La valeur optimale de $q_\perp$ est toujours π/b.

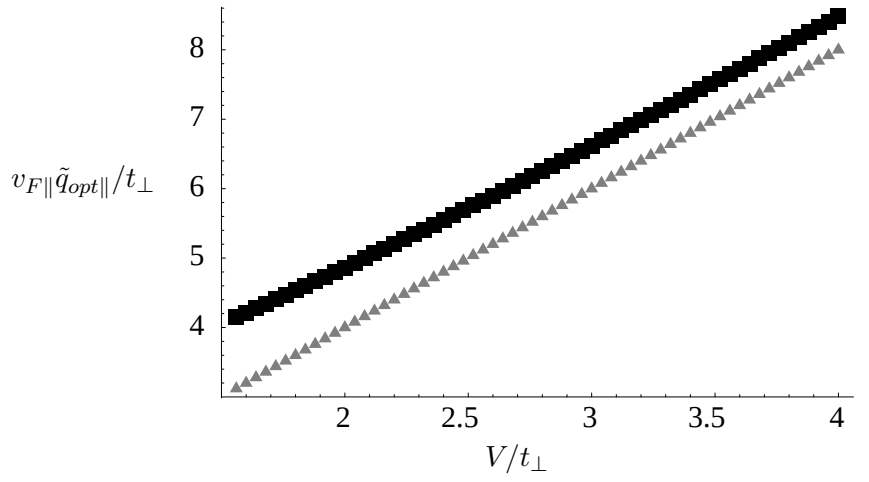


FIG. 5.3 – La composante parallèle du vecteur de meilleur emboîtement dans la bande $m = -$, $Q_\|^- - 2k_F^{1D}$ en fonction de $V/t_\perp$ avec $t'_\perp/t_\perp = 0.024$, en RPA, pour V fort (carrés). Les triangles indiquent la ligne $v_{F\|}\tilde{q}_\| = 2V$ pour comparaison. La valeur optimale de $q_\perp$ est toujours $\pi/2b$.

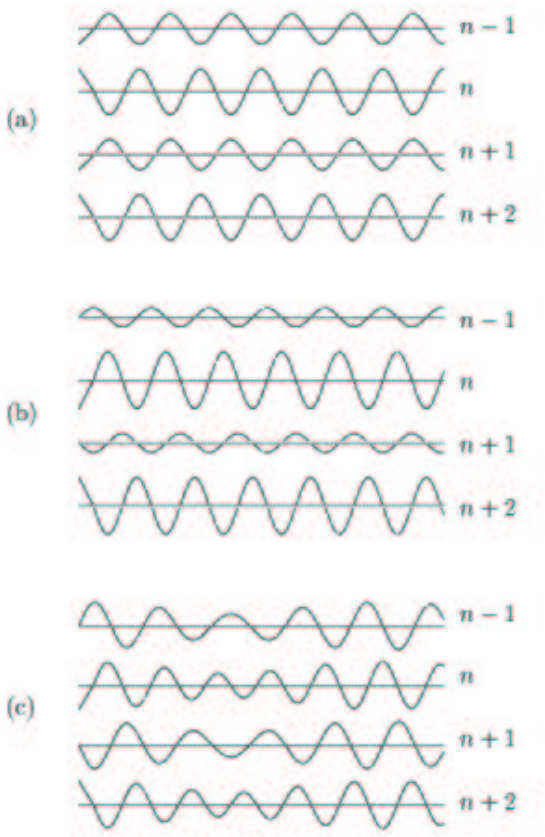


FIG. 5.4 – Modulation de spin dans les différentes phases onde de densité de spin (n est l'indice de la chaîne) : (a) V faible, ODS interbande. (b) V fort, une seule ODS intrabande. (c) V fort, à température plus basse, où deux ondes de densité de spin coexistent. D'après [173].

5.3 Renormalisation pour un système à deux bandes

5.3.1 Hamiltonien dans la base propre de H_0

Interaction

Notre procédure de renormalisation est basée sur l'ordre en énergie des états propres de l'Hamiltonien libre. Il faut donc qu'on exprime toutes les autres parties de l'Hamiltonien en termes de cette base aussi. Le terme d'interaction devient

$$H_I = \frac{1}{N} \sum_{\sigma_j k_{\|j} k_{\perp j} m_j} \delta_{k'_{\|1}+k'_{\|2}-k_{\|2}-k_{\|1},0}\, \delta_{k'_{\perp 1}+k'_{\perp 2}-k_{\perp 2}-k_{\perp 1},0 \bmod \frac{\pi}{b}} \times$$
$$\times\, g(\{(\mathbf{k}_j, m_j, \sigma_j)\}) R^\dagger_{\sigma'_1 k'_{\|1} k'_{\perp 1} m'_1} L^\dagger_{\sigma'_2 k'_{\|2} k'_{\perp 2} m'_2} L_{\sigma_2 k_{\|2} k_{\perp 2} m_2} R_{\sigma_1 k_{\|1} k_{\perp 1} m_1}. \quad (5.12)$$

(Rappelons la définition $c_{\sigma \mathbf{k} m} = R_{\sigma \mathbf{k} m}$ si $k_\| > 0$, et $c_{\sigma \mathbf{k} m} = L_{\sigma \mathbf{k} m}$ si $k_\| < 0$.) On voit que le fait que la maille fasse deux fois le pas de réseau transverse b introduit des processus additionnels avec Umklapp transversal par rapport aux systèmes avec un seul site par maille. La fonction $g(\{(\mathbf{k}_j, m_j, \sigma_j)\})$ est donnée par

$$g(\{(\mathbf{k}_j, m_j, \sigma_j)\}) = U\, f_I(\{(\sigma_j, k_{\|j})\}) \times$$
$$\times \sum_{\vartheta_j} \gamma^{m'_1 \vartheta'_1}_{k'_{\perp 1}} \gamma^{m'_2 \vartheta'_2}_{k'_{\perp 2}} \gamma^{m_2 \vartheta_2 *}_{k_{\perp 2}} \gamma^{m_1 \vartheta_1 *}_{k_{\perp 1}} \text{ avec dans la somme } \vartheta_j = \pi \text{ pour} \quad (5.13)$$
$$\begin{cases} \text{un nombre pair de } j & \text{si } k'_{\perp 1} + k'_{\perp 2} - k_{\perp 2} - k_{\perp 1} = 0, \\ \text{un nombre impair de } j & \text{si } k'_{\perp 1} + k'_{\perp 2} - k_{\perp 2} - k_{\perp 1} = \frac{\pi}{b}, \end{cases}$$

où $f_I(\{(\sigma_j, k_{\|j})\})$ décrit la dépendance en spin de l'interaction (annexe A) ainsi qu'une éventuelle dépendance en $k_\|$. L'expression (5.13) est dérivée dans l'annexe E.1. Aux Figs. 5.5 et 5.6, on peut voir deux exemples.

Fonctions de réponse

Considérons d'abord l'instabilité supraconductrice avec paires de Cooper singulet de symétrie spatiale Υ. On trouve (annexe E.2)

$$z_{(s,\Upsilon)}((\mathbf{k}', m'), (\mathbf{k}, m); \mathbf{q}) =$$
$$\sum_\vartheta \gamma^{m' \vartheta' *}_{k'_\perp} \gamma^{m \vartheta *}_{k_\perp} \times \begin{Bmatrix} 1 & & (s) \\ \sqrt{2} \cos lb(k_\perp + \frac{\vartheta}{b}) & (l = 1 : d;\, l = 2 : g) \end{Bmatrix} \text{ avec}$$
$$\begin{cases} \vartheta' = \vartheta & \text{si } k'_\perp + k_\perp - q_\perp = 0, \\ \vartheta' = \vartheta + \pi & \text{si } k'_\perp + k_\perp - q_\perp = \pm \frac{\pi}{b}. \end{cases} \quad (5.14)$$

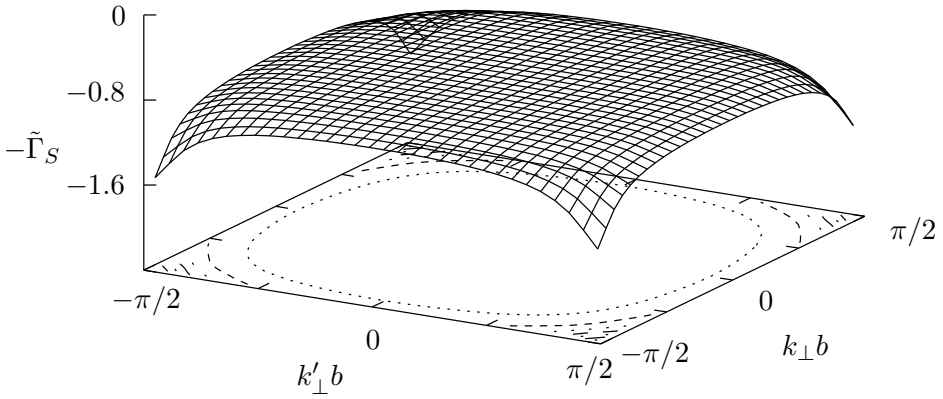


FIG. 5.5 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = -$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et potentiel anionique faible, $V/t_\perp = 0.34$, avant la renormalisation.

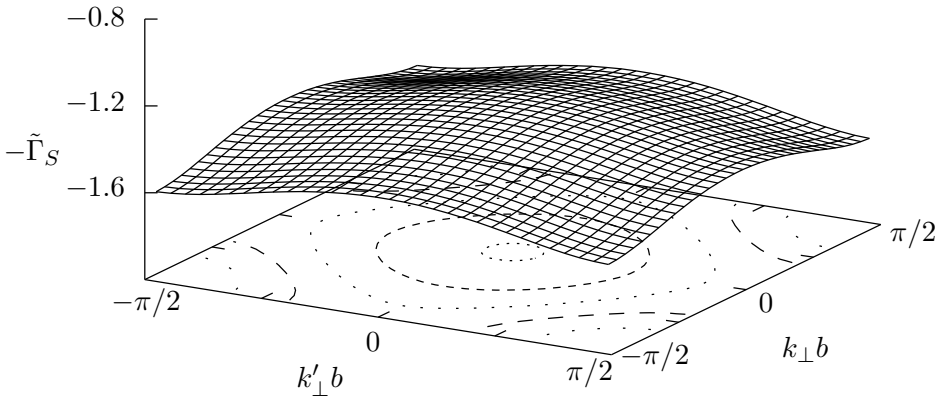


FIG. 5.6 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = -$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et fort potentiel anionique $V/t_\perp = 2.94$, avant la renormalisation.

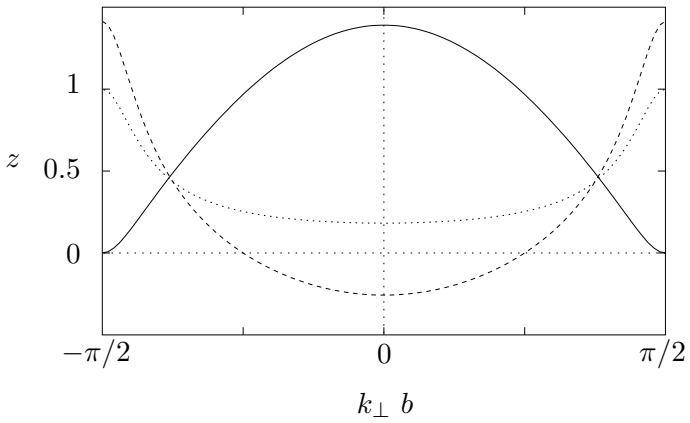


FIG. 5.7 – Valeurs initiales des fonctions z pour quelques paramètres d'ordre supraconducteurs singulet intrabande, c'est à dire $m'{=}m$: $z_{(s,d)}(m{=}-1; q_\perp{=}0)$ (ligne noire), $-z_{(s,s)}(m{=}-1; q_\perp{=}0)$ (en pointillé) et $z_{(s,g)}(m{=}-1; q_\perp{=}\pi/b)$ (en petits traits).

Le calcul pour la supraconductivité triplet est analogue. Le résultat pour les ondes de densité est ($\alpha \in \{C, S\}$)

$$z_\alpha((\mathbf{k}', m'), (\mathbf{k}, m); \mathbf{q}) = \sum_\vartheta \gamma_{k'_\perp}^{m'\vartheta'} \gamma_{k_\perp}^{m\vartheta *} \text{ avec} \quad \begin{cases} \vartheta' = \vartheta & \text{si } -k'_\perp + k_\perp - q_\perp = 0, \\ \vartheta' = \vartheta + \pi & \text{si } -k'_\perp + k_\perp - q_\perp = \pm\frac{\pi}{b}. \end{cases} \tag{5.15}$$

Aux points $k_\perp$ où $k'_\perp$ passe d'un bord de la première zone de Brillouin à l'autre, certaines fonctions z font un changement abrupt de signe. Ce changement de signe se simplifie dans les équations de renormalisation pour les susceptibilités, cf. les équations (5.18) et (5.20). A $q_\perp = 0$ ou $\frac{\pi}{b}$, on obtient les valeurs suivantes ($j \in \{C, S\}$) :

$$\begin{aligned} z_j(m' = m; q_\perp = 0) &= 1 \ , \\ z_j(m' \neq m; q_\perp = 0) &= 0 \ , \\ z_j(m' = m; q_\perp = \frac{\pi}{b}) &= m\sqrt{1 - \alpha_{k_\perp}^2} \ , \\ z_j(m' \neq m; q_\perp = \frac{\pi}{b}) &= -\alpha_{k_\perp} \ . \end{aligned}$$

Les résultats pour la supraconductivité singulet avec symétrie s sont identiques. Pour le cas d'une symétrie d, on obtient

$$\begin{aligned} z_{(s,d)}(m'=m;q_\perp=0) &= m\sqrt{2}\,\alpha_{k_\perp}\cos k_\perp b\ , \\ z_{(s,d)}(m'\neq m;q_\perp=0) &= \sqrt{2}\,\sqrt{1-\alpha_{k_\perp}^2}\cos k_\perp b\ , \\ z_{(s,d)}(m'=m;q_\perp=\frac{\pi}{b}) &= 0\ , \\ z_{(s,d)}(m'\neq m;q_\perp=\frac{\pi}{b}) &= -m\sqrt{2}\,\cos k_\perp b. \end{aligned}$$

Si $V=0$, $\alpha_{k_\perp}=-1$, et on retrouve le cas d'une seule bande. $\Upsilon=g$ donne

$$\begin{aligned} z_{(s,g)}(m'=m;q_\perp=0) &= \sqrt{2}\cos 2k_\perp b\ , \\ z_{(s,g)}(m'\neq m;q_\perp=0) &= 0\ , \\ z_{(s,g)}(m'=m;q_\perp=\frac{\pi}{b}) &= m\sqrt{2}\,\sqrt{1-\alpha_{k_\perp}^2}\cos 2k_\perp b\ , \\ z_{(s,g)}(m'\neq m;q_\perp=\frac{\pi}{b}) &= -\sqrt{2}\,\alpha_{k_\perp}\cos 2k_\perp b\ . \end{aligned}$$

Si $V\gg t_\perp$, $|\alpha_{k_\perp}|\ll 1$, et on retrouve le cas de deux systèmes indépendants de chaînes couplées avec distance $2b$ entre chaînes premiers-voisins, et avec une supraconductivité de type d. Dans le cas $q_\perp=0$, le paramètre d'ordre a la même phase dans les deux systèmes ; dans le cas $q_\perp=\frac{\pi}{b}$, il y a un facteur de phase (-1) entre les deux.

5.3.2 Equations de renormalisation

Interaction

Le calcul des bulles est fait dans l'annexe B.5. Si nous négligeons encore une fois la dépendance des Γ_j en la distance des $\mathbf{k}$ à la surface de Fermi et en les fréquences de Matsubara (voir le chapitre 4), nous obtenons les équations

de renormalisation suivantes :

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\alpha((k'_{1\perp},m'_1),(k'_{2\perp},m'_2),(k_{2\perp},m_2),(k_{1\perp},m_1)) \\
&\qquad = \frac{1}{2}\int\frac{dk_\perp}{2\pi}\sum_{ij}C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\times \\
&\times\sum_{mm'}\big\{B_{\mathcal{C}}(-;m,m')\tilde{\Gamma}_i((k'_{1\perp},m'_1),(k'_{2\perp},m'_2),(k_\perp,m),(-k_\perp+q_\perp,m'))\times \\
&\qquad\times\tilde{\Gamma}_j((-k_\perp+q_\perp,m'),(k_\perp,m),(k_{2\perp},m_2),(k_{1\perp},m_1)) \\
&\quad +B_{\mathcal{C}}(+;m,m')\tilde{\Gamma}_i((k'_{1\perp},m'_1),(k'_{2\perp},m'_2),(-k_\perp+q_\perp,m'),(k_\perp,m))\times \\
&\qquad\times\tilde{\Gamma}_j((k_\perp,m),(-k_\perp+q_\perp,m'),(k_{2\perp},m_2),(k_{1\perp},m_1))\big\} \\
&\qquad - \frac{1}{2}\int\frac{dk_\perp}{2\pi}\sum_{ij}C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\times \\
&\times\sum_{mm'}\big\{B_{\mathcal{P}}(-;m,m')\tilde{\Gamma}_i((k'_{1\perp},m'_1),(k_\perp,m),(k_{2\perp},m_2),(k_\perp+q_\perp,m'))\times \\
&\qquad\times\tilde{\Gamma}_j((k_\perp+q_\perp,m'),(k'_{2\perp},m'_2),(k_\perp,m),(k_{1\perp},m_1)) \\
&\quad +B_{\mathcal{P}}(+;m,m')\tilde{\Gamma}_i((k'_{1\perp},m'_1),(k_\perp-q_\perp,m'),(k_{2\perp},m_2),(k_\perp,m))\times \\
&\qquad\times\tilde{\Gamma}_j((k_\perp,m),(k'_{2\perp},m'_2),(k_\perp-q_\perp,m'),(k_{1\perp},m_1))\big\}\ .
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Ici, nous avons posé toutes les différences de fréquences de Matsubara $q_0 = 0$, et nous avons défini les fonctions

$$\begin{aligned}
B_{\mathcal{C},\mathcal{P}}(r;m,m') &= \sum_{\nu=\pm}\Theta(|\Lambda+\nu A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}|-\Lambda)\times \\
&\quad\times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\Lambda}{2}+\tanh\frac{\beta(\Lambda+\nu A_{\mathcal{C},\mathcal{P}})}{2}\right)\frac{\Lambda}{2\Lambda+\nu A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}} \\
&\overset{T\to 0}{\longrightarrow} \frac{\Lambda}{2\Lambda+|A_{\mathcal{C},\mathcal{P}}|}\ \text{avec} \\
A_{\mathcal{C}} &= A_{\mathcal{C}}(m,m',r,k_\perp,q_{\mathcal{C}\parallel},q_{\mathcal{C}\perp}) \\
&= -\epsilon_\perp(k_\perp,m)+\epsilon_\perp(-k_\perp+q_\perp,m')-rv_{F\parallel}q_\parallel\ , \\
A_{\mathcal{P}} &= A_{\mathcal{P}}(m,m',r,k_\perp,\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel},q_{\mathcal{P}\perp}) \\
&= -\epsilon_\perp(k_\perp,m)-\epsilon_\perp(k_\perp-rq_\perp,m')-v_{F\parallel}\tilde{q}_\parallel\ , \\
q_{\mathcal{P}\parallel} &= 2k_F^{1D}+\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}\ ,
\end{aligned}$$

où les $\mathbf{q}$ dépendent du vertex dans le terme de gauche dans l'équation,

$$\begin{aligned}
q_{\mathcal{C}\perp} &= k_{1\perp}+k_{2\perp}\,, \\
q_{\mathcal{P}\perp} &= k'_{1\perp}-k_{2\perp}\,.
\end{aligned}$$

Comme dans le chapitre précédent, nous ne considérons les équations de renormalisation que pour certains couplages, définis par des valeurs fixées de

$q_{\mathcal{C}\parallel}$ et $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$, voir la section 4.1.3. Nous avons vu dans la section 4.2.2 que le choix de $q_\parallel$ peut avoir une influence importante sur le diagramme de phases obtenu. Comme dans le cas à une bande, notre objectif sera d'utiliser les valeurs de $q_\parallel$ qui donnent la renormalisation la plus importante.

Choix de $q_{\mathcal{C}\parallel}$ et $q_{\mathcal{P}\parallel}$

Pour le canal de Peierls, $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ est obtenu en minimisant le dénominateur D des susceptibilités associées aux fluctuations particule-trou, qui apparaît dans le critère de Stoner (5.11). Comme la RPA montre que, du moins dans la phase onde de densité de spin, le vecteur de meilleur emboîtement garde toujours la composante perpendiculaire commensurable avec le pas de réseau b, nous allons fixer $q_\perp = \pi/b$ pour V faible, ou $q_\perp = \pi/2b$ pour V fort, dans les calculs d'optimisation de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$. Contrairement au cas d'une bande, le critère de Stoner (5.11) dépend de l'interaction $\tilde{g}_S$. Ici, nous ne devons pas utiliser l'interaction nue qui entre dans le calcul du flot de renormalisation ; il faut tenir compte de l'effet des fluctuations unidimensionnelles, qui réduisent l'interaction effective. La valeur précise de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ commence à jouer un rôle à partir du moment où la coupure Λ est du même ordre de grandeur que les variations de la fonction $A_{\mathcal{P}}$. Ceci est justement la définition de l'échelle d'énergie du passage dimensionnel Λ_{x^1}, et donc de l'ordre de, ou inférieur à, $t_\perp$, voir les sections 2.4.2 et 4.1.4. La démarche naturelle serait donc de faire le calcul d'optimisation en utilisant les valeurs renormalisées jusqu'à ce point pour l'interaction $\tilde{g}_S^{eff}$ et la largeur de bande $2\Lambda^{eff}$. Il y a ici un problème pratique qui se pose. L'expression (5.10) pour l'intégrale de $k_\parallel$ dans le calcul de la bulle particule-trou n'est valable que si la largeur de bande est beaucoup plus grande que $t_\perp$. Afin de limiter le temps de calcul numérique, nous avons donc plutôt fait le calcul d'optimisation en gardant la largeur de bande grande et avec une interaction $\tilde{g}_S^{RPA}$ "typique", déterminée par le critère suivant : $\tilde{g}_S^{RPA}$, injectée dans le critère de Stonder, à $t'_\perp = 0 = V$, devait donner la même température critique T_c^0 que le groupe de renormalisation à partir de l'interaction nue $\tilde{g}_S$. Les variations de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}^{opt}$ avec $\tilde{g}_S^{RPA}$ sont relativement importantes. Nous ne pouvons donc pas être sûrs d'obtenir la valeur vraiment optimale avec notre procédure. Au pire, ceci ferait que nous sous-estimerions les fluctuations de spin. Comme ces fluctuations sont à l'origine de *toutes* les phases ordonnées que nous trouvons, le diagramme de phases ne devrait pas en être modifié qualitativement.

Le vecteur de meilleur emboîtement dépend également de la température, comme dans le cas d'une seule bande. Au vu des résultats de la section 4.2.2, nous déterminons $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}^{opt}$ pour deux températures différentes : La température "actuelle", c'est à dire celle pour laquelle le flot de renormalisation sera calculé, et la température T_c^0 (la température critique si $V = 0 = t'_\perp$). Le choix de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}^{opt}$ qui donne la température critique la plus élevée dans le calcul par renormalisation est retenu. Ce procédé est repété pour chaque paire de valeurs

de V et de $t'_\perp$. L'intérêt de considérer un vecteur de meilleur emboîtement correspondant à une température plus grande que les déviations de l'emboîtement parfait est de mieux tenir compte de l'effet des fluctuations de spin à des hautes échelles d'énergies Λ.

En ce qui concerne le canal de Cooper, nous utilisons toujours $q_{\mathcal{C}\parallel} = 0$, pour la raison suivante : A faible V, on s'attend à un scénario similaire au cas $V = 0$. On devrait donc obtenir des paires de Cooper avec vecteur d'onde total nul *dans la base d'ondes planes*, ce qui correspond, dans la base propre de H_0, à des paires intrabandes toujours avec vecteur d'onde total nul. A V fort, les deux bandes devraient se découpler, et l'appariement serait de nouveau essentiellement intrabande avec $\mathbf{q} = 0$. Le choix $q_{\mathcal{C}\parallel} = 0$ apparaît alors naturel dans les deux limites.

Nous avons vu dans la section 5.2 que pour les fluctuations de spin, plusieurs vecteurs de modulations sont importants, $\mathbf{q}$ et $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$, avec $q_\perp = \pi/b$ ou $q_\perp = \pi/2b$, et des composantes $q_\parallel$ différentes. Ces fluctuations vont en général coexister, et il est bien possible que la supraconductivité soit générée par différentes sortes de fluctuations de spin à la fois, ce qui va se refléter dans le paramètre d'ordre. Tout choix de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ favorise certaines fluctuations de spin par rapport à d'autres. Dans notre cas, cette approximation ne devrait cependant pas changer les résultats fondamentalement. Les calculs en RPA, où nous avons traité tous les $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ sur un pied d'égalité, montrent qu'il y a toujours un type de fluctuations qui est dominant, ce qui ne peut être que renforcé par notre choix d'un $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ fixe. Le paramètre d'ordre supraconducteur sera davantage déterminé par les fluctuations dominantes, qui sont bien prises en compte dans nos calculs. La forme globale du paramètre d'ordre que nous obtenons sera donc correcte. Pour connaître sa structure fine, par contre, il faudrait probablement tenir compte de plusieurs valeurs de $\tilde{q}_{\mathcal{P}\parallel}$ à la fois.

Fonctions de réponse

Les équations de renormalisation pour les fonctions de réponse sont les suivantes. Pour les ondes de densité :

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl} z_{ODo\alpha}((p_{L\perp}, m_L), (p_{R\perp}, m_R); q_\perp) = \\
&\quad \frac{1}{2} \int \frac{dk_\perp}{2\pi} \sum_{mm'} \big\{ B_{\mathcal{P}}(-; m, m') z_{ODo\alpha}((k_\perp, m), (k_\perp + q_\perp, m'); q_\perp) \times \\
&\qquad\qquad \times \tilde{\Gamma}_\alpha((k_\perp + q_\perp, m'), (p_{L\perp}, m_L), (k_\perp, m), (p_{R\perp}, m_R)) \\
&\qquad + B_{\mathcal{P}}(+; m, m') z_{ODo\alpha}((k_\perp - q_\perp, m'), (k_\perp, m); q_\perp) \times \\
&\qquad\qquad \times \tilde{\Gamma}_\alpha((k_\perp, m), (p_{L\perp}, m_L), (k_\perp - q_\perp, m'), (p_{R\perp}, m_R)) \big\} \ ,
\end{aligned} \tag{5.17}$$

$$\frac{d}{dl}\tilde{\chi}_{ODC\alpha}(q'_\perp,q_\perp) =$$
$$-\int\frac{dk_\perp}{2\pi}\sum_{m_Lm_R}\big(B_{\mathcal{P}}(-;m_L,m_R)z_\alpha((k_\perp,m_L),(k_\perp+q'_\perp,m_R);q'_\perp)\times$$
$$\times z_\alpha((k_\perp,m_L),(k_\perp+q_\perp,m_R);q_\perp) \tag{5.18}$$
$$+B_{\mathcal{P}}(+;m_R,m_L)z_\alpha((k_\perp-q'_\perp,m_L),(k_\perp,m_R);q'_\perp)\times$$
$$\times z_\alpha((k_\perp-q_\perp,m_L),(k_\perp,m_R);q_\perp)\big)\ ,$$

où $\alpha = C$ (charge) ou $\alpha = S$ (spin). Pour $q'_\perp$, $q_\perp$, nous allons prendre toutes les combinaisons de π/b et $2\pi/b$ si V est faible, et $\pi/2b$ et $3\pi/2b$ si V est fort. On remarque que les équations de renormalisation pour les z sont diagonales en $q_\perp$. Dans ce schéma de zone réduite, le couplage entre les fluctuations à $\mathbf{q}$ et $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$ est pris en compte par le fait que les états $(k_\perp,m)$ qu'on somme contiennent les ondes planes $k_\perp$ et $(k_\perp+\frac{\pi}{b})$ à la fois.

Pour l'appariement :

$$\frac{d}{dl}z_{SC\alpha}((p_{L\perp},m_L),(p_{R\perp},m_R);q_\perp) =$$
$$\frac{1}{2}\int\frac{dk_\perp}{2\pi}\sum_{mm'}\big\{B_{\mathcal{C}}(-;m,m')z_{SC\alpha}((k_\perp,m),(-k_\perp+q_\perp,m');q_\perp)\times$$
$$\times\tilde{\Gamma}_\alpha((-k_\perp+q_\perp,m'),(k_\perp,m),(p_{L\perp},m_L),(p_{R\perp},m_R))$$
$$+B_{\mathcal{C}}(+;m,m')z_{SC\alpha}((-k_\perp+q_\perp,m'),(k_\perp,m);q_\perp)\times$$
$$\times\tilde{\Gamma}_\alpha((k_\perp,m),(-k_\perp+q_\perp,m'),(p_{L\perp},m_L),(p_{R\perp},m_R))\big\}\ , \tag{5.19}$$

$$\frac{d}{dl}\tilde{\chi}_{SC\alpha}(q'_\perp,q_\perp) =$$
$$-\int\frac{dk_\perp}{2\pi}\sum_{m_Lm_R}\big(B_{\mathcal{C}}(-;m_L,m_R)z_\alpha((k_\perp,m_L),(-k_\perp+q'_\perp,m_R);q'_\perp)\times$$
$$\times z_\alpha((k_\perp,m_L),(-k_\perp+q_\perp,m_R);q_\perp)$$
$$+B_{\mathcal{C}}(+;m_R,m_L)z_\alpha((-k_\perp+q'_\perp,m_L),(k_\perp,m_R);q'_\perp))\times$$
$$\times z_\alpha((-k_\perp+q_\perp,m_L),(k_\perp,m_R);q_\perp)\big)\ . \tag{5.20}$$

Comme dans le cas des ondes de densité, les fluctuations particule-particule à $\mathbf{q}$ et $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$ sont couplées par l'intermédiaire des états $(\mathbf{k},m)$. Ainsi, une instabilité supraconductrice à $\mathbf{q}=\mathbf{0}$ va en général en induire une à $\mathbf{q}=\mathbf{P}$.

Pour obtenir le diagramme de phases, nous calculons les susceptibilités χ_{ODC} et χ_{ODS} mentionnées plus haut, et $\chi_{SC}(\mathbf{0},\mathbf{0})$, $\chi_{SC}(\mathbf{0},\mathbf{P})$ et $\chi_{SC}(\mathbf{P},\mathbf{P})$

associées aux paramètres d'ordre singulet $r \sin k_\perp b$ et $\cos k_\perp b$ ("d"), $r \sin k_\perp 2b$ et $\cos k_\perp 2b$ ("g") et $\cos k_\perp 3b$ ("i"), ainsi que triplet $\sin k_\perp b$ ("$p_\perp$"), $\sin k_\perp 2b$ et $r \cos k_\perp b$ ("f"), et $r \cos k_\perp 2b$ ("h").

L'échelle fermionique constitue un cas spécial très important de système à deux bandes. Nous faisons le lien entre les équations dérivées par Fabrizio [62] pour une échelle, et les équations données ci-dessus, dans l'annexe F.

5.4 Le diagramme de phases

Le groupe de renormalisation donne le diagramme de phases de la Fig. 5.8. On retrouve les deux phases onde de densité de spin qu'on avait déjà trouvées en RPA, celle à faible V, correspondant à l'emboîtement interbandes, avec $q_\perp = \pi/b$ et $q_\perp = 0$, et celle à V fort, avec $q_\perp = \pm\pi/2b$, qui vient de l'emboîtement intrabande. Les fluctuations de spin à V faible sont très similaires à celles du système à une bande et donnent lieu à une supraconductivité qui elle aussi ressemble au cas $V = 0$: Il s'agit d'une supraconductivité de type "d", donc avec appariement entre chaînes voisines. En analogie avec le système à une bande, les fluctuations de spin intrabande de modulation transverse $\pi/2b$ génèrent une supraconductivité avec paramètre d'ordre $\Delta_{\mathbf{k}} \sim \cos k_\perp\, 2b$ ("g"), c'est à dire avec appariement entre chaînes seconds-voisins. Dans cette partie du diagramme de phases, V est déjà assez fort pour que l'unidimenionnalisation due au découplage des chaînes premiers-voisins se fasse sentir, de sorte que les instabilités sont repoussées vers des valeurs de V assez élevées, et que les températures critiques dans ce régime sont très faibles, voir la section 5.4.1.

Nous avons souligné dans le chapitre 4 que nos résultats sont indépendants de la discrétisation de la surface de Fermi si on prend un minimum de $M = 32$ segments par feuillet de la surface de Fermi. Dans les calculs pour le système à deux bandes, nous avons pris $M = 16$ par feuillet (donc le même nombre de segments dans la première zone de Brillouin que dans le cas d'une bande). Il se trouve que les résultats pour le régime de V fort sont encore sensibles à la discrétisation. On obtient la phase supraconductrice g pour $M = 16$ et des interactions nues $\tilde{g}_{1,2} = 0.8$. Elle est supprimée pour $M = 32$ et $\tilde{g}_j = 0.8$, mais réapparaît si $M = 32$ et $\tilde{g}_j = 1.0$. Pour bien définir la zone de stabilité de cette phase, il faudrait alors passer à des discrétisations plus élevées. Au vu des températures critiques dans cette partie du diagramme de phases, qui sont très faibles en comparaison aux résultats expérimentaux (voir la section 5.4.1), nous n'avons pas poursuivi cette voie. En revanche, nous avons vérifié que la phase supraconductrice d à V faible est très peu sensible à la discrétisation M au-delà de $M = 16$.

Si dans les paragraphes précédent, nous avons parlé de paramètres d'ordre supraconducteurs "d" ou "g", ce n'était pas tout à fait correct. En réalité, plusieurs composantes de Fourier sont superposées, pour deux raisons : Plu-

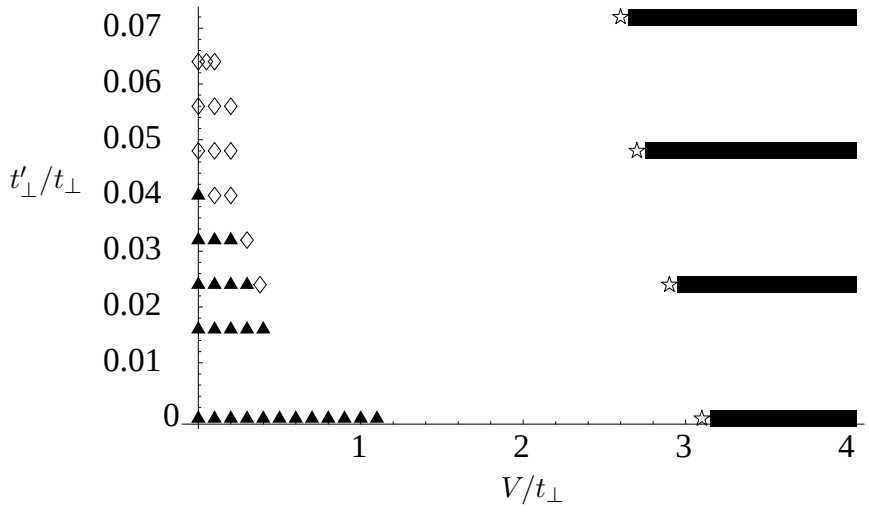


FIG. 5.8 – Diagramme de phases du système avec deux bandes : Ondes de densité de spin avec modulation $q_\perp = \pi/b$ (triangles) ou $q_\perp = \pi/2b$ (carrés), supraconductivité avec composante principale "d" (losanges) ou "g" (étoiles).

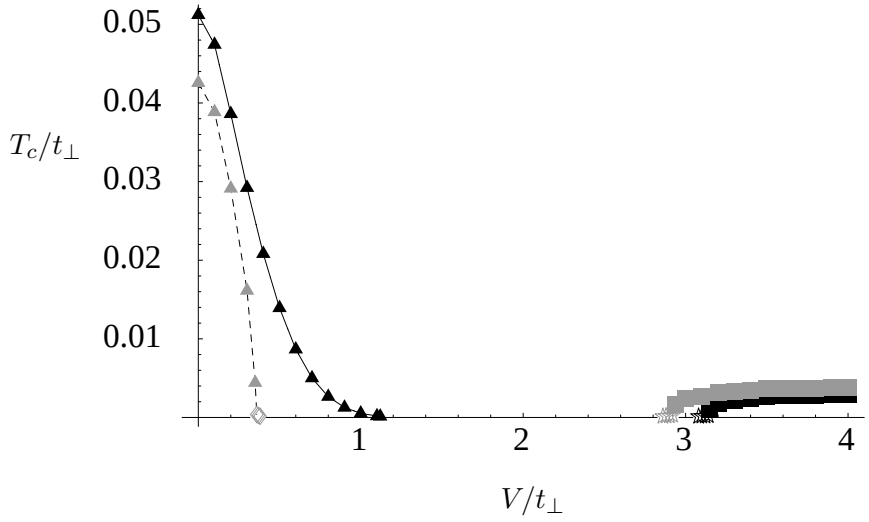


FIG. 5.9 – Températures critiques selon le groupe de renormalisation, en fonction de $V/t_\perp$ avec $t'_\perp/t_\perp = 0$ (symboles foncés, ligne noire) et 0.024 (symboles gris, en pointillé). Les symboles pour les ondes de densité ceux de la Fig. 5.8. La supraconductivité est à peine visible ici ; voir plutôt les Figs. 5.10 et 5.11.

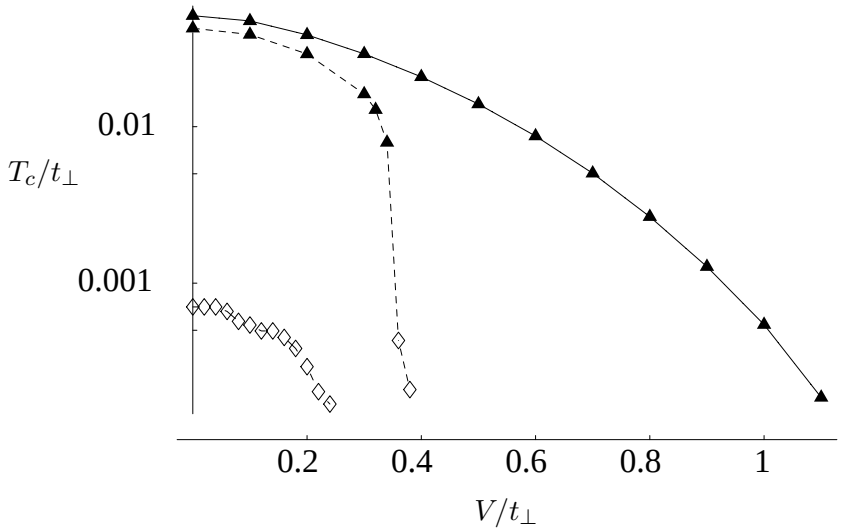


FIG. 5.10 – Températures critiques en fonction de $V/t_\perp$, pour V faible et avec $t'_\perp/t_\perp = 0$ (ligne noire), 0.024 (en pointillé) et 0.048. Symboles comme à la Fig. 5.8.

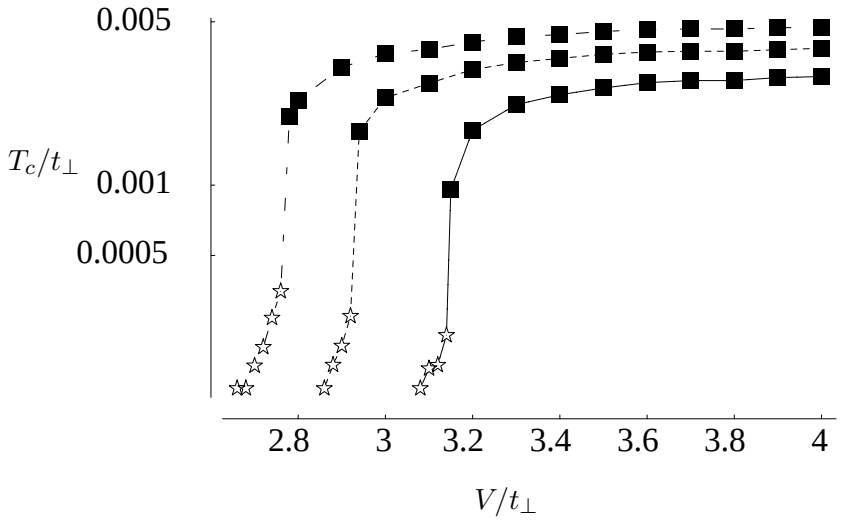


FIG. 5.11 – Températures critiques en fonction de $V/t_\perp$, pour V fort et avec $t'_\perp/t_\perp = 0$ (ligne noire), 0.024 (en pointillé) et 0.048 (traits espacés). Symboles comme à la Fig. 5.8.

sieurs sortes de fluctuations de spin sont présentes, qui peuvent toutes mener à un appariement particule-particule différent. De plus, les états de Bloch ne sont plus des ondes planes ; il n'y a donc plus de raison pour laquelle le paramètre d'ordre correspondrait à une simple fonction trigonométrique. Nous allons examiner les divers paramètres d'ordres rencontrés dans le système à deux bandes plus en détail aux sections 5.4.2 et 5.4.3, après avoir discuté des températures de transition vers ces phases ordonnées à la section 5.4.1.

Remarquons encore un détail sur la Fig. 5.8 : la phase supraconductrice pour V faible ne s'étend pas jusqu'à $t'_\perp = 0$. L'explication est la suivante : On peut frustrer les fluctuations de spin, soit avec $t'_\perp$, ce qui nuit à la qualité de l'emboîtement, soit avec V, comme discuté plus haut. Mais V frustre également la supraconductivité d, puisqu'elle correspond à un appariement sur chaînes premiers-voisins. Pour obtenir de la supraconductivité, il faut alors que la phase onde de densité de spin soit déjà supprimée à des valeurs de V qui lui permettent encore de se développer. L'emboîtement ne doit donc pas être trop bon.

5.4.1 Températures critiques

Les températures critiques dans le régime de potentiel anionique V faible sont du même ordre de grandeur que dans le cas d'une seule bande (section 4.2.1) : pour l'onde de densité de spin, les températures critiques sont de l'ordre d'une dizaine de kelvins, et nous trouvons de la supraconductivité pour des températures légèrement inférieures à 1K, ce qui est en assez bon accord avec les résultats expérimentaux sur $(TMTSF)_2ClO_4$. Par contre, les températures de transition pour V fort sont très basses : inférieures à 2K pour la phase onde de densité de spin, et encore un ordre de grandeur en-dessous pour la supraconductivité. Ceci vient de l'unidimensionnalisation due au potentiel anionique : Le saut interchaînes $t_\perp$ est frustré par V. Nous avons vu dans la section 2.4.2 que ceci mène à une chute de la température T_{x^1} de passage dimensionnel, qui décroît proportionnellement à $t_\perp^2/V$. Cette chute se reflète dans le comportement des températures critiques. Nous avons vérifié que, pour les très grandes valeurs de V, la température critique décroît d'une façon similaire. Ce scénario va cependant être modifié par deux effets : le saut $t'_\perp$ sur les chaînes seconds-voisins n'est pas affecté par V et présente donc une limite inférieure pour T_{x^1}. De plus, jusqu'ici, nous nous sommes focalisés sur le passage dimensionnel *à une particule* seulement. Il y a cependant aussi la possibilité d'un passage dimensionnel "à deux particules" [30] : sous certaines condictions, des fluctuations intrachaîne peuvent se propager plus facilement d'une chaîne à l'autre que les particules toutes seules, et ainsi donner lieu à un ordre à grande distance sans qu'il y ait eu de déconfinement à une particule. Bien que la possibilité d'un passage dimensionnel à deux particule soit tout à fait pris en compte par le groupe de renormalisation, il serait intéressant d'étudier plus explicitement l'effet du potentiel anionique

sur ce mécanisme.

Finalement, on note le rôle différent que joue $t'_\perp$ dans les deux parties du diagramme de phases. Dans la partie interbande (V faible), $t'_\perp$ nuit à l'emboîtement et supprime ainsi les fluctuations particule-trou. Pour V fort, $t'_\perp$ n'affecte pas l'emboîtement intrabande, mais rend le système plus bidimensionnel. Ici, les températures critiques augmentent donc avec $t'_\perp$ (Fig. 5.11).

5.4.2 V faible

Onde de densité

La Fig. 5.12 montre le comportement en fonction de la température des susceptibilités associées aux fluctuations de spin $\chi_S(\mathbf{q},\mathbf{q})$, $\chi_S(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})$ et $\chi_S(\mathbf{q}+\mathbf{P},\mathbf{q}+\mathbf{P})$, avec $q_\perp = \pi/b$, dans le régime onde de densité de spin. On voit que toutes les trois divergent au même moment, en accord avec le résultat de la RPA (section 5.2). Les susceptibilités associées aux fluctuations de charge et à la supraconductivité restent petites.

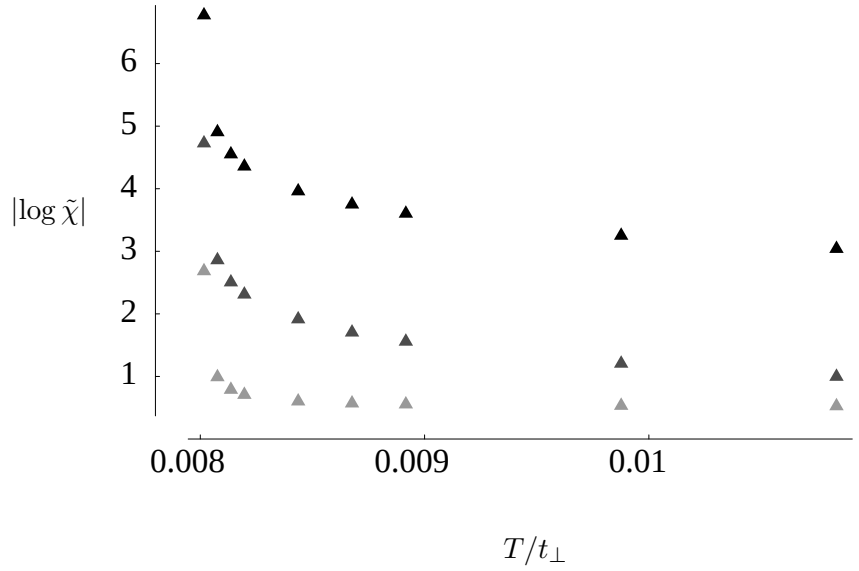


FIG. 5.12 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$, $V/t_\perp = 0.34$: Onde de densité de spin avec modulation $q_\perp = \pi/b$ (triangles noirs) ou $q_\perp = 0$ (gris clair), et la susceptibilité de spin non-diagonale $\chi(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})$ (gris foncé).

La Fig. 5.13 montre la dépendance en $k_\perp$ du vertex Γ_S juste avant la divergence dans la base des ondes planes (en "zone étendue"), et la Fig. 5.14 dans la base propre de H_0 (en "zone réduite") pour le cas où toutes les particules se trouvent dans la bande inférieure $m = -$. Pour V faible, l'image obtenue pour la bande $m = +$ est identique. Tous les résultats numériques

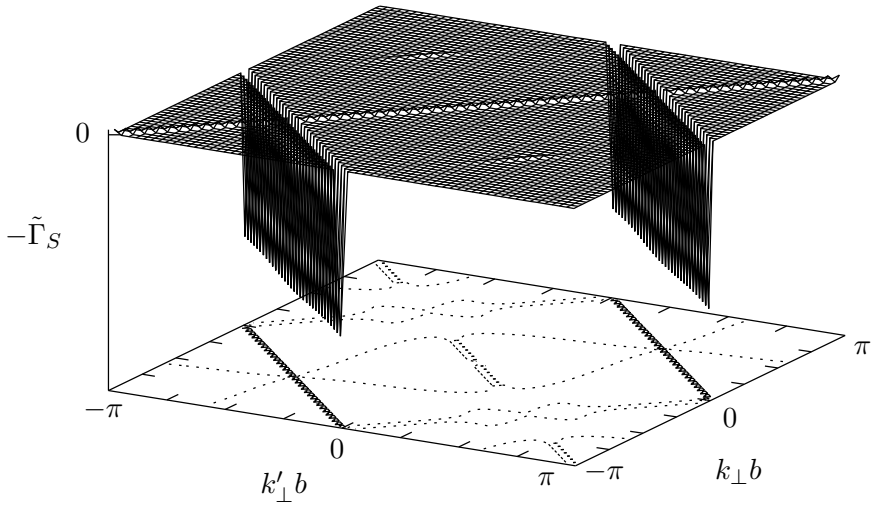


FIG. 5.13 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base des ondes planes pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 0.34$, c'est à dire dans le régime onde de densité de spin, à une température légèrement en dessous de T_c, juste avant la divergence.

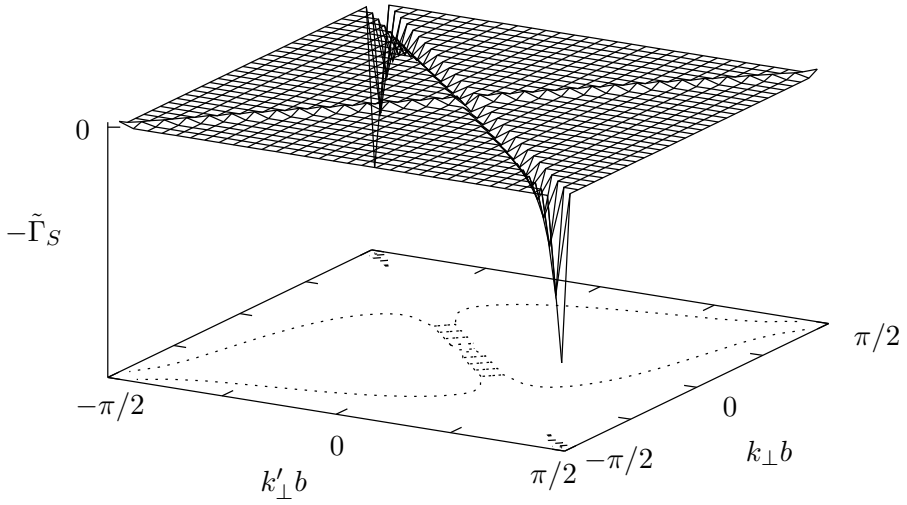


FIG. 5.14 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = -$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 0.34$ (régime onde de densité de spin), juste avant la divergence. L'image obtenue pour la bande $m = +$ est identique.

discutés dans cette section sont obtenus avec une discrétisation en 16 segments par feuillet de la surface de Fermi, c'est à dire 64 segments dans la première zone de Brillouin, comme dans le cas à une bande (chapitre 4) ; pour les images de $\Gamma(k_\perp)$ seulement, nous avons utilisé une résolution de 32 segments par feuillet.

La Fig. 5.13 est très similaire à son pendant à $V = 0$, Fig. 4.4. La Fig. 5.14 correspond *grosso modo* au carré $[-\pi/2b, \pi/2b] \times [-\pi/2b, \pi/2b]$ sur la Fig. 5.13. Mais comme la transformation (5.13) mélange les états $k_\perp$ et $(k_\perp + \pi/b)$, on voit, à $k'_\perp = -k_\perp$ en zone réduite, l'image du fossé qui se trouve, en zone étendue, le long de la ligne $k'_\perp = -k_\perp + \pi/b$. L'effet de cette superposition est maximal quand $k_\perp$, $k'_\perp$ se trouvent au bord de la zone, comme c'est déjà le cas pour les valeurs de départ, voir par exemple la Fig. 5.5. Ceci se comprend aisément à partir des équations (5.13) et (5.2) à (5.4), en tenant compte du fait que V est encore assez faible par rapport à $2t_\perp$. Il peut apparaître surprenant qu'on ne voit plus le fossé *original* dans la Fig. 5.14, qui devrait bien sûr apparaître aux coins $k_\perp = k'_\perp = \pm\frac{\pi}{2b}$. Ceci vient de la discrétisation. Dans les calculs pour le système à une seule bande, les M segments étaient centrés sur, et représentés par, les points $n2\pi/Mb$. Ainsi, π/b représentait l'ensemble de points $[-\frac{\pi}{b}, -\frac{\pi}{b} + \frac{\pi}{Mb}[\cup [\frac{\pi}{b} - \frac{\pi}{Mb}, \frac{\pi}{b}[$. Pour le système à deux bandes, nous étions obligés de décaler tous les segments d'une demie largeur afin d'éviter des problèmes liés à la "discontinuité" (5.5). Il n'y a donc plus de point exactement au bord de la première zone de Brillouin.

Supraconductivité

Sur la Fig. 5.15 on voit la dépendance en température de plusieurs susceptibilités dans la partie "supraconductivité d" du diagramme de phases. Les fluctuations de spin sont encore fortes, mais ne divergent pas. Plusieurs susceptibilités associées à différents paramètres d'ordre supraconducteurs divergent ensemble, le paramètre "d" – $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp b$, appariement sur chaînes premiers-voisins – étant dominant, mais suivi de près par l'appariement en $\sin k_\perp 2b$ et $\cos k_\perp 3b$. Tous les trois viennent des fluctuations de spin inter-bandes ($\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}_0$), voir les sections 2.3.2, 4.2.1 et 4.3.2. De plus, il y a des fluctuations de paires correspondant à $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp 2b$, avec vecteur d'onde transverse total $q_{\mathcal{C}\perp} = \pi/b$ au lieu de 0, qui sont très faibles, mais se mettent également à diverger près de T_c. De telles fluctuations peuvent avoir deux origines différentes : Dans la section 2.3.2, nous avons vu que des fluctuations de spin à $q_{\mathcal{P}\perp} = \pi/b$ génèrent des interactions attractives dans le canal de Cooper pour des paires singulet de moment total 0 qui correspondent à un paramètre d'ordre de la forme $\cos lk'_\perp b$ pour l *impair*. Les termes avec l pair sont répulsifs. Si on fait le même calcul pour des paires de Cooper de moment total π/b, les termes pairs deviennent attractifs. Si $V = 0$, la bulle particule-particule est trop faible pour que cette attraction puisse me-

ner à une transition de phase. Ceci est différent pour le cas de V fini, où les corrélations à $q_{\mathcal{C}\perp} = \pi/b$ sont couplées à celles, divergentes, à $q_{\mathcal{C}\perp} = 0$.

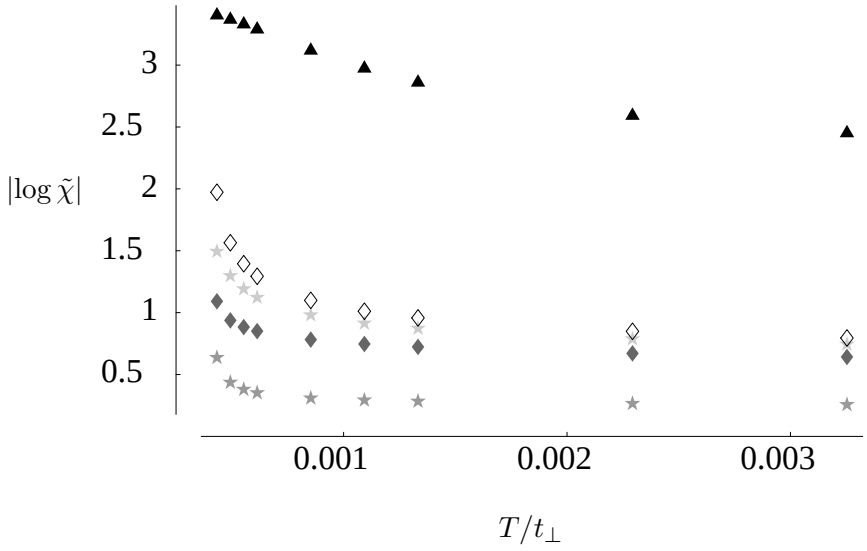


FIG. 5.15 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$, $V/t_\perp = 0.36$, soit dans le régime de la supraconductivité : onde de densité de spin avec modulation $q_\perp = \pi/b$ (triangles), et supraconductivité avec moment total $q_\perp = 0$ et $\Delta_{k_\perp} \propto \cos k_\perp b$ ("d", losanges clairs), $q_\perp = 0$ et $\Delta_{k_\perp} \propto r \sin 2k_\perp b$ (étoiles clair), $q_\perp = 0$ et $\Delta_{k_\perp} \propto \cos 3k_\perp b$ (losanges foncés), et $q_\perp = \pi/b$ et $\Delta_{k_\perp} \propto \cos 2k_\perp b$ (étoiles gris). Toutes les autres susceptibilités calculées (voir texte) restent petites.

Alternativement, les fluctuations de paires correspondant à un paramètre d'ordre g, c'est à dire $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \cos k_\perp 2b$, pourraient provenir des fluctuations de spin à $q_{\mathcal{P}\perp} = \pi/2b$, qui viennent de l'emboîtement intrabande. Par contre, celles-ci devraient davantage se développer à $q_{\mathcal{C}\perp} = 0$. Il est cependant possible que les corrélations particule-particule de type g avec moment total transverse $q_{\mathcal{C}\perp} = 0$ soient tout à fait présentes en réalité, quoique pas dans nos calculs parce que nous fixons, à V faible, le transfert de vecteur d'onde dans la direction parallèle $q_{\mathcal{P}\parallel}$ à une valeur peu avantageuse pour des fluctuations de spin intrabande, voir la section 5.3.2.

Le fait que plusieurs susceptibilités associées à différents paramètres d'ordre supraconducteurs divergent ensemble, contrairement au cas d'une bande, s'explique par le fait que le vrai paramètre d'ordre, décomposé en ondes planes, contient plein d'harmoniques, comme nous l'avons discuté plus haut, au début de la section 5.4.

Afin de trouver la forme orbitale du paramètre d'ordre, considérons la dépendance en $k_\perp$ de l'interaction effective de basse énergie. Nous avons vu

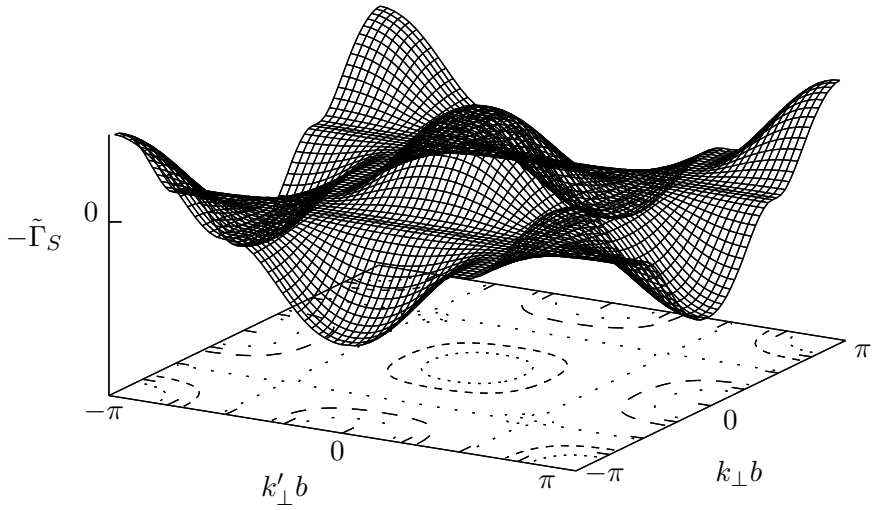


FIG. 5.16 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base des ondes planes pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 0.37$, juste avant la divergence.

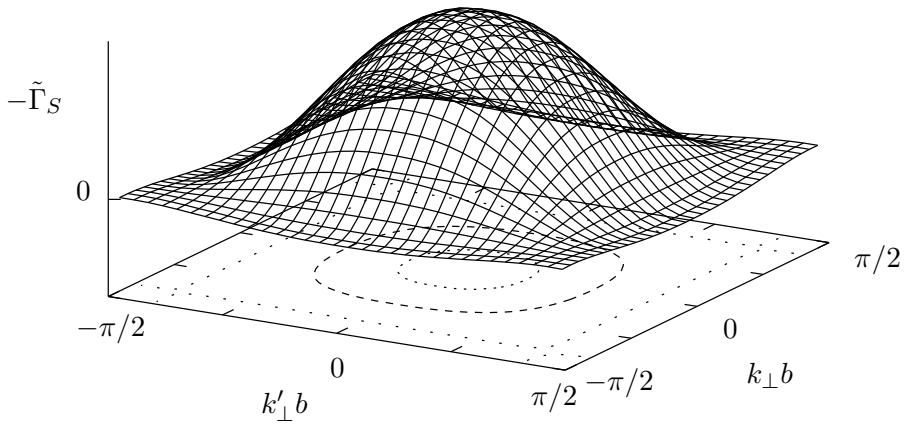


FIG. 5.17 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = -$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 0.37$ (régime supraconducteur), juste avant la divergence. Le contour le plus extérieur (en pointillé) marque la ligne de nœuds. L'image obtenue pour la bande $m = +$ est identique.

dans la section 4.2.1 que sa forme peut indiquer celle du paramètre d'ordre supraconducteur. Juste avant la divergence, le vertex Γ_S prend une forme qui, dans la base propre de H_0, rappelle un cosinus,

$$\Gamma((m',k'_\perp),(m',-k'_\perp),(m,-k_\perp),(m,k_\perp)) \underset{\sim}{\propto} m'm\cos k'_\perp b\cos k_\perp b\ ,$$

voir par exemple la Fig. 5.17. La représentation de Γ sur la base d'ondes planes, Fig. 5.16, donne un résultat similaire. Le paramètre d'ordre supraconducteur est donc essentiellement de type "d". (La représentation du paramètre d'ordre "d" sur la base d'onde planes et sur la base propre de H_0, section 5.3.1, ne change pas beaucoup de forme pour de faibles valeurs de V, voir la Fig. 5.7.) Contrairement à une supraconductivité purement "d", les nœuds du paramètre d'ordre auquel nous avons affaire ici ne se trouvent cependant plus à $\pm\pi/2b$, mais légèrement plus à l'intérieur de la première zone de Brillouin. On est tenté d'expliquer cet effet par une superposition des deux modes de Fourier $\cos k_\perp b$ (d) et $\cos k_\perp 2b$ (g). La Fig. 5.18 montre cependant que l'accord n'est pas très bon. De plus, selon le comportement des susceptibilités, la composante g à $q_{\mathcal{C}\perp}=0$ ne joue pas de rôle, dans nos calculs du moins, et l'accord avec une superposition $d+g(q_{\mathcal{C}\perp}=\pi/b)$ est encore pire. La forme de $\Gamma_S(m,k_\perp)$, et donc du paramètre d'ordre supraconducteur, aux endroits où sa partie principale d est faible, c'est à dire près de $\pm\pi/2b$, reste alors à expliquer.

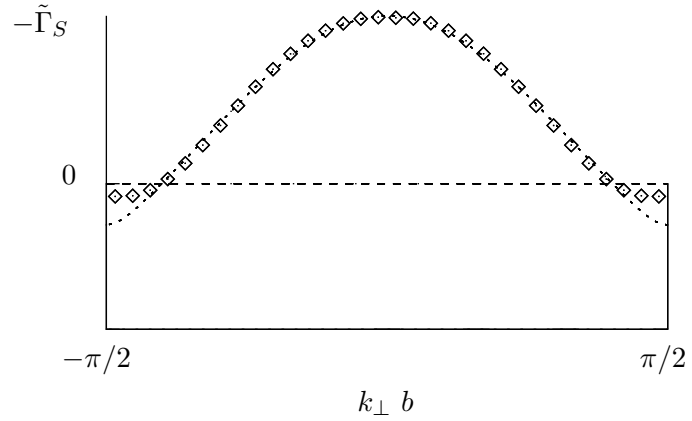


FIG. 5.18 – Coupe transverse de la surface Fig. 5.17 à $k'_\perp=0$, en comparaison à la superposition $\propto z_{(s,d)}(m=-;q_\perp=0)+0.32\times z_{(s,g)}(m=-;q_\perp=0)$.

L'aspect le plus surprenant de ce résultat pour le paramètre d'ordre est le fait qu'il y aurait bien une possibilité d'*enlever* les nœuds. En présence du potentiel anionique, les nœuds sur la surface de Fermi d'un paramètre d'ordre supraconducteur de type d n'ont plus lieu d'être, puisque le gap d'anions s'ouvre exactement aux positions de ces nœuds, voir la Fig. 2.16. En effet,

comme le montre la Fig. 5.7, une superposition d'une supraconductivité d, soit avec une composante indépendante de $k_\perp$ (en ondes planes), soit avec un ordre de type g (avec le bon signe), aurait donné un gap fini tout le long de la surface de Fermi, avec des changements de signe uniquement aux moments où on passe d'une bande à l'autre. On s'attendrait à ce qu'une telle solution soit plus favorable en énergie de condensation. Apparemment, les interactions présentes ne permettent pas un appariement aussi favorable.

La structure fine du paramètre d'ordre $\Delta_{\mathbf{k}}$ est directement liée à la forme de l'interaction effective à basse énergie dans le canal de Cooper. Cette dernière résulte des fluctuations de spin générées à plus haute énergie. Dans notre approche, seules les fluctuations dominantes à $q_{\mathcal{P}\perp} = \pi/b$ sont prises en compte par suite du choix de $q_{\mathcal{P}\parallel}$. Les fluctuations à $q_{\mathcal{P}\perp} = \pi/2b$ sont elles essentiellement ignorées. Il est possible que notre description approchée des fluctuations de spin, et par conséquent de l'interaction effective à basse énergie dans le canal de Cooper, ne permette pas de rendre compte avec précision de la forme de $\Delta_{\mathbf{k}}$. Il serait donc très intéressant d'examiner si la prise en compte de plusieurs transferts de vecteur d'onde parallèles $q_{\mathcal{P}\parallel}$ différents à la fois n'aurait pas d'effet sur l'existence ou non de nœuds dans le gap supraconducteur, en présence de l'ordre anionique.

5.4.3 V fort

Onde de densité

Pour $q_\perp = \pi/2b$, $(\mathbf{q}+\mathbf{P})_\perp = 3\pi/2b$ est équivalent à $-q_\perp$, de sorte que les susceptibilités de spin $\chi_S(\mathbf{q},\mathbf{q})$ et $\chi_S(\mathbf{q}+\mathbf{P},\mathbf{q}+\mathbf{P})$ sont identiques. Dans le régime onde de densité à fort potentiel anionique, elles suivent donc exactement la même courbe (Fig. 5.20). De façon remarquable, ceci est également vrai pour la susceptibilité non diagonale $\chi_S(\mathbf{q},\mathbf{q}+\mathbf{P})$. Les autres susceptibilités sont négligeables dans ce régime. La Fig. 5.19 montre que nous avons bien affaire à une onde de densité de période doublée par rapport au cas sans ordre anionique. La comparaison des Figs. 5.21 et 5.22 met en évidence le fait qu'il s'agit d'une instabilité intrabande dans la bande $m = -$: les vertex avec toutes les particules dans la bande $m = +$ divergent beaucoup moins fortement. Ceci est dû au fait que nous ne prenons en compte qu'une seule valeur de $q_{\mathcal{P}\parallel}$ – ici visiblement celle qui correspond à l'instabilité dans la bande $m = -$. En réalité, il y a aussi une instabilité dans la bande $m = +$, qui est indépendante de la première.

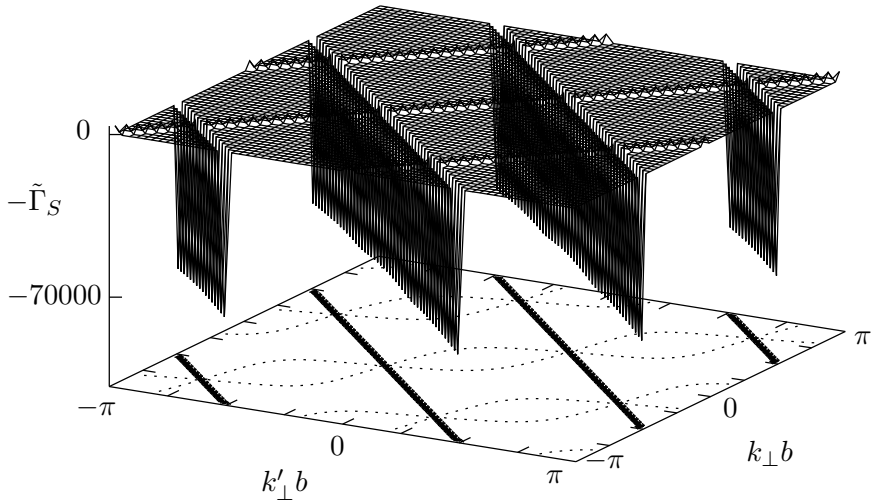


FIG. 5.19 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base des ondes planes pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 2.94$, juste avant la divergence qui correspond à la transition vers une phase onde de densité de spin.

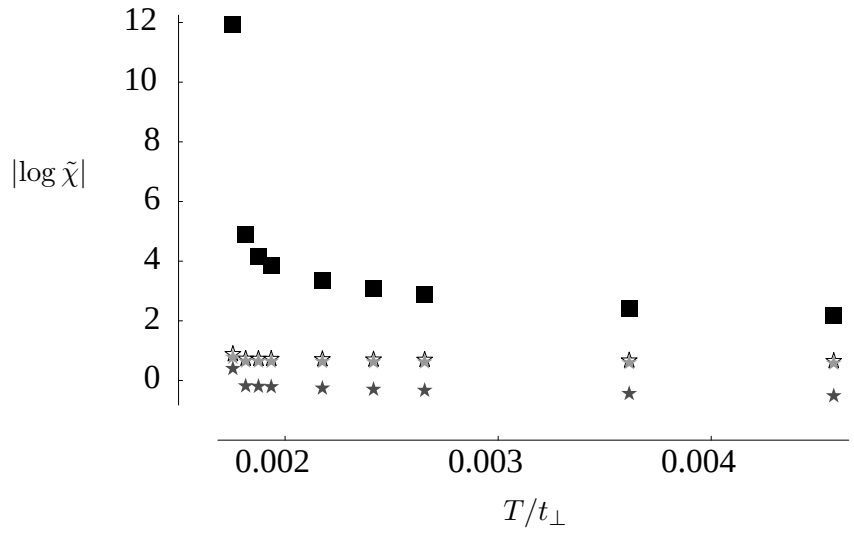


FIG. 5.20 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$, $V/t_\perp = 2.94$: onde de densité de spin avec modulation $q_\perp = \pi/2b$ (carrés), et supraconductivité "g" ($\Delta_{k_\perp} \propto \cos 2k_\perp b$) avec moment total $q_\perp = 0$ (étoiles claires), $q_\perp = \pi/b$ (gris foncé), et la susceptibilité non diagonale qui couple ces deux dernières (gris clair).

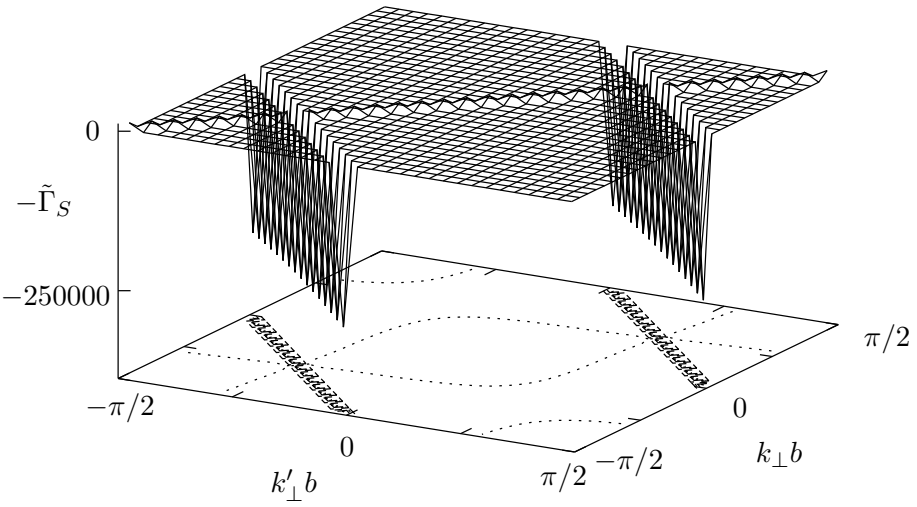


FIG. 5.21 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = -$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 2.94$, soit dans le régime onde de densité de spin.

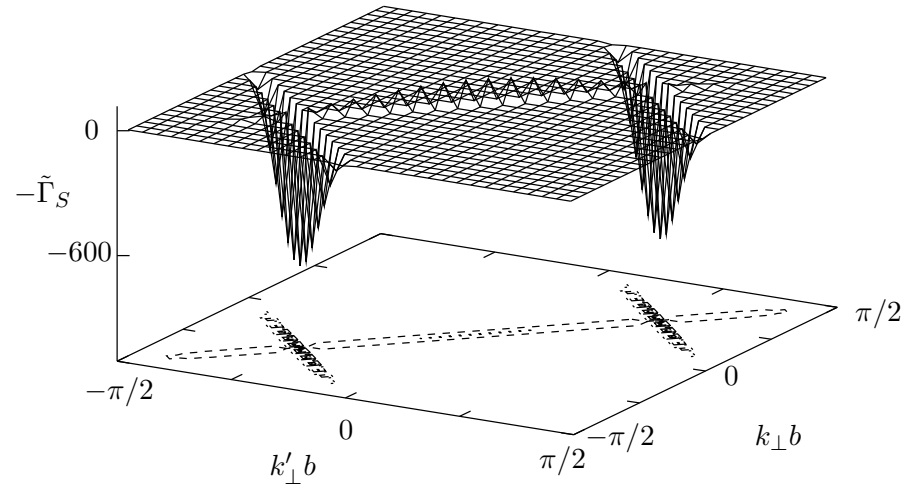


FIG. 5.22 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = +$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 2.94$ (onde de densité de spin).

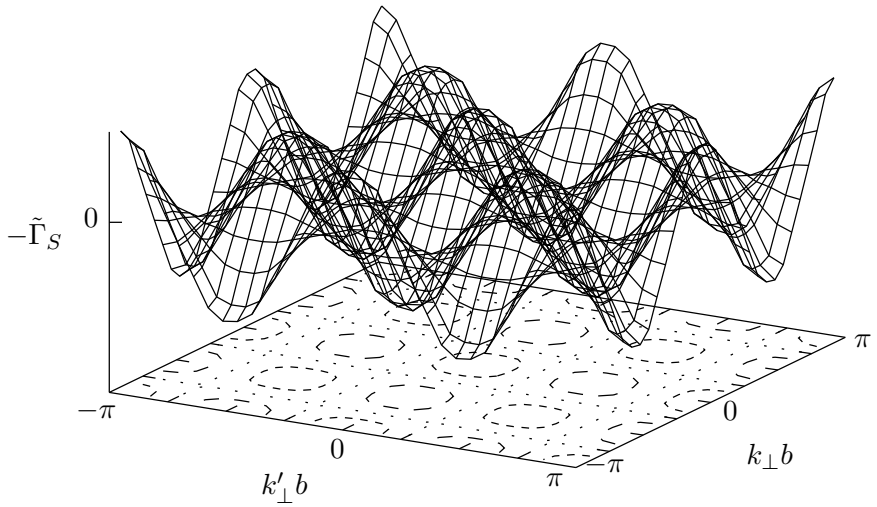


FIG. 5.23 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base des ondes planes pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 2.90$, c'est à dire dans le régime de la supraconductivité g.

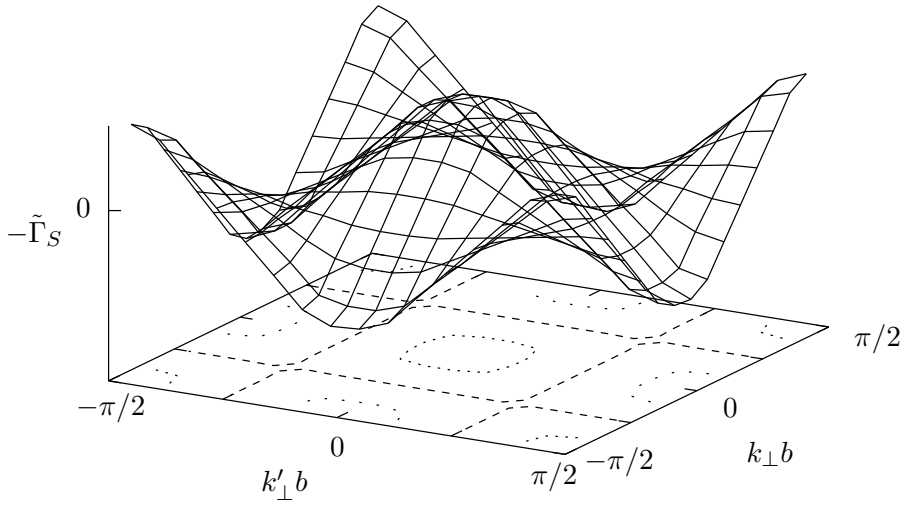


FIG. 5.24 – Le vertex $-\tilde{\Gamma}_S(k'_\perp, -k'_\perp, -k_\perp, k_\perp)$ dans la base propre de H_0 avec toutes les particules dans la bande $m = -$, pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$ et $V/t_\perp = 2.90$ (régime supraconducteur).

Supraconductivité

Les fluctuations de spin avec de période $2b$ restreintes à une bande induisent aussi de la supraconductivité comme dans un système à une bande, mais seulement avec appariement sur chaînes distantes de $2b$, comme le confirment les Figs. 5.23 et 5.24. Comme les trois susceptibilités associées $\chi_{SCg}(\mathbf{0},\mathbf{0})$, $\chi_{SCg}(\mathbf{0},\mathbf{P})$ et $\chi_{SCg}(\mathbf{P},\mathbf{P})$ sont couplées, elles divergent toutes au même moment, voir la Fig. 5.25. Des fluctuations de type d sont aussi présentes. Comme ces dernières fluctuations viennent des corrélations de spin interbande, elles sont désavantagées dans nos calculs et risquent d'être plus importantes en réalité, voir la discussion analogue pour les fluctuations de type g dans le cas de V faible, section 5.4.2.

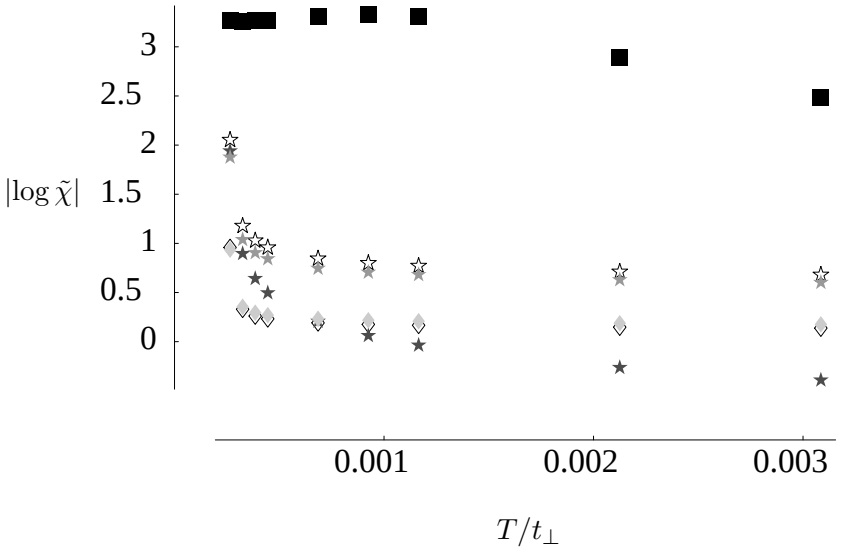


FIG. 5.25 – Susceptibilités en fonction de la température pour $t'_\perp/t_\perp = 0.024$, $V/t_\perp = 2.90$: onde de densité de spin avec modulation $q_\perp = \pi/2b$ (carrés), et supraconductivité "g" ($\Delta_{k_\perp} \propto \cos 2k_\perp b$) avec moment total $q_\perp = 0$ (étoiles claires), $q_\perp = \pi/b$ (gris foncé), et la susceptibilité non diagonale qui couple ces deux dernières (gris clair). Plus les susceptibilité correspondant à $\Delta_{k_\perp} \propto \cos k_\perp b$ ("d", losanges clairs) et $\Delta_{k_\perp} \propto \cos 3k_\perp b$ (losanges gris), toujours avec $q_\perp = 0$.

Dans ce régime, les fluctuations de spin restent importantes. La Fig. 5.25 montre qu'elles présentent même un maximum à une température $T > T_c^{SC}$, comme c'est le cas pour la susceptibilité de spin d'un système unidimensionnel sans interactions, $\chi_0^S(2k_F + \tilde{q}; T)$, $\tilde{q} \neq 0$, voir la Fig. 3.7.

5.5 Conclusions

Nous avons étudié les propriétés électroniques de basse température d'un conducteur quasi-unidimensionnel en présence d'un potentiel périodique transverse, comme il en est créé un dans $(TMTSF)_2ClO_4$par l'ordre orientationnel des anions.

Le potentiel anionique divise la bande de conduction en deux. Les nouveaux états de Bloch sont des superpositions d'ondes avec modulations transverses $k_\perp$ et $(k_\perp + \pi/b)$. Le fait que la maille élémentaire contienne deux sites mène alors au couplage des instabilités à vecteurs d'onde $\mathbf{q}$ et $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$, où $\mathbf{P} = (0, \pi/b)$. Les différents feuillets de la surface de Fermi s'emboîtent de trois façons différentes. Il y a l'emboîtement interbandes avec transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}_0$ si le potentiel anionique V est faible, et deux possibilités d'emboîtement intrabande avec $\mathbf{Q}_\pm$ si V est fort. Les fluctuations de spin associées à ces symétries d'emboîtement génèrent des corrélations particule-particule différentes, qui se superposent pour donner des paramètres d'ordre supraconducteurs non triviaux. Pour V faible, le paramètre d'ordre est similaire à celui d'un appariement d; pour V fort, la supraconductivité est essentiellement de type g.

On comprend bien les résultats pour V fort. Contrairement à la RPA, le groupe de renormalisation montre que, à cause des effets unidimensionnels importants, les températures de transition dans ce régime sont très faibles en comparaison avec les expériences sur $(TMTSF)_2ClO_4$. La phase supraconductrice observée dans ce matériau, en présence de l'ordre anionique, correspond donc plutôt à celle que nous trouvons pour un potentiel anionique plus faible, $V \lesssim t_\perp$, en accord avec d'autres estimations de la valeur de V, voir le chapitre 2. Dans ce régime, les températures critiques sont en effet du même ordre de grandeur que celles observées expérimentalement, et pour la supraconductivité, et pour l'onde de densité de spin que l'on obtient quand on trempe ce matériau, ce qui réduit le potentiel V. Cet effet est également bien en accord avec le diagramme de phases de la Fig. 5.8. On ne peut cependant pas vraiment identifier l'axe V der cette figure avec le taux de refroidissement, vu qu'une trempe ne réduit pas seulement V, mais produit un potentiel désordonné à sa place.

A V faible, nous trouvons une supraconductivité singulet non conventionnelle, avec des paires de Cooper de moment total $\mathbf{0}$ ou $\mathbf{P}$. La forme orbitale du paramètre d'ordre est essentiellement celle d'une supraconductivité d, mais d'autres harmoniques sont présentes également. Par rapport à une supraconductivité de type purement d, le paramètre d'ordre présente des nœuds *additionnels* au niveau de Fermi, ce qui est surprenant du point de vue énergétique, et en désaccord avec les mesures du transport de chaleur dans $(TMTSF)_2ClO_4$de Belin et Behnia [15], qui semblent indiquer un gap d'énergie fini partout. Il est probable que la détermination de $\Delta_\mathbf{k}$ au voisi-

nage de $k_\perp = \pm\frac{\pi}{2b}$ (où la composante principale d s'annulle) aille au-delà de nos approximations.

Chapitre 6

Conclusions et Perspectives

Nous avons étudié les instabilités de basse température dans les sels de Bechgaard, à l'aide du groupe de renormalisation à deux dimensions. Cette méthode permet de prendre en considération à la fois les effets de l'anisotropie, des propriétés d'emboîtement de la surface de Fermi et des interactions entre les corrélations particule-particule et particule-trou. Ainsi, nous avons pu voir les différents régimes de dimensionnalité, et les transitions vers les phases ordonnées de type onde de densité ou supraconductrice.

Rappelons d'abord le cas "standard", avec une seule bande au niveau de Fermi, correspondant au composé $(TMTSF)_2PF_6$. Pour une interaction purement locale, on obtient successivement les phases onde de densité de spin, supraconductivité singulet de symétrie orbitale d, et métallique, pour un emboîtement de moins en moins bon. Si on ajoute une interaction de portée finie, on obtient deux résultats différents selon que l'interaction de portée finie concerne la diffusion vers l'avant ($g_{2,nn}$) ou vers l'arrière ($g_{1,nn}$). Dans le premier cas, la supraconductivité d, qui correspond à un appariement sur chaines premiers-voisins, s'efface devant un appariement sur chaînes seconds-voisins, et la phase supraconductrice associée est plus facilement supprimée par un mauvais emboîtement que dans le cas avec interaction purement locale. Si on ajoute l'interaction de portée finie uniquement à l'interaction g_1, la supraconductivité singulet d est peu à peu remplacée par un paramètre d'ordre triplet de symétrie orbitale f, et pour une interaction premiers-voisins suffisamment forte, l'onde de densité de spin devient une onde de densité de charge. Il serait souhaitable d'étudier l'effet combiné des interactions premiers voisins pour g_1 et g_2 à la fois, et de mettre les paramètres g_1, g_2, $g_{1,nn}$ et $g_{2,nn}$ en relation avec les interactions présentes dans les sels de Bechgaard [10, 60, 7, 172, 8, 58, 24, 9, 168, 147, 128]. La fenêtre de valeurs de $g_{1,nn}$ pour lesquelles on obtient, et de la supraconductivité triplet, et une onde de densité de spin, est assez petite. Il serait cependant intéressant d'examiner, à l'aide du groupe de renormalisation, si des interactions premiers voisins *intrachaîne* ont un effet similaire à celui des interactions interchaînes

[114, 145], ce qui pourrait élargir la partie triplet du diagramme de phases. Il en est de même pour une interaction dépendant du spin [78]. Une autre question ouverte dans ce contexte est s'il peut y avoir coexistence des supraconductivités singulet et triplet, question qu'on pourrait aborder à l'aide d'un développement de Ginzburg-Landau à partir des résultats du groupe de renormalisation [48].

Ensuite, nous avons étudié l'effet d'un potentiel anionique, comme dans $(TMTSF)_2ClO_4$, où est présent un tel potentiel dans l'état relaxé. L'ordre anionique divise la bande de conduction en deux. Les nouveaux états de Bloch sont des superpositions d'ondes de modulations transverses $k_\perp$ et $(k_\perp + \pi/b)$. Le fait que la maille élémentaire contienne deux sites mène alors au couplage des instabilités de vecteurs d'onde $\mathbf{q}$ et $(\mathbf{q}+\mathbf{P})$, où $\mathbf{P} = (0, \pi/b)$. Les différents feuillets de la surface de Fermi s'emboîtent de trois façons différentes. Il y a l'emboîtement interbandes avec transfert de vecteur d'onde $\mathbf{Q}_0$, quand le potentiel anionique V est faible, et deux possibilités d'emboîtement intrabande avec $\mathbf{Q}_\pm$, quand V est fort. Les fluctuations de spin associées à ces symétries d'emboîtement génèrent des corrélations particule-particule différentes, qui se superposent pour donner des paramètres d'ordre supraconducteurs non triviaux. Dans les deux cas, nous trouvons une supraconductivité singulet, avec des paires de Cooper de moment total $\mathbf{0}$ ou $\mathbf{P}$. A V fort, la forme orbitale du paramètre d'ordre est essentiellement celle d'une supraconductivité g, mais d'autres harmoniques sont présentes également. A V faible, le paramètre d'ordre est similaire à celui d'un appariement d, également mélangé avec des harmoniques plus élevées. Afin d'éclaircir la question de l'existence ou non de nœuds dans le gap d'énergie de l'état supraconducteur, il semble important de prendre en compte plus exactement la dépendance en $q_\parallel$ de l'interaction. Un travail dans ce sens est en cours, d'abord pour le cas plus simple de fermions sur une échelle [142].

D'autres extensions possibles et intéressantes de ce travail seraient la prise en compte de la dimérisation selon la direction parallèle aux chaînes, par inclusion de processus Umklapp [48], et des interactions entre électrons de chaînes premiers-voisins pour le système à deux bandes, afin de voir s'il y a également une phase triplet en présence de l'ordre anionique. Un projet beaucoup plus difficile serait d'étudier les effets du désordre dans ces systèmes [55], en particulier afin de pouvoir comparer les résultats du groupe de renormalisation aux expériences sur l'effet du taux de refroidissement sur la supraconductivité dans $(TMTSF)_2ClO_4$[73, 187, 106]. La phase normale dans le régime bidimensionnel peut aussi être étudiée à l'aide du groupe de renormalisation, voir [51, 125] et références y inclues, et [201, 98, 109, 160]. Il y a notamment des questions ouvertes sur la renormalisation de la surface de Fermi par les interactions [18, 61, 62, 85, 112, 100, 54, 141, 126, 119]. Il y a également des efforts pour développer une théorie de groupe de renormalisation qui permettrait d'inclure les phases ordonnées [141, 5], contrairement à notre approche qui ne peut pas aller au-delà de T_c. Un système similaire

qui présente aussi deux bandes au niveau de Fermi est donné par les échelles couplées [111, 82], où, au lieu d'un potentiel additionnel, la dimérisation en direction transverse vient de deux intégrales de transfert entre premiers voisins $t_{\perp 1} \neq t_{\perp 2}$ qui alternent. Vu la physique très riche d'une échelle simple, il serait très intéressant de voir les effets des propriétés d'emboîtement sur ces sytèmes.

Du côté expérimental, nos résultats montrent que le diagramme de phases de systèmes avec et sans potentiel anionique sont très différents, en particulier en ce qui concerne les paramètres d'ordre supraconducteurs. Il est donc bien possible que la même expérience, appliquée une fois à la supraconductivité dans $(TMTSF)_2PF_6$ et une fois à celle dans $(TMTSF)_2ClO_4$, donne des résultats différents. Il serait par exemple extrêmement intéressant de voir si les expériences sur le transport de chaleur indiqueraient pour $(TMTSF)_2PF_6$, contrairement à $(TMTSF)_2ClO_4$, l'existence de nœuds dans le gap. Si ceci n'est pas le cas, il faudrait revenir à la proposition d'Abrikosov [1] d'une supraconductivité de symétrie $p_\parallel$, avec une ligne de nœuds pour $k_\parallel = 0$ et donc bien loin de toute surface de Fermi, indépendamment de la présence ou non d'un potentiel anionique périodique. Shimahara [178] a indiqué qu'un tel appariement peut être généré par les fluctuations de spin, même s'il devrait être dominé par un appariement singulet.

Dans le même article, Shimahara discute la possibilité d'un changement de paramètre d'ordre supraconducteur sous champ magnétique. Les fluctuations de spin donnent a priori lieu à des corrélations triplet ainsi que singulet, mais favorisent les paires singulet. Une fois la supraconductivité singulet supprimée, l'appariement triplet prendrait la place [178]. (Alternativement, l'appariement à moment total nul pourrait être remplacé par un appariement singulet de type FFLO.) La présence d'une interaction interchaînes $g_{1,nn}$ renforce les fluctuations triplet et rend un tel mécanisme encore plus probable. Il serait important de voir si des traces d'une telle transition peuvent être observées expérimentalement. Il n'est pas évident de faire ces observations, s'il y a coexistence des phases. Si par contre il y avait une transition singulet-triplet pour une valeur du champ précise, ce serait forcément une transition du premier ordre, qui devrait donc se voir dans le comportement de grandeurs thermodynamiques comme par exemple la chaleur spécifique. Une question similaire se pose, au vu des résultats du groupe de renormalisation pour $g_{1,nn} \neq 0$, à propos des effets de la pression hydrostatique. Nos calculs indiquent la possibilité d'une transition singulet-triplet quand la qualité de l'emboîtement diminue. S'il n'y a pas coexistence des deux paramètres d'ordre singulet et triplet, on devrait pouvoir observer une transition du premier ordre entre les deux à une certaine pression critique. Alternativement, la phase supraconductrice pourrait être triplet partout, mais dans ce cas on s'attendrait, selon les résultats du groupe de renormalisation, à une onde de densité de charge plutôt que de spin au voisinage de la supraconductivité. Les expériences de diffusion de rayons X montrent que les deux types d'ondes

de densité sont superposés dans $(TMTSF)_2PF_6$[153, 152]. Par une étude similaire, mais sous différentes pressions, on pourrait vérifier si la précence d'onde de densité de *charge* est renforcée quand la pression augmente. Ce serait un test intéressant du scénario qu'évoque le groupe de renormalisation.

Annexe A

Spin

A.1 Paramétrisation de l'interaction en fonction du spin des particules

La dépendance de l'interaction par rapport aux spins électroniques peut être paramétrisée de plusieurs façons. Dans cet annexe, nous allons mettre ces différentes représentations en relation. Nous allons essentiellement suivre Giamarchi et Schulz [78], mais dans un cadre moins général et donc plus simple.

La partie du Hamiltonien décrivant l'interaction s'écrit comme suit :

$$H_I = \frac{1}{4}\cdot\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}_j\sigma_j}\delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2}w(\mathbf{k}_j,\sigma_j)c^\dagger_{\mathbf{k}'_1\sigma'_1}c^\dagger_{\mathbf{k}'_2\sigma'_2}c_{\mathbf{k}_2\sigma_2}c_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \quad \text{(A.1)}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}_j\sigma_j}\delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2,\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2}g(\mathbf{k}_j,\sigma_j)R^\dagger_{\mathbf{k}'_1\sigma'_1}L^\dagger_{\mathbf{k}'_2\sigma'_2}L_{\mathbf{k}_2\sigma_2}R_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \quad \text{(A.2)}$$

(N le nombre total de sites), où, dans la deuxième ligne, nous avons négligé les couplages entre les électrons se déplaçant dans la même direction, et nous avons fixé

$$k^{(\prime)}_{1\|} > 0\ ,\ k^{(\prime)}_{2\|} < 0\ . \quad \text{(A.3)}$$

Pour simplifier la notation, nous ne spécifions pas l'appartenance à une certaine bande dans cette section. Comme w est antisymétrique par rapport à l'échange des deux particules entrantes ou sortantes,

$$w(1',2',2,1) = -w(2',1',2,1) = w(2',1',1,2), \quad \text{(A.4)}$$

on a

$$g(\mathbf{k}'_1,\sigma'_1;\mathbf{k}'_2,\sigma'_2;\mathbf{k}_2,\sigma_2;\mathbf{k}_1,\sigma_1) = w(\mathbf{k}'_1,\sigma'_1;\mathbf{k}'_2,\sigma'_2;\mathbf{k}_2,\sigma_2;\mathbf{k}_1,\sigma_1)\ . \quad \text{(A.5)}$$

Comme dans l'argument de la fonction g, nous avons fixé les signes des $k_{j\|}$ (équation (A.3)), il n'y a en général pas de relation similaire à (A.4) pour les g.

H_I se décompose de la façon suivante :

$$H_I = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}_2} H_{spin}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}_2) \ , \tag{A.6}$$

avec

$$H_{spin} = \sum_{\sigma'_1 \sigma'_2 \sigma_2 \sigma_1} \left\langle \sigma'_1 \sigma'_2 \right| A \left| \sigma_1 \sigma_2 \right\rangle R^{\dagger}_{\mathbf{k}'_1 \sigma'_1} L^{\dagger}_{\mathbf{k}'_2 \sigma'_2} L_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} R_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} \ . \tag{A.7}$$

En général, H_{spin}, A, aussi bien que les g_j qui seront définis dans la suite, sont toujours des fonctions des $\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}'_i$. (On gardera toujours l'ordre $(1', 2', 2, 1)$!) Les interactions que nous allons traiter ne changent pas les directions de spin, et elles sont invariantes par renversement du temps et par parité. Sous ces conditions, la matrice A, dans la base $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$, est donnée par

$$A_{\parallel\perp} = \begin{pmatrix} g_{\parallel} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{2\perp} & g_{\perp} & 0 \\ 0 & g_{\perp} & g_{2\perp} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{\parallel} \end{pmatrix} . \tag{A.8}$$

Afin d'étudier le comportement des paramètres g_j lors d'une rotation dans l'espace des spins, nous passons à une base singulet-triplet,

$$\begin{aligned} |s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right) \\ |t_x\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle \right) \\ |t_y\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right) \\ |t_z\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) . \end{aligned}$$

Dans cette base, A s'écrit

$$A_{st} = \begin{pmatrix} g_{2\perp} - g_{\perp} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{2\perp} + g_{\perp} \end{pmatrix} .$$

Une rotation dans l'espace des spins ne va rien changer dans le sous-espace singulet, $g_{2\perp} - g_{\perp}$ est donc invariant par rotation. Dans l'espace triplet, au contraire, les constantes $g_{\parallel}$ et $g_{2\perp} + g_{\perp}$ vont être mélangées. Pour assurer une interaction invariante par rapport aux transformations $SU(2)$ (rotations des spins), nous sommes alors obligés d'imposer que

$$g_{\parallel} = g_{2\perp} + g_{\perp}. \tag{A.9}$$

En introduisant les opérateurs de création et d'annihilation de paires d'électrons,

$$\begin{aligned} o_\alpha(\mathbf{k},\mathbf{q}) =& \sum_{\sigma'\sigma} \tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma} L_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} R_{\mathbf{k},\sigma} \ , \\ \tau^{(s)}_{\sigma'\sigma} =& \sigma\delta_{\sigma',-\sigma} \ , \\ \tau^{(t_x)}_{\sigma'\sigma} =& -\sigma\delta_{\sigma'\sigma} \ , \\ \tau^{(t_y)}_{\sigma'\sigma} =& -i\delta_{\sigma'\sigma} \ , \\ \tau^{(t_z)}_{\sigma'\sigma} =& \delta_{\sigma',-\sigma} \ , \end{aligned} \tag{A.10}$$

et les paramètres d'interaction [30]

$$g_s = g_\perp - g_{2\perp} \ , \tag{A.11}$$

$$g_t = -g_\perp - g_{2\perp} \ , \tag{A.12}$$

on peut réécrire H_{spin} de la façon suivante,

$$H_{spin} = -\frac{1}{2}\left(g_s \ o^\dagger_s(\mathbf{k}',\mathbf{q}) o_s(\mathbf{k},\mathbf{q}) + g_t \sum_{j=x,y,z} o^\dagger_{t_j}(\mathbf{k}',\mathbf{q}) o_{t_j}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \right),$$

si l'on pose $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k}'_1$, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$.

Alternativement, nous pouvons définir des opérateurs liés aux dégrés de liberté de charge et de spin, o_C et o_{S_j}, respectivement :

$$o_\alpha(\mathbf{k},\mathbf{q}) = \sum_{\sigma'\sigma} \sigma^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma} L^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma'} R_{\mathbf{k},\sigma}, \tag{A.13}$$

où $\sigma^{(C)}$ est la matrice identité dans $\mathbb{C}^2$, et les $\sigma^{(S_j)}$ sont les matrices de Pauli. Les couplages correspondants sont définis par [30]

$$g_C = g_{2\perp} + 2g_\perp \ , \tag{A.14}$$

$$g_S = g_{2\perp} \ . \tag{A.15}$$

Avec l'invariance $SU(2)$, nous avons aussi $g_S = g_\parallel - g_\perp$ (voir (A.9)), ce qui nous permet d'écrire

$$H_{spin} = -\frac{1}{2}\left(g_C \ o^\dagger_C(\mathbf{k}',\mathbf{q}) o_C(\mathbf{k},\mathbf{q}) + g_S \sum_{j=x,y,z} o^\dagger_{S_j}(\mathbf{k}',\mathbf{q}) o_{S_j}(\mathbf{k},\mathbf{q}) \right), \tag{A.16}$$

où l'on pose $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k}'_1$, $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_2$.

En conclusion, pour des interactions invariantes $SU(2)$, la fonction de couplage $g(\mathbf{k}_j, \sigma_j)$ dans (A.2) s'écrit des trois façons équivalentes suivantes

([86] et réfs. ci-inclues) :

$$\begin{aligned} g(\mathbf{k}_j,\sigma_j) &= g_{\parallel}(\mathbf{k}_j)\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\delta_{\sigma_1\sigma_2} \qquad (A.17)\\ &\quad +g_{2\perp}(\mathbf{k}_j)\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}\delta_{\sigma_1,-\sigma_2}+g_{\perp}(\mathbf{k}_j)\delta_{\sigma_1\sigma_2'}\delta_{\sigma_2\sigma_1'}\delta_{\sigma_1,-\sigma_2}\\ &= -\frac{1}{2}\Big\{g_s(\mathbf{k}_j)\left(\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}-\delta_{\sigma_1\sigma_2'}\delta_{\sigma_2\sigma_1'}\right) \qquad (A.18)\\ &\qquad +g_t(\mathbf{k}_j)\left(\delta_{\sigma_1\sigma_1'}\delta_{\sigma_2\sigma_2'}+\delta_{\sigma_1\sigma_2'}\delta_{\sigma_2\sigma_1'}\right)\Big\}\\ &= \frac{1}{2}\left\{g_C(\mathbf{k}_j)\ \delta_{\sigma_1'\sigma_2}\delta_{\sigma_2'\sigma_1}+g_S(\mathbf{k}_j)\sum_{\alpha=x,y,z}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma_1'\sigma_2}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma_2'\sigma_1}\right\} \qquad (A.19)\end{aligned}$$

A.2 Lien avec le modèle g-ologique

Les systèmes unidimensionnels sont souvent décrits par un modèle dit g-ologique [57, 179], avec

$$\begin{aligned} H_I = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}_j}\sum_{\sigma\sigma'}\Big\{&(g_{1\parallel}\delta_{\sigma,\sigma'}+g_{1\perp}\delta_{\sigma,-\sigma'})R^{\dagger}_{\mathbf{k}_1'\sigma}L^{\dagger}_{\mathbf{k}_2'\sigma'}R_{\mathbf{k}_2\sigma'}L_{\mathbf{k}_1\sigma}\\ &+(g_{2\parallel}\delta_{\sigma,\sigma'}+g_{2\perp}\delta_{\sigma,-\sigma'})R^{\dagger}_{\mathbf{k}_1'\sigma}L^{\dagger}_{\mathbf{k}_2'\sigma'}L_{\mathbf{k}_2\sigma'}R_{\mathbf{k}_1\sigma}\Big\}\,\delta_{\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2',\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1}\ , \end{aligned} \qquad (A.20)$$

si on néglige les couplages entre les électrons se déplaçant dans la même direction, qui seraient décrits par des paramètres g_3 et g_4. Récrivons les équations (A.7) à (A.8) pour les comparer à la précédente :

$$\begin{aligned} H_I = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}_j}\sum_{\sigma}\Big\{&g_{\parallel}R^{\dagger}_{\mathbf{k}_1'\sigma}L^{\dagger}_{\mathbf{k}_2'\sigma}L_{\mathbf{k}_2\sigma}R_{\mathbf{k}_1\sigma}\\ &+g_{2\perp}R^{\dagger}_{\mathbf{k}_1'\sigma}L^{\dagger}_{\mathbf{k}_2',-\sigma}L_{\mathbf{k}_2,-\sigma}R_{\mathbf{k}_1\sigma}\\ &-g_{\perp}R^{\dagger}_{\mathbf{k}_1'\sigma}L^{\dagger}_{\mathbf{k}_2',-\sigma}R_{\mathbf{k}_1,-\sigma}L_{\mathbf{k}_2\sigma}\Big\}\,\delta_{\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2',\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1}\ . \end{aligned} \qquad (A.21)$$

Si on prend les g_j indépendants des $\mathbf{k}_j$, on trouve que les $g_{2\perp}$ dans (A.20) et (A.21) sont les mêmes, et qu'on peut identifier

$$-g_{\perp}=g_{1\perp} \quad \text{et} \quad g_{\parallel}=g_{2\parallel}-g_{1\parallel}. \qquad (A.22)$$

Un des paramètres $g_{j\parallel}$ peut alors être fixé librement. D'habitude [179], on choisit

$$g_{2\parallel}=g_{2\perp}. \qquad (A.23)$$

Notons cependant que le modèle g-ologique n'est pas restreint aux interactions invariantes par rotations. Il se trouve que, l'identification (A.23) faite, une telle invariance revient à identifier $g_{1\parallel}=g_{1\perp}$ (cf. (A.9)), c'est à dire à considérer les interactions comme indépendantes du spin.

A.3 Lien avec le modèle de Hubbard

Dans le modèle de Hubbard, l'interaction est purement locale :

$$H_I = U \sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}\uparrow} n_{\mathbf{x}\downarrow} \ ,$$

où l'opérateur $n_{\mathbf{x}\sigma} = c^\dagger_{\mathbf{x}\sigma} c_{\mathbf{x}\sigma}$ compte le nombre d'électrons sur le site $\mathbf{x}$ avec spin σ. Après transformation de Fourier

$$c_{\mathbf{x}\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}} c_{\mathbf{k}\sigma} \ ,$$

on obtient (A.1) avec

$$w(\mathbf{k}'_1, \sigma'_1; \mathbf{k}'_2, \sigma'_2; \mathbf{k}_2, \sigma_2; \mathbf{k}_1, \sigma_1) = U(\delta_{\sigma'_1\sigma_1}\delta_{\sigma'_2\sigma_2} - \delta_{\sigma'_1\sigma_2}\delta_{\sigma'_2\sigma_1})$$

et donc

$$g_{\parallel} = 0, \qquad g_{2\perp} = U, \qquad g_{\perp} = -U.$$

(Rappelons que nous négligeons les couplages entre les électrons se déplaçant dans la même direction.) Ceci sera modifié lorsque l'on traitera plusieurs bandes d'énergie.

A.4 Définition alternative de la paramétrisation charge-spin

Les couplages g_C et g_S définis par les relations (A.13), (A.16) et (A.19) correspondent à des composantes de Fourier $\mathbf{q}$ des densités de charge et de spin pour lesquelles $q_{\parallel} \approx 2k_F^{1D}$. Dans la littérature, on trouve souvent des couplages g_ρ et g_σ, qui sont associés aux composantes de ces densités pour lesquelles $q_{\parallel} \approx 0$. Avec

$$o^R_\alpha(\mathbf{k}, p) := \sum_{\sigma'\sigma} \sigma^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma} R^\dagger_{\mathbf{k}\sigma'} R_{\mathbf{k}+p,\sigma}$$

(et un o^L correspondant), $g_{\rho/\sigma}$ sont définis par

$$H_{Spin} = -\frac{1}{2}\left(g_\rho \ o^R_\rho(\mathbf{k}', p) o^L_\rho(\mathbf{k}, -p) + g_\sigma \sum_{j=x,y,z} o^R_{\sigma_j}(\mathbf{k}', p) o^L_{\sigma_j}(\mathbf{k}, -p) \right)$$

(où $\mathbf{k} = \mathbf{k}'_2$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k}'_1$, $p = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'_1$), de sorte que

$$g(\mathbf{k}_j, \sigma_j) = -\frac{1}{2}\left\{ g_\rho(\mathbf{k}_j) \ \delta_{\sigma'_1\sigma_1}\delta_{\sigma'_2\sigma_2} + g_\sigma(\mathbf{k}_j) \sum_{\alpha=x,y,z} \sigma^{(\alpha)}_{\sigma'_1\sigma_1}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma'_2\sigma_2} \right\}.$$

En utilisant (A.19) et (d'après [40])

$$\sum_{\alpha=x,y,z} \sigma^{(\alpha)}_{\sigma'_1\sigma_1}\sigma^{(\alpha)}_{\sigma'_2\sigma_2} = 2\delta_{\sigma'_1\sigma_2}\delta_{\sigma'_2\sigma_1} - \delta_{\sigma'_1\sigma_1}\delta_{\sigma'_2\sigma_2},$$

nous trouvons

$$g_\rho = -\frac{1}{2}(g_C + 3g_S), \qquad g_\sigma = -\frac{1}{2}(g_C - g_S).$$

Les équations de renormalisation dans cette paramétrisation sont alors données par (3.19) avec

$$C^{\mathcal{C}}_\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \qquad C^{\mathcal{P}}_\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix},$$
$$C^{\mathcal{C}}_\sigma = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}, \qquad C^{\mathcal{P}}_\sigma = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Annexe B

Détails de la dérivation des équations de renormalisation

B.1 Fonctions de Green pour le cas avec champs bosoniques externes

Le couplage des fermions à des champs bosoniques externes h_q introduit des termes dans le Hamiltonien qui contiennent des nombres différents d'opérateurs d'annihilation et de création. En présence de tels termes, les coefficients dans le développement des fonctions génératrices (3.6) et (3.7) deviennent

$$g^{(c)}_{m'm}(K'_1,...,K'_{m'};K_m,...,K_1) = (-1)^{m'}\prod_{j=1}^{m'}\frac{\delta}{\delta J^*_{K'_j}}\prod_{j=m}^{1}\frac{\delta}{\delta J_{K_j}}\mathcal{G}_{(c)}[J^*,J]\Big|_{J^*_K=0=J_K} . \quad \text{(B.1)}$$

On identifie en particulier

$$g^{(c)}_{mm}\Big|_{h=0=h^*} = G^{(c)}_m \ .$$

Les expressions pour la transformation de Legendre (les équations (3.8) à (3.12)) et la relation (3.14) restent inaffectées par le terme additionnel S_{ext} dans l'action. Avec la définition

$$\gamma_{m'm}(K'_1,...,K'_{m'};K_m,...,K_1) = \left(\frac{N}{T}\right)^{\frac{m'+m}{2}-1}\prod_{j=1}^{m'}\frac{\delta}{\delta\phi^*_{K'_j}}\prod_{j=m}^{1}\frac{\delta}{\delta\phi_{K_j}}\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi]\Big|_{J^*_K=0=J_K} , \quad \text{(B.2)}$$

on retrouve

$$\gamma_{mm}\Big|_{h=0=h^*} = \Gamma_m \ , \text{ et}$$

$$\mathcal{G}_\Gamma[\phi^*,\phi] = \sum_{m',m=0}^{\infty} \left(\frac{T}{N}\right)^{\frac{m'+m}{2}-1} \frac{1}{m'!m!}\times$$
$$\times \sum_{\substack{K'_1\dots K'_{m'}\\ K_1\dots K_m}} \gamma_{m'm}(K'_1,...,K'_{m'};K_m,...,K_1)\times \quad \text{(B.3)}$$
$$\times\phi_{K_1}...\phi_{K_m}\phi^*_{K'_{m'}}...\phi^*_{K'_1}\ .$$

Les équations (3.16) et (3.17) restent valables même si $G_1(K';K)$ est non diagonale : Il suffit que C_K l'est.

B.2 Dérivation de l'équation de Polchinski

Nous allons calculer la dérivée de la fonction génératrice $\mathcal{G}_c[J^*,J;x]$ des fonctions de Green connectées par rapport à sa dépendance explicite en la coupure x. Cette dépendance entre uniquement par la partie Gaussienne $S_0[\psi^*,\psi;x]$ de l'action, qui, elle, est contenue, et dans l'exposant, et dans la normalisation Z. Donc :

$$\frac{\partial}{\partial x}\mathcal{G}_c[J^*,J;x] = \sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx}\Big\{G_1(K,K)$$
$$+ \frac{1}{Z_J}\int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]\psi^*_K\psi_K e^{-S[\psi^*,\psi]-(J^*,\psi)-(\psi^*,J)}\Big\}\ . \quad \text{(B.4)}$$

Comme

$$\frac{\delta^2\mathcal{G}_c}{\delta J_K\delta J^*_K} = -\Big(\frac{\delta\mathcal{G}_c}{\delta J_K}\Big)\Big(\frac{\delta\mathcal{G}_c}{\delta J^*_K}\Big)$$
$$- \frac{1}{Z_J}\int \mathcal{D}[\psi^*,\psi]\psi^*_K\psi_K e^{-S[\psi^*,\psi]-(J^*,\psi)-(\psi^*,J)}\Big\}\ , \quad \text{(B.5)}$$

on peut réécrire ce résultat sous la forme (3.16).

B.3 Développement des équations de renormalisation

B.3.1 Vertex

Récrivons la matrice $\bar{\Gamma}$ (équation (3.13)) sous la forme

$$\begin{aligned}
\bar{\Gamma}_{PK} &= -\gamma_{11}(K;K)\big\{I_{PK}+M_{PK}\big\}\ \text{, où}\\
I_{PK} &= \delta_{P,K}\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\ ,\\
M_{PK} &= -\gamma^{-1}_{11}(K;K)\begin{pmatrix}A_{PK} & B_{PK}\\ C_{PK} & D_{PK}\end{pmatrix}\ .
\end{aligned}$$

Si nous négligeons tous les vertex à $m > 2$ particules,

$$\begin{aligned}
B_{PK} &= \gamma_{20}(P,K) \\
&\quad -\sqrt{\frac{T}{N}}\sum_{K_1}\gamma_{21}(K,P;K_1)\phi_{K_1} \\
&\quad +\frac{1}{2}\,\frac{T}{N}\sum_{K_1K_2}\gamma_{22}(P,K;K_2,K_1)\phi_{K_1}\phi_{K_2}\ , \\
C_{PK} &= \gamma_{02}(P,K) \\
&\quad +\sqrt{\frac{T}{N}}\sum_{K_1'}\gamma_{12}(K_1';P,K)\phi^*_{K_1} \\
&\quad +\frac{1}{2}\,\frac{T}{N}\sum_{K_1'K_2'}\gamma_{22}(K_1',K_2';P,K)\phi^*_{K_2'}\phi^*_{K_1'}\ , \\
D_{PK} &= \delta_{P,K}\gamma_{11}(K;K)-\gamma_{11}(K;P) \\
&\quad +\sqrt{\frac{T}{N}}\sum_{K_2}\gamma_{12}(K;K_2,P)\phi_{K_2} \\
&\quad +\sqrt{\frac{T}{N}}\sum_{K_2'}\gamma_{21}(K,K_2';P)\phi^*_{K_2'} \\
&\quad +\frac{T}{N}\sum_{K_1'K_2}\gamma_{22}(K_1',K;K_2,P)\phi_{K_2}\phi^*_{K_1'}\ .
\end{aligned}$$

Avec ces définitions,

$$(I+M)^{-1} = I - IMI + IMIMI \pm \dots\ ,$$

où les termes manquants peuvent être négligés, puisque nous nous intéressons uniquement aux coefficients de monômes de la forme $\phi^*\phi$, $\phi^*\phi^*\phi\phi$, $h\phi^*\phi$, $h\phi\phi$, h^*h, ou obtenus par permutation ou conjugaison de ceux-ci. Donc

$$\begin{aligned}
&\big(\bar\Gamma^{-1}\big)_{22;KK} \approx -\gamma_{11}^{-1}(K;K)\times \\
&\quad\times\Big\{1-\big(-\gamma_{11}^{-1}(K;K)\big)D_{KK} \\
&\qquad +\sum_{K'}\big(-\gamma_{11}^{-1}(K;K)\big)\big(-\gamma_{11}^{-1}(K';K')\big)\big(-C_{KK'}B_{K'K}+D_{KK'}D_{K'K}\big)\Big\}\ .
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Les champs bosoniques h sont supposés infinitésimaux, ils ne doivent pas affecter la renormalisation des vertex Γ. Si l'on pose tous les $h = 0$, on a

$-\gamma_{11}^{-1} = -\Gamma_1^{-1} = G_1$, et (3.17) devient (toujours $\Gamma_{m>2} = 0$)

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dx}\Big\{\sum_K \Gamma_1(K;K)\phi_K\phi_K^* \\
&\quad +\frac{1}{4}\,\frac{T}{N}\sum_{\substack{K_1'K_2'\\K_2K_1}}\Gamma_2(K_1',K_2';K_2,K_1)\phi_{K_1}\phi_{K_2}\phi_{K_2'}^*\phi_{K_1'}^*\Big\} \\
&\quad =\sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx}\phi_K\phi_K^* \qquad\qquad (B.7)\\
&\quad -\frac{T}{N}\sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx}\big[G_1(K;K)\big]^2\sum_{K_2'K_1}\Gamma_2(K,K_2';K,K_1)\phi_{K_1}\phi_{K_2'}^* \\
&\quad +\left(\frac{T}{N}\right)^2\sum_{KK'}\frac{dC_K^{-1}}{dx}\big[G_1(K;K)\big]^2 G_1(K';K')\times \\
&\qquad\qquad \times\Big\{-\frac{1}{4}\sum_{\substack{K_1'K_2'\\K_2K_1}}\Gamma_2(K_1',K_2';K,K')\Gamma_2(K',K;K_2,K_1)\times \\
&\qquad\qquad\qquad \times\phi_{K_1}\phi_{K_2}\phi_{K_2'}^*\phi_{K_1'}^* \\
&\qquad\qquad -\sum_{\substack{K_1'K_2'\\K_2K_1}}\Gamma_2(K_1',K;K_2,K')\Gamma_2(K',K_2';K,K_1)\times \\
&\qquad\qquad\qquad \times\phi_{K_1}\phi_{K_2}\phi_{K_2'}^*\phi_{K_1'}^*
\end{aligned}$$

Après antisymétrisation des coefficients dans le membre de droite de cette équation, on obtient (en observant (3.2)) les équations (3.18).

B.3.2 Susceptibilités

La renormalisation des suceptibilités s'obtient selon

$$\frac{d}{dx}\chi(q',q) = -\frac{\delta^2}{\delta h^*(q')\delta h(q)}\frac{d}{dx}\gamma_{00}\Big|_{h=0}\,.$$

A partir de (B.3), (3.17) et (B.6), on trouve

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\gamma_{00} &= \frac{T}{N}\sum_K \frac{dC_K^{-1}}{dx}G_1(K;K) \\
&\quad -\frac{T}{N}\sum_{KK'}G_S(K)G_1(K';K')\times \qquad\qquad (B.8)\\
&\qquad \times\Big\{\gamma_{02}(K,K')\gamma_{20}(K',K)+\gamma_{11}(K';K)\gamma_{11}(K;K')\Big\}\,.
\end{aligned}$$

$G_1(K;K)$ ne contient pas de contribution en $h_q h^*_{q'}$ si $q, q' \neq 0$.

$$\begin{aligned} \gamma_{02}\Big|_{h=0} &= 0 \text{ et} \\ \gamma_{11}(K';K)\Big|_{h=0} &= \Gamma_1(K';K) \\ &\propto \delta_{K',K} \text{ et donc 0 si } q, q' \neq 0. \end{aligned}$$

Les γ_{02} et γ_{11} qui nous intéressent sont alors au moins linéaires en $h_q^{(*)}$, de sorte qu'il suffit, pour G_S et G_1 dans le dernier terme, de ne garder que les contributions indépendantes de h. Avec les définitions

$$\begin{aligned} R_{SC}(K_2,K_1;q) &:= \frac{\delta}{\delta h^*_q}\gamma_{02}(K_2,K_1)\Big|_{h=0} \\ (\Rightarrow\ R^*_{SC}(K'_2,K'_1;q) &= \frac{\delta}{\delta h_q}\gamma_{20}(K'_1,K'_2)\Big|_{h=0}), \\ R_{OD}(K',K;q) &:= \frac{\delta}{\delta h^*_q}\gamma_{11}(K';K)\Big|_{h=0} \\ (\Rightarrow\ R^*_{OD}(K',K;q) &= \frac{\delta}{\delta h_q}\gamma_{11}(K';K)\Big|_{h=0}), \end{aligned}$$

nous obtenons finalement pour la susceptibilité par rapport à la formation des ondes de densité

$$\frac{d}{dx}\chi_{OD}(q',q) = \frac{T}{N}\sum_{K'K} G_S(K)G_1(K';K')R_{OD}(K',K;q')R^*_{OD}(K',K;q)$$

et pour celle concernant l'appariement

$$\frac{d}{dx}\chi_{SC}(q',q) = -\frac{T}{N}\sum_{K'K} G_S(K)G_1(K';K')R_{SC}(K,K';q')R^*_{SC}(K,K';q)\ .$$

Il nous reste de trouver les équations de renormalisation pour les R. Pour la supraconductivité, par exemple, on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\Big\{\frac{1}{2}\sum_{K_2K_1}\gamma_{02}(K_2,K_1)\phi_{K_1}\phi_{K_2}\Big\} = \\ \frac{T}{N}\sum_{KK'}\frac{dC^{-1}_K}{dx}\big(-\gamma_{11}^{-1}(K;K)\big)^2\big(-\gamma_{11}^{-1}(K';K')\big)\times \\ \times\Big\{-\gamma_{02}(K,K')\times\frac{1}{2}\sum_{K_1K_2}\gamma_{22}(K',K;K_2,K_1)\phi_{K_1}\phi_{K_2} \\ +\sum_{K_1K_2}\gamma_{12}(K';K_2,K)\gamma_{12}(K;K_1,K')\phi_{K_2}\phi_{K_1}\Big\}\ . \end{aligned} \tag{B.9}$$

Les $\gamma_{12} = 0$ au départ, et comme ils sont contenus dans tous les termes contribuant à leur propre renormalisation, ils restent 0. Nous obtenons donc pour les ondes de densité :

$$\frac{d}{dl}R_{OD}(P', P; q) = \\ -\frac{T}{N}\sum_{K'K} G_S(K)G_1(K'; K)R_{OD}(K', K; q)\Gamma(K, P', K', P) \ ; \quad \text{(B.10)}$$

et pour l'appariement :

$$\frac{d}{dl}R_{SC}(P', P; q) = \\ -\frac{1}{2}\,\frac{T}{N}\sum_{K'K} G_S(K)G_1(K'; K)R_{SC}(K', K; q)\Gamma(K, K', P', P) \ . \quad \text{(B.11)}$$

Les valeurs de départ sont $\chi = 0$ et $R_{OD/SC} = f_{OD/SC}$.

B.4 Systèmes anisotropes

L'équation de renormalisation à une boucle pour le vertex à deux particules s'écrit

$$\begin{aligned}
&\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}(K_1', K_2', K_2, K_1) = \text{Cooper}(\mathcal{C}) + \text{Landau}(\mathcal{L}) + \text{Peierls}(\mathcal{P}) \\
=&-\frac{1}{2}\,\frac{T}{N}\sum_{K,K'} D^{pp}((k,m),(k',m'); k_1+k_2)\tilde{\Gamma}(K_1', K_2', K, K')\tilde{\Gamma}(K', K, K_2, K_1) \\
&+\frac{T}{N}\sum_{K,K'} D^{pt}((k,m),(k',m'); k_1'-k_1)\tilde{\Gamma}(K_1', K, K', K_1)\tilde{\Gamma}(K', K_2', K_2, K) \\
&-\frac{T}{N}\sum_{K,K'} D^{pt}((k,m),(k',m'); k_1'-k_2)\tilde{\Gamma}(K_1', K, K_2, K')\tilde{\Gamma}(K', K_2', K, K_1),
\end{aligned} \quad \text{(B.12)}$$

où les $D^{pp/pt}$ sont définis en (3.20), (3.21). Pour décrire la dépendance en spin, utilisons d'abord la représentation (A.17), voir l'annexe A. Comme il suffit, pour des interactions invariantes par $SU(2)$, de se restreindre à deux paramètres indépendants, étudions seulement la renormalisation de $g_\perp$ et $g_{2\perp}$. Les D ne dépendent pas des spins, on peut donc faire les sommes des σ immédiatement [86]. Considérons par ailleurs les r, c'est à dire les possibilités d'avoir k, k' à droite et à gauche. Si on ne s'intéresse qu'à la renormalisation de $g_\perp$ et $g_{2\perp}$, les facteurs δ en (3.20) et (3.21) imposent que $r' = -r$ pour le canal de Cooper et $r' = +$, $r = -$ pour le canal de Peierls (dès que la largeur de bande est inférieure à $2v_{F\parallel}k_{F\parallel}$ et qu'on peut négliger les processus avec

Umklapp selon la direction parallèle). Si nous supprimons pour l'instant les indices de bande, nous obtenons pour le canal de Peierls

$$\sum_{K,K'} D^{pt}(k,k';q_{\mathcal{P}}=k'_1-k_2)\ldots\Big|_{\substack{k'_{1\parallel}>0,\\ k_{2\parallel}<0}} = \sum_{\{k;k_\parallel<0\}}\sum_{\{k';k'_\parallel>0\}} D^{pt}(k,k';q_{\mathcal{P}})\sum_{\substack{r,r'\\ \sigma,\sigma'}}\delta_{r,-}\delta_{r',+}\ldots \quad \text{(B.13)}$$

Remarquons de plus que le terme "Cooper" est entièrement symétrique par rapport à l'échange $K \leftrightarrow K'$. Comme on somme de toute façon les K, K', on peut donc fixer $r=-$ ($\Rightarrow r'=+$), en enlevant le facteur $\frac{1}{2}$:

$$\frac{1}{2}\sum_{K,K'} D^{pp}(k,k';q_{\mathcal{C}}=k_1+k_2)F(K,K')\Big|_{\substack{F(K,K')=F(K',K),\\ k_{1\parallel}>0,k_{2\parallel}<0}} = \sum_{\{k;k_\parallel<0\}}\sum_{\{k';k'_\parallel>0\}} D^{pp}(k,k';q_{\mathcal{C}})\sum_{\sigma,\sigma'}F((k,\sigma),(k',\sigma'))\ . \quad \text{(B.14)}$$

Nous pouvons alors faire la sommation des r ensemble avec celle des spins, ce qui donne

$$\begin{aligned}\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_\perp(k'_1,k'_2,k_2,k_1) = & \\ & -\frac{T}{N}\sum_{k_L,k_R} D^{pp}(k_L,k_R;k_1+k_2)\times \quad \text{(B.15)}\\ & \qquad \times\Big\{\tilde{\Gamma}_\perp(k'_1,k'_2,k_L,k_R)\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k_R,k_L,k_2,k_1)\\ & \qquad\quad +\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k'_1,k'_2,k_L,k_R)\tilde{\Gamma}_\perp(k_R,k_L,k_2,k_1)\Big\}\\ & +\text{ Landau}\\ & -\frac{T}{N}\sum_{k_L,k_R} D^{pt}(k_L,k_R;k'_1-k_2)\times\\ & \qquad \times\Big\{\tilde{\Gamma}_\parallel(k'_1,k_L,k_2,k_R)\tilde{\Gamma}_\perp(k_R,k'_2,k_L,k_1)\\ & \qquad\quad +\tilde{\Gamma}_\perp(k'_1,k_L,k_2,k_R)\tilde{\Gamma}_\parallel(k_R,k'_2,k_L,k_1)\Big\}\ ,\end{aligned}$$

$$\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k_1',k_2',k_2,k_1) =$$
$$-\frac{T}{N}\sum_{k_L,k_R} D^{pp}(k_L,k_R;k_1+k_2)\times \tag{B.16}$$
$$\times\Big\{\tilde{\Gamma}_{\perp}(k_1',k_2',k_L,k_R)\tilde{\Gamma}_{\perp}(k_R,k_L,k_2,k_1)$$
$$+\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k_1',k_2',k_L,k_R)\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k_R,k_L,k_2,k_1)\Big\}$$
$$+\text{ Landau}$$

$$-\frac{T}{N}\sum_{k_L,k_R} D^{pt}(k_L,k_R;k_1'-k_2)\times$$
$$\times\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k_1',k_L,k_2,k_R)\tilde{\Gamma}_{2\perp}(k_R,k_2',k_L,k_1)\ .$$

Rappelons que, dans nos notations, les signes des composantes parallèles aux chaînes des vecteurs d'onde dans les arguments des fonctions de vertex Γ_α avec indice de spin sont fixés. Après utilisation de (A.9), ceci s'écrit d'une façon plus compacte [86] :

$$\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_{\alpha}((k_1',m_1'),(k_2',m_2'),(k_2,m_2),(k_1,m_1)) =$$
$$\frac{T}{N}\sum_{\substack{k_L,k_R\\ m_L,m_R}} D^{pp}((k_L,m_L),(k_R,m_R);k_1+k_2)\times$$
$$\times\sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i((k_1',m_1'),(k_2',m_2'),(k_L,m_L),(k_R,m_R))\times$$
$$\times\tilde{\Gamma}_j((k_R,m_R),(k_L,m_L),(k_2,m_2),(k_1,m_1))$$
$$+\frac{T}{N}\sum_{\substack{k_L,k_R\\ m_L,m_R}} D^{pt}((k_L,m_L),(k_R,m_R);k_1'-k_2)\times$$
$$\times\sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i((k_1',m_1'),(k_L,m_L),(k_2,m_2),(k_R,m_R))\times$$
$$\times\tilde{\Gamma}_j((k_R,m_R),(k_2',m_2'),(k_L,m_L),(k_1,m_1))\ , \tag{B.17}$$

où les matrices de coefficients $C^{\mathcal{C},\mathcal{P}}_{\alpha,ij}$ sont données (dans l'ordre $\left(\begin{smallmatrix}\perp,\perp & \perp,2\perp\\ 2\perp,\perp & 2\perp,2\perp\end{smallmatrix}\right)$) par

$$C^{\mathcal{C}}_{\perp} = -\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}, \qquad C^{\mathcal{P}}_{\perp} = -\begin{pmatrix}2&1\\1&0\end{pmatrix}, \tag{B.18}$$
$$C^{\mathcal{C}}_{2\perp} = -\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}, \qquad C^{\mathcal{P}}_{2\perp} = -\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}\ .$$

B.5 Calcul des bulles

B.5.1 Cas général

La présentation suit la référence [86].

Les équations de renormalisation contiennent des intégrales de la forme

$$\frac{T^2}{N^2}\sum_{\substack{kk'\\mm'}}\left(-\frac{d}{dl}\{G_l^{(0)}(k,m)G_l^{(0)}(k',m')\}\right)F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}',m'))\frac{N}{T}\delta_{k'\pm k,q}$$

avec une fonction F dont on va supposer qu'elle ne dépende pas des fréquences k_0, k_0' ; $q = k' + k$ pour le canal particule-particule et $q = k' - k$ pour les canaux particule-trou ; et les propagateurs

$$G_l^{(0)}(k,m) = \Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k},m)}\right| - \Lambda(l))G^{(0)}(k,m),$$

munis d'une coupure infrarouge

$$\Lambda(l) = \Lambda_0 e^{-l}.$$

$G^{(0)}$ est le propagateur libre

$$G^{(0)}(k,m) = \frac{-1}{ik_0 - \xi_{(\mathbf{k},m)}}$$

avec $\xi_{(\mathbf{k},m)} = \epsilon_{(\mathbf{k},m)} - \mu$, où $\epsilon_{(\mathbf{k},m)}$ est la dispersion et μ le potentiel chimique. En général, $G^{(0)}$ contient un facteur $1_{bande}(m,\mathbf{k})$ de plus, qui est 1 si la bande m contient un état labellisé $\mathbf{k}$, et 0 sinon. Pour simplifier la notation, nous n'allons pas expliciter cette fonction dans les calculs qui suivent, mais plutôt la rajouter lorsque nous traitons des systèmes précis.

Nous avons trouvé dans l'annexe B.4 que l'on peut prendre k à gauche et k' à droite, $k_\parallel < 0$ et $k'_\parallel > 0$. Calculons alors ces sommes. Pour le canal

particule-particule, on obtient

$$
\begin{aligned}
&\frac{a}{\pi v_{F\|}} \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L,m_L),(k_R,m_R);q) F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R))\Big|_{\substack{k_{L\|}<0 \\ k_{R\|}>0}} \\
=&\Lambda \times \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_L \mathbf{k}_R \\ m_L m_R}} \left\{\delta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}\right|-\Lambda)\Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)}\right|-\Lambda) + (\quad \delta \leftrightarrow \Theta \quad)\right\} \times \\
&\qquad \times T \sum_{k_0} \frac{-1}{ik_0 - \xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}} \times \frac{-1}{-ik_0 + iq_0 - \xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)}} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R)) N \delta_{\mathbf{k_L}+\mathbf{k_R},\mathbf{q}}\Big|_{\substack{k_{L\|}<0 \\ k_{R\|}>0}} \\
=&-\Lambda \times \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_L \mathbf{k}_R \\ m_L m_R}} \left\{\delta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}\right|-\Lambda)\Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)}\right|-\Lambda) + (\quad \delta \leftrightarrow \Theta \quad)\right\} \times \\
&\qquad \times \frac{n_{FD}(\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}) - n_{FD}(-\xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)})}{\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)} + \xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)} - iq_0} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R)) N \delta_{\mathbf{k_L}+\mathbf{k_R},\mathbf{q}}\Big|_{\substack{k_{L\|}<0 \\ k_{R\|}>0}} .
\end{aligned}
\tag{B.19}
$$

Passons aux variables (ϕ, ξ), où $\xi = \xi_{(\mathbf{k},m)}$, et où ϕ décrit la direction du vecteur $\mathbf{k}$. (ϕ n'est pas forcément un angle. Une alternative courante est que

ϕ désigne la projection de $\mathbf{k}$ sur la surface de Fermi.) Nous obtenons

$$\begin{aligned}
&\frac{a}{\pi v_{F\parallel}} \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L,m_L),(k_R,m_R);q) F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R))\Big|_{\substack{k_{L\parallel}<0 \\ k_{R\parallel}>0}} \\
&\quad = -\sum_{\nu=\pm 1}\sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\nu\Lambda)\Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}',m')}\right|-\Lambda)\times \\
&\qquad\qquad \times (n_{FD}(\nu\Lambda)-n_{FD}(-\xi_{(\mathbf{k}',m')}))\times \\
&\qquad\qquad \times \frac{\Lambda}{\nu\Lambda+\xi_{(\mathbf{k}',m')}-iq_0}\times \\
&\qquad\qquad \times F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}',m'))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\nu\Lambda,m),k_\parallel<0, \\ \mathbf{k}'=-\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\
&\quad\quad -\sum_{\nu=\pm 1}\sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\nu\Lambda)\Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}',m')}\right|-\Lambda)\times \\
&\qquad\qquad \times (n_{FD}(\xi_{(\mathbf{k}',m')})-n_{FD}(-\nu\Lambda))\times \\
&\qquad\qquad \times \frac{\Lambda}{\xi_{(\mathbf{k}',m')}+\nu\Lambda-iq_0}\times \\
&\qquad\qquad \times F((\mathbf{k}',m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\nu\Lambda,m),k_\parallel>0, \\ \mathbf{k}'=-\mathbf{k}+\mathbf{q}}}
\end{aligned} \tag{B.20}$$

avec le Jacobien $J_m(\phi,\xi) = |\left|\frac{\partial(k_\perp,k_\parallel)}{\partial(\phi,\xi)}\right||$. En profitant de

$$n_{FD}(a)-n_{FD}(b) = -\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta a}{2}-\tanh\frac{\beta b}{2}\right),$$

nous pouvons réécrire l'équation pour la bulle comme suit :

$$\begin{aligned}
&\frac{a}{\pi v_{F\parallel}} \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L,m_L),(k_R,m_R);q) F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R))\Big|_{\substack{k_{L\parallel}<0 \\ k_{R\parallel}>0}} \\
&\quad = \sum_{\nu=\pm 1}\sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\nu\Lambda)\Theta(\left|\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}\right|-\Lambda)\times \\
&\qquad\qquad \times \frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2}+\tanh\frac{\beta\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}}{2}\right)\frac{\Lambda}{\nu\Lambda+\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}-iq_0}\times \\
&\qquad\qquad \times F((\mathbf{k},m),(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\nu\Lambda,m) \\ k_\parallel<0}}
\end{aligned} \tag{B.21}$$

$$= \sum_{\nu=\pm 1} \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi, \nu\Lambda) \Theta(\left|\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}\right| - \Lambda) \times$$
$$\times \frac{1}{2} \left(\tanh \frac{\beta\nu\Lambda}{2} + \tanh \frac{\beta\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}}{2} \right) \frac{\Lambda}{\nu\Lambda + \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - iq_0} \times$$
$$\times F((-\mathbf{k}+\mathbf{q}, m'), (\mathbf{k}, m))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\nu\Lambda,m) \\ k_\parallel > 0}} . \tag{B.22}$$

Dans la limite $T \to 0$,

$$\frac{a}{\pi v_{F\parallel}} \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L, m_L), (k_R, m_R); q) F((\mathbf{k}_L, m_L), (\mathbf{k}_R, m_R))\Big|_{\substack{k_{L\parallel} < 0 \\ k_{R\parallel} > 0}}$$
$$\longrightarrow \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi, \Lambda) \Theta(\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda + \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - iq_0} \times$$
$$\times F((\mathbf{k}, m), (-\mathbf{k}+\mathbf{q}, m'))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\Lambda,m) \\ k_\parallel < 0}}$$
$$+ \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi, \Lambda) \Theta(\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda + \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - iq_0} \times$$
$$\times F((-\mathbf{k}+\mathbf{q}, m'), (\mathbf{k}, m))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\Lambda,m) \\ k_\parallel > 0}}$$
$$+ \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi, -\Lambda) \Theta(-\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda - \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} + iq_0} \times$$
$$\times F((\mathbf{k}, m), (-\mathbf{k}+\mathbf{q}, m'))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,-\Lambda,m) \\ k_\parallel < 0}}$$
$$+ \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi, -\Lambda) \Theta(-\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda - \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} + iq_0} \times$$
$$\times F((-\mathbf{k}+\mathbf{q}, m'), (\mathbf{k}, m))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,-\Lambda,m) \\ k_\parallel > 0}} . \tag{B.23}$$

Pour raisons de continuité, on va prendre

$$\Theta(0) = \frac{1}{2}.$$

Nous allons toujours utiliser $\phi = (r, k_\perp)$ et des dispersions linéarisées selon la direction $k_\parallel$ avec une même vitesse de Fermi $v_{F\parallel}$ partout, en particulier

indépendante de la bande. Le Jacobien devient donc $J_m(\phi,\xi)=\frac{1}{v_{F\parallel}}$, et

$$
\begin{aligned}
&\frac{a}{\pi v_{F\parallel}}\sum_{\substack{k_L k_R\\ m_L m_R}} D^{pp}((k_L,m_L),(k_R,m_R);q)F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R))\Big|_{\substack{k_{L\parallel}<0\\ k_{R\parallel}>0}}\\
&\quad=\sum_{\nu}\sum_{m,m'} ab\int\frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}}\Bigg\{\ \Theta(\left|\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}\right|-\Lambda)\times\\
&\qquad\qquad\times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2}+\tanh\frac{\beta\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}}{2}\right)\times\\
&\qquad\qquad\times\frac{\Lambda}{\nu\Lambda+\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}-iq_0}\times\\
&\qquad\qquad\times F((\mathbf{k},m),(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=\nu\Lambda\\ k_\parallel<0}}\\
&\qquad+\Theta(\left|\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}\right|-\Lambda)\times\\
&\qquad\qquad\times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2}+\tanh\frac{\beta\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}}{2}\right)\times\\
&\qquad\qquad\times\frac{\Lambda}{\nu\Lambda+\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}-iq_0}\times\\
&\qquad\qquad\times F((-\mathbf{k}+\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=\nu\Lambda\\ k_\parallel>0}}\ \Bigg\}
\end{aligned}
\tag{B.24}
$$

$$
\begin{aligned}
\overset{T\to 0}{\longrightarrow} \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}} \Theta(\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda + \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - iq_0} \times \\
\times F((\mathbf{k},m),(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')) \Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=\Lambda \\ k_\parallel<0}} \\
+ \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}} \Theta(\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda + \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - iq_0} \times \\
\times F((-\mathbf{k}+\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m)) \Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=\Lambda \\ k_\parallel>0}} \\
+ \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}} \Theta(-\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda - \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} + iq_0} \times \\
\times F((\mathbf{k},m),(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')) \Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=-\Lambda \\ k_\parallel<0}} \\
+ \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}} \Theta(-\xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda - \xi_{(-\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} + iq_0} \times \\
\times F((-\mathbf{k}+\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m)) \Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=-\Lambda \\ k_\parallel>0}} .
\end{aligned}
\tag{B.25}
$$

Le calcul pour le canal particule-trou est analogue :

$$
\begin{aligned}
&\frac{a}{\pi v_{F\|}} \sum_{\substack{k_L k_R \\ m_L m_R}} D^{pt}((k_L,m_L),(k_R,m_R);q) F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R))\Big|_{\substack{k_{L\|}<0 \\ k_{R\|}>0}} \\
&= \Lambda \times \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k_L k_R} \\ m_L m_R}} \left\{ \delta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}\right| - \Lambda)\Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)}\right| - \Lambda) + (\quad \delta \leftrightarrow \Theta \quad) \right\} \times \\
&\qquad \times T \sum_{k_0} \frac{-1}{ik_0 - \xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}} \times \frac{-1}{ik_0 + iq_0 - \xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)}} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R)) N \delta_{\mathbf{k_R},\mathbf{k_L}+\mathbf{q}} \Big|_{\substack{k_{L\|}<0 \\ k_{R\|}>0}} \\
&= \Lambda \times \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k_L k_R} \\ m_L m_R}} \left\{ \delta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}\right| - \Lambda)\Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)}\right| - \Lambda) + (\quad \delta \leftrightarrow \Theta \quad) \right\} \times \\
&\qquad \times \frac{n_{FD}(\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)}) - n_{FD}(\xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)})}{\xi_{(\mathbf{k}_L,m_L)} - \xi_{(\mathbf{k}_R,m_R)} + iq_0} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R)) N \delta_{\mathbf{k_R},\mathbf{k_L}+\mathbf{q}} \Big|_{\substack{k_{L\|}<0 \\ k_{R\|}>0}} \\
&= - \sum_{\nu=\pm 1} \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\nu\Lambda) \Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}\right| - \Lambda) \times \\
&\qquad \times \frac{1}{2} \left(\tanh \frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh \frac{\beta \xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}}{2} \right) \times \\
&\qquad \times \frac{\Lambda}{\nu\Lambda - \xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} + iq_0} F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=\nu\Lambda, \\ k_\| <0}} \\
&\quad - \sum_{\nu=\pm 1} \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\nu\Lambda) \Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}\right| - \Lambda) \times \\
&\qquad \times \frac{1}{2} \left(\tanh \frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh \frac{\beta \xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}}{2} \right) \times \\
&\qquad \times \frac{\Lambda}{\nu\Lambda - \xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')} - iq_0} F((\mathbf{k}-\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{\xi_{(\mathbf{k},m)}=\nu\Lambda, \\ k_\| >0}}
\end{aligned}
\tag{B.26}
$$

$$
\begin{aligned}
\overset{T\to 0}{\longrightarrow} &- \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\Lambda)\Theta(-\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}-\Lambda)\frac{\Lambda}{\Lambda-\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}+iq_0}\times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\Lambda,m)\\ k_\parallel<0}} \\
&- \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,-\Lambda)\Theta(\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}-\Lambda)\frac{\Lambda}{\Lambda+\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}-iq_0}\times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,-\Lambda,m)\\ k_\parallel<0}} \\
&- \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,\Lambda)\Theta(-\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}-\Lambda)\frac{\Lambda}{\Lambda-\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}-iq_0}\times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}-\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,\Lambda,m)\\ k_\parallel>0}} \\
&- \sum_{mm'} ab \int \frac{d\phi}{4\pi^2} J_m(\phi,-\Lambda)\Theta(\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}-\Lambda)\frac{\Lambda}{\Lambda+\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}+iq_0}\times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}-\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{\mathbf{k}=\mathbf{k}(\phi,-\Lambda,m)\\ k_\parallel>0}} \ .
\end{aligned}
\tag{B.27}
$$

Avec $\phi=(r,k_\perp)$, nous obtenons finalement

$$
\begin{aligned}
&\frac{a}{\pi v_{F\parallel}} \sum_{\substack{k_L k_R\\ m_L m_R}} D^{pt}((k_L,m_L),(k_R,m_R);q)F((\mathbf{k}_L,m_L),(\mathbf{k}_R,m_R))\Big|_{\substack{k_{L\parallel}<0\\ k_{R\parallel}>0}} \\
=&-\sum_\nu \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}} \Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}\right|-\Lambda)\times \\
&\qquad \times \frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2}-\tanh\frac{\beta\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}}{2}\right)\times \\
&\qquad \times \frac{\Lambda}{\nu\Lambda-\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')}+iq_0}F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{k_\parallel<0\\ \xi_{(\mathbf{k},m)}=\nu\Lambda}} \\
&-\sum_\nu \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\parallel}} \Theta(\left|\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}\right|-\Lambda)\times \\
&\qquad \times \frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2}-\tanh\frac{\beta\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}}{2}\right)\times \\
&\qquad \times \frac{\Lambda}{\nu\Lambda-\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')}-iq_0}F((\mathbf{k}-\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{k_\parallel>0\\ \xi_{(\mathbf{k},m)}=\nu\Lambda}}
\end{aligned}
\tag{B.28}
$$

$$
\begin{aligned}
\stackrel{T\to 0}{\longrightarrow} &- \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\|}} \Theta(-\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda - \xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} + iq_0} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{k_\| <0 \\ \xi_{(\mathbf{k},m)}=\Lambda}} \\
&- \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\|}} \Theta(\xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda + \xi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q},m')} - iq_0} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k},m),(\mathbf{k}+\mathbf{q},m'))\Big|_{\substack{k_\| <0 \\ \xi_{(\mathbf{k},m)}=-\Lambda}} \\
&- \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\|}} \Theta(-\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda - \xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')} - iq_0} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}-\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{k_\| >0 \\ \xi_{(\mathbf{k},m)}=\Lambda}} \\
&- \sum_{m,m'} ab \int \frac{dk_\perp}{4\pi^2 v_{F\|}} \Theta(\xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')} - \Lambda) \frac{\Lambda}{\Lambda + \xi_{(\mathbf{k}-\mathbf{q},m')} + iq_0} \times \\
&\qquad \times F((\mathbf{k}-\mathbf{q},m'),(\mathbf{k},m))\Big|_{\substack{k_\| >0 \\ \xi_{(\mathbf{k},m)}=-\Lambda}} .
\end{aligned}
\tag{B.29}
$$

B.5.2 Bulles pour un système quasi-unidimensionnel avec une bande

Appliquons les équations de renormalisation au modèle le plus simple d'un conducteur quasi-unidimensionnel avec une seule bande. La dispersion, linéarisée dans la direction des chaînes, s'écrit

$$
\begin{aligned}
\epsilon(r,k_\|,k_\perp) &= v_F(rk_\| - k_F^{1D}) + \epsilon_\perp(k_\perp), \\
\epsilon_\perp(k_\perp) &= -2t_\perp \cos k_\perp - 2t'_\perp \cos 2k_\perp .
\end{aligned}
$$

Pour un $\mathbf{k}$ placé sur la coupure d'énergie $\nu\Lambda$, avec r et $k_\perp$ donnés, il faut que

$$
k_\| = r\left(k_F^{1D} + \frac{\nu\Lambda - \epsilon_\perp(k_\perp)}{v_F}\right).
$$

D'après la section B.4, $r' = -r$ dans les deux canaux de renormalisation. Pour le canal de Cooper, on a $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} + \mathbf{q}$, avec $\mathbf{q}$ imposé par les jambes extérieures du vertex qu'on renormalise, ce qui donne (si $\mu = 0$)

$$
\xi_{\mathbf{k}'} = \nu\Lambda - \epsilon_\perp(k_\perp) + \epsilon_\perp(-k_\perp + q_\perp) - rv_F q_\| .
$$

Pour le canal de Cooper, nous allons toujours prendre $q_\| = 0$, voir la discussion dans la section 4.1.3. De même, nous allons poser la fréquence de

Matsubara $q_0 = 0$. Tout ceci pris en compte, (B.24) donne

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_L k_R} D^{pp}(k_L, k_R; q) F(\mathbf{k}_L, \mathbf{k}_R)\Big|_{\substack{k_{L\|}<0, k_{R\|}>0, \\ q_0=0, q_\|=0}} \\
&= \frac{1}{2N_\perp} \sum_{k_\perp} \sum_{\nu=\pm 1} 1_{bande}(\nu, k_\perp) \Theta(|\nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp)| - \Lambda) \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \left(\tanh \frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh \frac{-\beta(\nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp))}{2} \right) \frac{\Lambda}{2\nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp)} \times \\
&\quad \times (F((-, k_\perp), (+, -k_\perp + q_\perp)) + F((-, -k_\perp + q_\perp), (+, k_\perp)))
\end{aligned} \tag{B.30}$$

avec

$$\begin{aligned}
A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp) &= -\epsilon_\perp(k_\perp) + \epsilon_\perp(-k_\perp + q_\perp) \text{ et} \\
1_{bande}(\nu, k_\perp) &= \Theta(v_{F\|}\kappa_0 - |\Lambda - \nu\epsilon_\perp(k_\perp)|).
\end{aligned}$$

(La fonction 1_{bande} assure l'appartenance de $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ à la bande d'énergie.) Comme $A_{\mathcal{C}}(-k_\perp + q_\perp, q_\perp) = -A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp)$, un changement de variables ($k_\perp \mapsto \tilde{k}_\perp = -k_\perp + q_\perp$, $\nu \mapsto \tilde{\nu} = -\nu$) transforme exactement le premier terme dans (B.30) en le second, sauf les fonctions 1_{bande}. Nous pouvons alors écrire :

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_L k_R} D^{pp}(k_L, k_R; q) F(\mathbf{k}_L, \mathbf{k}_R)\Big|_{\substack{k_{L\|}<0, k_{R\|}>0, \\ q_0=0, q_\|=0}} \\
&\quad = \frac{1}{N_\perp} \sum_{k_\perp} \sum_{\nu=\pm 1} \Theta(|\nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp)| - \Lambda) \times \\
&\qquad\qquad \times \frac{1}{2} \left(1_{bande}(\nu, k_\perp) + 1_{bande}(\nu, -k_\perp + q_\perp)\right) \times \\
&\qquad\qquad \times \frac{1}{2} \left(\tanh \frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh \frac{-\beta(\nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp))}{2} \right) \times \\
&\qquad\qquad \times \frac{\Lambda}{2\nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp)} F((-, -k_\perp + q_\perp), (+, k_\perp)) \\
&\quad \xrightarrow{T\to 0} \frac{1}{N_\perp} \sum_{k_\perp} \frac{1}{2} \big(1_{bande}(\mathrm{sign}(A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp), k_\perp) + \\
&\qquad\qquad + 1_{bande}(\mathrm{sign}(A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp), -k_\perp + q_\perp)\big) \times \\
&\qquad\qquad \times \frac{\Lambda}{2\Lambda + |A_{\mathcal{C}}(k_\perp, q_\perp)|} F((-, -k_\perp + q_\perp), (+, k_\perp)) \ .
\end{aligned} \tag{B.31}$$

En ce qui concerne le canal de Peierls, on rappelle que, si on applique l'équation de renormalisation (B.12) aux vertex Γ définis en (A.5), on aura

toujours affaire à des transferts de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ dont la composante selon la direction parallèle aux chaînes est de l'ordre de $2k_F^{1D}$,

$$q_\parallel = +2k_F^{1D} + \tilde{q}_\parallel,$$

ce qui fixe déjà r, r' pour les propagateurs internes du diagramme Peierls, comme on l'a vu dans l'annexe B.4. On obtient alors pour les énergies (toujours avec $\mu = 0$)

– pour $\mathbf{k}$ donné par $r = -$, $k_\perp$ et $\xi_{\mathbf{k}} = \nu\Lambda$, et $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$:

$$\xi_{\mathbf{k}'} = -\nu\Lambda + \epsilon_\perp(k_\perp) + \epsilon_\perp(k_\perp + q_\perp) + v_F\tilde{q}_\parallel;$$

– pour $\mathbf{k}$ donné par $r = +$, $k_\perp$ et $\xi_{\mathbf{k}} = \nu\Lambda$, et $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$:

$$\xi_{\mathbf{k}'} = -\nu\Lambda + \epsilon_\perp(k_\perp) + \epsilon_\perp(k_\perp - q_\perp) + v_F\tilde{q}_\parallel.$$

Avec un choix des fréquences externes tel que $q_0 = 0$,

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_L k_R} D^{pt}(k_L, k_R; q) F(\mathbf{k}_L, \mathbf{k}_R)\Big|_{\substack{k_{L\parallel}<0, k_{R\parallel}>0,\\ q_0=0}} \\
&= -\frac{1}{2N_\perp}\sum_{k_\perp}\sum_{\nu=\pm1}\Theta(\big|\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_\perp, \tilde{q}_\parallel)\big| - \Lambda)\times \\
&\qquad\qquad \times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh\frac{-\beta(\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_\perp, \tilde{q}_\parallel))}{2}\right)\times \\
&\qquad\qquad \times\frac{\Lambda}{2\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_\perp, \tilde{q}_\parallel)} F((-, k_\perp), (+, k_\perp + q_\perp)) \\
&\quad -\frac{1}{2N_\perp}\sum_{k_\perp}\sum_{\nu=\pm1}\Theta(\big|\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp, -q_\perp, \tilde{q}_\parallel)\big| - \Lambda)\times \\
&\qquad\qquad \times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh\frac{-\beta(\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp, -q_\perp, \tilde{q}_\parallel))}{2}\right)\times \\
&\qquad\qquad \times\frac{\Lambda}{2\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp, -q_\perp, \tilde{q}_\parallel)} F((-, k_\perp - q_\perp), (+, k_\perp)) \text{ , où}
\end{aligned} \tag{B.32}$$

$$A_{\mathcal{P}}(k_\perp, q_\perp, \tilde{q}_\parallel) = -\epsilon_\perp(k_\perp) - \epsilon_\perp(k_\perp + q_\perp) - v_F\tilde{q}_\parallel.$$

La transformation $k_\perp \mapsto \tilde{k}_\perp = k_\perp - q_\perp$ dans la deuxième intégrale montre

qu'elle est équivalente à la première, de sorte que

$$\begin{aligned}
&\sum_{k_L k_R} D^{pt}(k_L,k_R;q)F(\mathbf{k}_L,\mathbf{k}_R)\Big|_{\substack{k_{L\|}<0,k_{R\|}>0,\\ q_0=0}} \\
&= -\frac{1}{N_\perp}\sum_{k_\perp}\sum_{\nu=\pm 1}\Theta(\left|\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp,q_\perp,\tilde{q}_\parallel)\right| - \Lambda)\times \\
&\qquad\qquad \times\frac{1}{2}\left(\tanh\frac{\beta\nu\Lambda}{2} - \tanh\frac{-\beta(\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp,q_\perp,\tilde{q}_\parallel))}{2}\right)\times \\
&\qquad\qquad \times\frac{\Lambda}{2\nu\Lambda + A_{\mathcal{P}}(k_\perp,q_\perp,\tilde{q}_\parallel)}F((-,k_\perp),(+,k_\perp+q_\perp)) \\
&\overset{T\to 0}{\longrightarrow} -\frac{1}{N_\perp}\sum_{k_\perp}\times\frac{\Lambda}{2\Lambda + \left|A_{\mathcal{P}}(k_\perp,q_\perp,\tilde{q}_\parallel)\right|}F((-,k_\perp),(+,k_\perp+q_\perp))\ .
\end{aligned} \tag{B.33}$$

En insérant ces résultats dans l'équation (3.19), nous obtenons finalement les équations de renormalisation (4.1).

B.5.3 Le cas de deux bandes

Avec $\mathbf{k}$ fixé par r, $k_\perp$, m et la condition $\xi_{(\mathbf{k},m)} = \nu\Lambda$, on obtient les expressions suivantes pour $\xi_{(\mathbf{k}',m')}$: Dans le canal de Cooper, $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} + \mathbf{q}$ avec $q_\parallel$ suffisamment petit pour que $r' = -r$. Donc

$$\begin{aligned}
\xi_{(\mathbf{k}',m')} &= \nu\Lambda + A_{\mathcal{C}}(m,m',r,k_\perp,q_\parallel,q_\perp)\ , \\
A_{\mathcal{C}}(m,m',r,k_\perp,q_\parallel,q_\perp) &= -\epsilon_\perp(k_\perp,m) + \epsilon_\perp(-k_\perp+q_\perp,m') - rv_{F\parallel}q_\parallel\ .
\end{aligned}$$

Dans le canal de Peierls, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - r\mathbf{q}$ avec $q_\parallel = 2k_F^{1D} + \tilde{q}_\parallel$ tel que $r' = -r$, ce qui donne

$$\begin{aligned}
\xi_{(\mathbf{k}',m')} &= -\nu\Lambda - A_{\mathcal{P}}(m,m',r,k_\perp,\tilde{q}_\parallel,q_\perp), \\
A_{\mathcal{P}}(m,m',r,k_\perp,\tilde{q}_\parallel,q_\perp) &= -\epsilon_\perp(k_\perp,m) - \epsilon_\perp(k_\perp - rq_\perp,m') - v_{F\parallel}\tilde{q}_\parallel\ .
\end{aligned}$$

La suite du calcul est analogue au cas d'une bande.

Annexe C

Effet des fluctuations unidimensionnelles sur l'onde de densité de spin : Passage dimensionnel continu

La température de transition vers un ordre d'onde de densité de spin dans un conducteur quasi-unidimensionnel peut être obtenue par un calcul en RPA, c'est à dire en nous restreignant au canal de Peierls. Pour tenir compte de l'effet des fluctuations unidimensionnelles, qui réduisent fortement la température à laquelle l'ordre est établi, on peut remplacer l'interaction nue par une interaction renormalisée par le régime unidimensionnel. Ceci revient à une coupure franche entre les deux régimes de dimensionnalité, avec couplage total des canaux dans le régime unidimensionnel et pas de couplage de canaux du tout dans le régime bidimensionnel.

D'une façon alternative, on peut passer d'un régime à l'autre plus graduellement [26] : Pour la plupart des couplages qui entrent dans le calcul RPA, on a

$$q_{\mathcal{P}\perp} = \pi/b \text{ et } q_{\mathcal{C}\perp} \neq 0. \tag{C.1}$$

Nous allons appliquer les équations de renormalisation (4.1) en supposant que (C.1) est vrai pour *tous* les couplages (en choisissant $q_{\mathcal{C}\perp} := \pi/2b$). Si nous mettons $T = 0$ afin de simplifier la discussion, nous obtenons

- dans le régime unidimensionnel : $B_{\mathcal{P}} \approx \frac{1}{2} \approx B_{\mathcal{C}}$,
- dans le régime bidimensionnel : $B_{\mathcal{P}} \approx \frac{1}{2} \gg B_{\mathcal{C}}$.

Avec les définitions

$$\begin{aligned} I_{1D} &:= \int_{-\pi/b}^{\pi/b} \frac{dk_\perp}{2\pi/b} B_{\mathcal{C}}, \\ I_{2D} &:= \int_{-\pi/b}^{\pi/b} \frac{dk_\perp}{2\pi/b} \big(B_{\mathcal{P}} - B_{\mathcal{C}}\big) \ , \end{aligned}$$

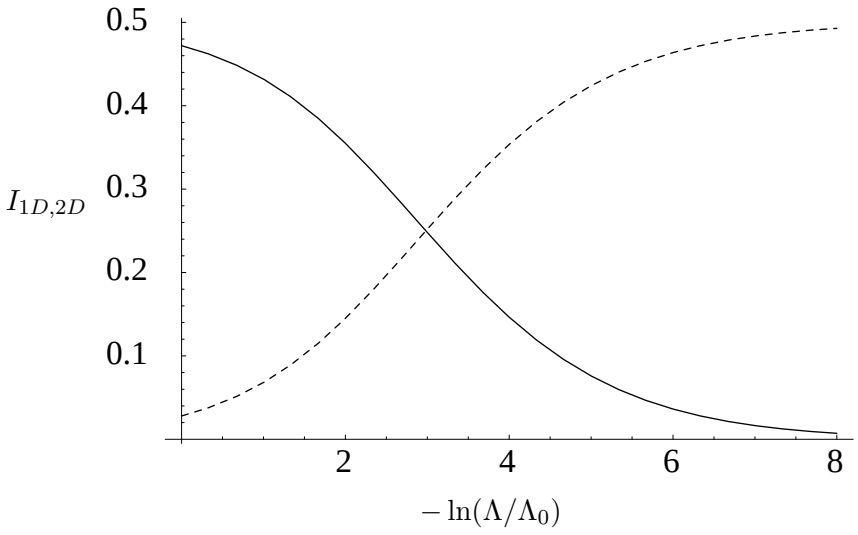


FIG. C.1 – Les facteurs dimensionnels I_{1D} (ligne noire) et I_{2D} (en pointillé) en fonction du paramètre de flot, avec $\Lambda_0 = 15t_\perp$. Pour comparaison : $\Lambda_{x1} = t_\perp/\pi$ correspond à $\left(-\ln(\Lambda_{x1}/\Lambda_0)\right) \approx 3.85$.

on peut réorganiser les équations de renormalisation selon le régime dimensionnel,

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{\Gamma}_\alpha}{dl} &= I_{1D}\sum_{ij}\left(C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i\tilde{\Gamma}_j - C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i\tilde{\Gamma}_j\right)\\ &\quad -I_{2D}\sum_{ij}C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\tilde{\Gamma}_i\tilde{\Gamma}_j.\end{aligned}$$

L'allure des facteurs dimensionnels est montrée dans la Fig. C.1.

Annexe D

Susceptibilités libres pour un système quasi-unidimensionnel à deux bandes

Nous définissons des opérateurs qui correspondent au paramètre d'ordre supraconducteur singulet ($\alpha = s$) ou triplet ($\alpha = t$) comme suit :

$$\mathcal{O}^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x},\tau) := \sum_{\sigma'\sigma}\sum_{\mathbf{y}} c_{\sigma'}(\mathbf{x},\tau)\tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}\Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y})c_{\sigma}(\mathbf{y},\tau),$$

où τ est un temps imaginaire, et les matrices $\tau^{(\alpha)}$ sont définies dans (A.10). La fonction Υ décrit la symétrie spatiale des paires de Cooper en question. Pour une paire singulet, on peut par exemple considérer une symétrie de type

- s : $$\Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \ ; \tag{D.1}$$
- d : $$\Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\delta_{x_\parallel,y_\parallel}(\delta_{x_\perp,y_\perp-b} + \delta_{x_\perp,y_\perp+b}) \ ; \tag{D.2}$$
- g : $$\Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\delta_{x_\parallel,y_\parallel}(\delta_{x_\perp,y_\perp-2b} + \delta_{x_\perp,y_\perp+2b}) \ . \tag{D.3}$$

La susceptibilité libre correspondante est définie par

$$\chi_0^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};\tau'-\tau) := \langle \hat{T}_\tau \mathcal{O}^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x}',\tau')\mathcal{O}^{(\alpha,\Upsilon)^\dagger}(\mathbf{x},\tau)\rangle_0.$$

On prendra la valeur moyenne par rapport au Hamiltonien sans interactions H_0. Comme les états propres de H_0 ne mélangent pas les états de spins différents, et comme $\tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}\Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y})$ est antisymétrique par rapport à l'échange simultané $\sigma' \leftrightarrow \sigma$, $\mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{y}$,

$$\chi_0^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};\tau'-\tau) = \\ 2\sum_{\sigma'\sigma}\left|\tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}\right|\sum_{\mathbf{y}'\mathbf{y}}\Upsilon(\mathbf{x}',\mathbf{y}')\Upsilon^*(\mathbf{x},\mathbf{y})G^{(0)}_{\sigma'}(\mathbf{x}',\mathbf{x};\tau'-\tau)G^{(0)}_{\sigma}(\mathbf{y}',\mathbf{y};\tau'-\tau) \tag{D.4}$$

avec

$$G_\sigma^{(0)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};\tau'-\tau)=\langle \hat{T}_\tau c_\sigma(\mathbf{x}',\tau')c_\sigma^\dagger(\mathbf{x},\tau)\rangle_0.$$

Après transformation de Fourier par rapport au temps imaginaire,

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};i\omega_0)\\
&\quad=T\int_0^\beta d\tau\int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_0(\tau'-\tau)}\chi_0^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};\tau'-\tau)\\
&\quad=2\sum_{\sigma'\sigma}\left|\tau^{(\alpha)}_{\sigma'\sigma}\right|\sum_{\mathbf{y}'\mathbf{y}}\Upsilon(\mathbf{x}',\mathbf{y}')\Upsilon^*(\mathbf{x},\mathbf{y})\times\\
&\qquad\qquad\times T\sum_\omega G^{(0)}_{L\sigma'}(\mathbf{x}',\mathbf{x};i\omega)G^{(0)}_{R\sigma}(\mathbf{y}',\mathbf{y};i(-\omega+\omega_0)).
\end{aligned}\tag{D.5}$$

Les fonctions de Green peuvent être exprimées en termes des fonctions d'onde $\phi^m_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ des états propres de H_0 :

$$\begin{aligned}
G_\sigma^{(0)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};i\omega) &= \sum_{m,\mathbf{k}}\frac{\phi^m_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')\left(\phi^m_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})\right)^*}{i\omega-\epsilon^m_{\mathbf{k}}},\\
\phi^m_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\sqrt{N}}e^{ik_\parallel x_\parallel}\sum_{\vartheta\in\{o,\pi\}}\left(\gamma^{m\vartheta}_{k_\perp}\right)^* e^{i(k_\perp+\frac{\vartheta}{b})x_\perp}.
\end{aligned}$$

La transformation de Fourier dans l'espace donne pour la supraconductivité singulet

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(s,\Upsilon)}(\mathbf{q}',\mathbf{q};i\omega_0)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{x}'}e^{-i\mathbf{q}'.\mathbf{x}'}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{x}}e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{x}}\chi_0^{(\alpha,\Upsilon)}(\mathbf{x}',\mathbf{x};i\omega_0)\\
&=\frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\sum_{m'm}\sum_{\vartheta'\vartheta}\delta_{q'_\parallel,q_\parallel}\delta_{q_\parallel,k'_\parallel+k_\parallel}\overline{\chi}^{m'm}_{SC}(\mathbf{k}',\mathbf{k};\omega_0)\times\\
&\qquad\times\left[\left(\gamma^{m'\vartheta'}_{k'_\perp}\right)^*\delta_{q'_\perp,k'_\perp+k_\perp}+\left(\gamma^{m'(\vartheta'+\pi)}_{k'_\perp}\right)^*\delta_{q'_\perp,k'_\perp+k_\perp+\frac{\pi}{b}}\right]\left(\gamma^{m\vartheta'}_{k_\perp}\right)^*\times\\
&\qquad\times\left[\gamma^{m'\vartheta}_{k'_\perp}\delta_{q_\perp,k'_\perp+k_\perp}+\gamma^{m'(\vartheta+\pi)}_{k'_\perp}\delta_{q_\perp,k'_\perp+k_\perp+\frac{\pi}{b}}\right]\gamma^{m\vartheta}_{k_\perp}\times\\
&\qquad\times\begin{cases}1 & (\text{symétrie } s)\\ 2\cos lb(k_\perp+\frac{\vartheta'}{b})\cos lb(k_\perp+\frac{\vartheta}{b}) & (l=1:d\,;\,l=2:g),\end{cases}
\end{aligned}\tag{D.6}$$

où

$$\overline{\chi}^{m'm}_{SC}(\mathbf{k}',\mathbf{k};\omega_0):=T\sum_\omega\frac{1}{i\omega-\epsilon^{m'}_{L,\mathbf{k}'}}\frac{1}{i(-\omega+\omega_0)-\epsilon^m_{R,\mathbf{k}}}.$$

Comme discuté au début de la section 5.2, les divers δ laissent deux combinaisons de $q_\perp$, $q'_\perp$ possibles : $q_\perp=q'_\perp$ ou $q_\perp=q'_\perp\pm\frac{\pi}{b}$. Ceci n'est pas le cas pour l'expression correspondante pour un système à une seule bande, que

l'on retrouve si on pose $\gamma^{-o}=1$ et tous les autres $\gamma=0$: $\chi_0(\mathbf{q}',\mathbf{q})\propto\delta_{\mathbf{q}',\mathbf{q}}$ et

$$\chi_0^{(s,\Upsilon)}(\mathbf{q};i\omega_0)\Big|_{1\,bande}= \frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}'+\mathbf{k}}\overline{\chi}^{--}_{SC}(\mathbf{k}',\mathbf{k};\omega_0)\begin{cases}1 & (\Upsilon=s)\ ,\\ 2\cos^2 k_\perp b & (\Upsilon=d)\ .\end{cases} \tag{D.7}$$

Dans l'équation (D.6), les sommes de $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$ sont restreintes à la première zone de Brioullin, en particulier $k'_\perp\in]-\frac{\pi}{2b},\frac{\pi}{2b}]$. D'après la section 5.1, les produits scalairs γ vérifient

$$\gamma^{m\vartheta}_{k_\perp}=m\gamma^{m(\vartheta+\pi)}_{k_\perp+\frac{\pi}{b}}\ .$$

On peut donc remplacer

$$\gamma^{m'(\vartheta+\pi)}_{k'_\perp}\delta_{k'_\perp,q_\perp-k_\perp-\frac{\pi}{b}}=m'\gamma^{m'\vartheta}_{\tilde{k}'_\perp}\delta_{\tilde{k}'_\perp,q_\perp-k_\perp}\ ,$$

où $\tilde{k}'_\perp$ n'appartient plus forcément à la première zone de Brioullin. Remarquons d'ailleurs qu'un tel changement de variable n'affecte pas $\overline{\chi}$,

$$\overline{\chi}^{m'm}_{SC}(...k'_\perp...)=\overline{\chi}^{m'm}_{SC}(...(k'_\perp+\frac{\pi}{b})...)\ .$$

Avec $\mathbf{P}:=(0,\frac{\pi}{b})$, nous obtenons donc

$$\begin{aligned}&\chi_0^{(s,\Upsilon)}(\mathbf{q},\mathbf{q};i\omega_0)=\\ &\frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{m'm}\sum_{\vartheta'\vartheta}\delta_{q'_\parallel,q_\parallel}\delta_{q_\parallel,k'_\parallel+k_\parallel}\overline{\chi}^{m'm}_{SC}(\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{k};\omega_0)\times\\ &\qquad\times\left(\gamma^{m'\vartheta'}_{q_\perp-k_\perp}\right)^*\left(\gamma^{m\vartheta'}_{k_\perp}\right)^*\gamma^{m'\vartheta}_{q_\perp-k_\perp}\gamma^{m\vartheta}_{k_\perp}\times\\ &\qquad\times\begin{cases}1 & (\text{symétrie } s),\\ 2\cos lb(k_\perp+\frac{\vartheta'}{b})\cos lb(k_\perp+\frac{\vartheta}{b}) & (l=1:d;\ l=2:g),\end{cases}\end{aligned} \tag{D.8}$$

$$\begin{aligned}&\chi_0^{(s,\Upsilon)}(\mathbf{q},\mathbf{q}\pm\mathbf{P};i\omega_0)=\\ &\frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{m'm}\sum_{\vartheta'\vartheta}\delta_{q'_\parallel,q_\parallel}\delta_{q_\parallel,k'_\parallel+k_\parallel}\overline{\chi}^{m'm}_{SC}(\mathbf{q}-\mathbf{k},\mathbf{k};\omega_0)\times\\ &\qquad\times m'\left(\gamma^{m'\vartheta'}_{q_\perp-k_\perp}\right)^*\left(\gamma^{m\vartheta'}_{k_\perp}\right)^*\gamma^{m'\vartheta}_{q_\perp\pm\frac{\pi}{b}-k_\perp}\gamma^{m\vartheta}_{k_\perp}\times\\ &\qquad\times\begin{cases}1 & (\text{symétrie } s),\\ 2\cos lb(k_\perp+\frac{\vartheta'}{b})\cos lb(k_\perp+\frac{\vartheta}{b}) & (l=1:d;\ l=2:g).\end{cases}\end{aligned} \tag{D.9}$$

D'une façon plus explicite, on a pour la supraconductivité de type d :

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(s,d)}(\mathbf{q},\mathbf{q};i\omega_0) = \\
&\frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}}\cos^2 k_\perp b\Big[\big(\overline{\chi}_{SC}^{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\overline{\chi}_{SC}^{--}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+o}-\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big)^2 \\
&\quad+\big(\overline{\chi}_{SC}^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\overline{\chi}_{SC}^{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}+\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}\gamma_{k_\perp}^{+o}\big)^2\Big]\Big|_{\mathbf{k}'=-\mathbf{k}+\mathbf{q}},
\end{aligned} \tag{D.10}$$

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(s,d)}(\mathbf{q},\mathbf{q}\pm\mathbf{P};i\omega_0) = \\
&\frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}}\cos^2 k_\perp b\Big[\big(\overline{\chi}_{SC}^{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})-\overline{\chi}_{SC}^{--}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}-\gamma_{k_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big) \\
&\quad+\big(\overline{\chi}_{SC}^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{k})-\overline{\chi}_{SC}^{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}+\gamma_{k_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big)\Big]\Big|_{\mathbf{k}'=-\mathbf{k}+\mathbf{q}}.
\end{aligned} \tag{D.11}$$

Pour $\Upsilon = g$, on a

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(s,g)}(\mathbf{q},\mathbf{q};i\omega_0) = \\
&\frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}}\cos^2 2k_\perp b\Big[\big(\overline{\chi}_{SC}^{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\overline{\chi}_{SC}^{--}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+o}+\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big)^2 \\
&\quad+\big(\overline{\chi}_{SC}^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{k})+\overline{\chi}_{SC}^{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}-\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}\gamma_{k_\perp}^{+o}\big)^2\Big]\Big|_{\mathbf{k}'=-\mathbf{k}+\mathbf{q}},
\end{aligned} \tag{D.12}$$

$$\begin{aligned}
&\chi_0^{(s,g)}(\mathbf{q},\mathbf{q}\pm\mathbf{P};i\omega_0) = \\
&\frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}}\cos^2 2k_\perp b\Big[\big(\overline{\chi}_{SC}^{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})-\overline{\chi}_{SC}^{--}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}+\gamma_{k_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big) \\
&\quad+\big(\overline{\chi}_{SC}^{+-}(\mathbf{k}',\mathbf{k})-\overline{\chi}_{SC}^{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\big)\big(\gamma_{k'_\perp}^{+o}\gamma_{k'_\perp}^{+\pi}-\gamma_{k_\perp}^{+o}\gamma_{k_\perp}^{+\pi}\big)\Big]\Big|_{\mathbf{k}'=-\mathbf{k}+\mathbf{q}}.
\end{aligned} \tag{D.13}$$

On obtient la susceptibilité pour la supraconductivité singulet avec symétrie s si on remplace tous les cos par $\frac{1}{\sqrt{2}}$ dans les résultats pour $\Upsilon = g$.

L'intégration sur $k_\parallel$ peut être faite analytiquement si la largeur de bande en direction parallèle $2\Lambda_0$ est suffisamment grande devant V, $t_\perp$ et T :

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N_\parallel}\sum_{k_\parallel}\overline{\chi}_{SC}^{m'm}(\mathbf{k}',\mathbf{k};0)\big|_{\mathbf{k}'=\mathbf{q}-\mathbf{k}} \\
&\quad=\frac{a}{2\pi v_{F\parallel}}\int_{-\Lambda_0}^{\Lambda_0}d\epsilon_\parallel\overline{\chi}_{SC}^{m'm}(\mathbf{k}',\mathbf{k};0)\big|_{\substack{\epsilon_\parallel=\epsilon_{\mathbf{k}}\\ \mathbf{k}'=\mathbf{q}-\mathbf{k}}} \\
&\quad=\frac{a}{2\pi v_{F\parallel}}\Big\{\ln\frac{\Lambda_0}{2\pi T}-\mathrm{Re}\Psi\big[\frac{1}{2}+i\frac{1}{4\pi T}\big(v_{F\parallel}q_\parallel+\epsilon_\perp^m(k_\perp)-\epsilon_\perp^{m'}(k'_\perp)\big)\big]\Big\},
\end{aligned} \tag{D.14}$$

où Ψ est la fonction digamma.

Annexe E

Valeurs initiales

Dans cet annexe, nous exprimons le terme d'interaction, H_I, et celui qui décrit le couplage à des champs externes, H_{ext}, en fonction des états propres du Hamiltonien libre, H_0, du système avec potentiel anionique.

E.1 Interaction

Si nous nous restreignons à des interactions entre fermions qui se déplacent, en ce qui concerne la direction parallèle aux chaînes, en sens opposés, une interaction purement intrachaîne s'écrit

$$H_I = \frac{U}{N_\parallel^2} \sum_{\sigma_j k_{\parallel j}} f_I(\{(\sigma_j, k_{\parallel j})\}) N_\parallel \delta_{k'_{\parallel 1}+k'_{\parallel 2}-k_{\parallel 2}-k_{\parallel 1},0} H_{I\perp}(\{\sigma_j, k_{\parallel j}\}) \text{ avec}$$
$$H_{I\perp}(\{\sigma_j, k_{\parallel j}\}) = \sum_{l=1}^{N_\perp} R^\dagger_{\sigma'_1 k'_{\parallel 1} l} L^\dagger_{\sigma'_2 k'_{\parallel 2} l} L_{\sigma_2 k_{\parallel 2} l} R_{\sigma_1 k_{\parallel 1} l}. \tag{E.1}$$

La transformation de Fourier dans la direction perpendiculaire aux chaînes donne

$$\begin{aligned} H_{I\perp} = \frac{1}{N_\perp} \sum_{k_{\perp j}} \{ & \delta_{k'_{\perp 1}+k'_{\perp 2}-k_{\perp 2}-k_{\perp 1},0 \bmod \frac{2\pi}{b}} \times \\ & \times \sum_{\substack{\vartheta_j \in \{o,\pi\}, \\ \#\, pair\, de\, \pi}} R^\dagger_{\sigma'_1,\mathbf{k}'_1,\vartheta'_1} L^\dagger_{\sigma'_2,\mathbf{k}'_2,\vartheta'_2} L_{\sigma_2,\mathbf{k}_2,\vartheta_2} R_{\sigma_1,\mathbf{k}_1,\vartheta_1} \\ & + \delta_{k'_{\perp 1}+k'_{\perp 2}-k_{\perp 2}-k_{\perp 1},\frac{\pi}{b} \bmod \frac{2\pi}{b}} \times \\ & \times \sum_{\substack{\vartheta_j \in \{o,\pi\}, \\ \#\, impair\, de\, \pi}} R^\dagger_{\sigma'_1,\mathbf{k}'_1,\vartheta'_1} L^\dagger_{\sigma'_2,\mathbf{k}'_2,\vartheta'_2} L_{\sigma_2,\mathbf{k}_2,\vartheta_2} R_{\sigma_1,\mathbf{k}_1,\vartheta_1} \} \ . \end{aligned}$$

Pour passer à la base propre de H_0, profitons de

$$R_{\sigma \mathbf{k} \vartheta} = \sum_m \gamma_{k_\perp}^{m\vartheta *} R_{\sigma \mathbf{k} m}$$

(pareil pour les opérateurs $L_{\sigma \mathbf{k} \vartheta / m}$) pour obtenir l'équation (5.13) donnée dans la section 5.3.1.

E.2 Couplages aux champs extérieurs dans un système à deux bandes

Calculons les expressions dans la base $\psi_{m,\mathbf{k}}$ (cf. la section 5.1) pour les vertex z, qui décrivent le couplage entre les fermions et des champs extérieurs. Seulement la dérivation pour le cas de la supraconductivité singulet est donnée, les calculs pour les autres instabilités étant tout à fait analogues.

La partie du Hamiltonien en question s'écrit

$$H_{ext}^{(s,\Upsilon)} = \sum_{\sigma' \sigma} \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y}} h_{\mathbf{x}}^{(s,\Upsilon)^*} c_{\mathbf{x}\sigma'} \tau_{\sigma'\sigma}^{(s)} \Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y}) c_{\mathbf{y}\sigma} + h.c.$$

(cf. D). Rappelons que (cf. 5.2), dans la transformée de Fourier du champ h,

$$h_{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}.\mathbf{x}} h_{\mathbf{q}},$$

la composante transversale $q_\perp$ du vecteur de modulation varie de 0 à $\frac{2\pi}{b}$, tandis que les nombres quantiques $k_\perp$ sont limités à la première zone de Brioullin réduite à $]-\frac{\pi}{2b}, \frac{\pi}{2b}]$:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{x}\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vartheta \in \{o,\pi\}} \sum_{k_\perp} e^{i(k_\perp + \frac{\vartheta}{b}) x_\perp} \Big(\sum_{k_\parallel \geq 0} e^{ik_\parallel x_\parallel} R_{\mathbf{k}\vartheta\sigma} + \sum_{k_\parallel < 0} e^{ik_\parallel x_\parallel} L_{\mathbf{k}\vartheta\sigma} \Big) \ , \\ \Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vartheta \in \{o,\pi\}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}.\mathbf{x}} e^{i\frac{\vartheta}{b} x_\perp} \Upsilon(\mathbf{k},\vartheta;\mathbf{y}), \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \Upsilon(\mathbf{k},\vartheta;\mathbf{y}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}} e^{-i\frac{\vartheta}{b} x_\perp} \Upsilon(\mathbf{x},\mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{y}} e^{-i\frac{\vartheta}{b} y_\perp} \times \\ &\quad \times \begin{cases} 1 & \text{(si symétrie } s) \\ \sqrt{2} \cos lb(k_\perp + \frac{\vartheta}{b}) & (l = 1 : d \, ; \, l = 2 : g) \end{cases} \end{aligned}$$

et le nombre de sites $N = N_\parallel N_\perp$. Si nous nous restreignons à des petites valeurs du vecteur total parallèle, $q_\parallel \ll 2k_F^{1D}$, nous obtenons

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow H_{ext}^{(s,\Upsilon)} \supset \quad & \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{q}}^{(s,\Upsilon)*} \sum_{\sigma'\sigma} \tau_{\sigma'\sigma}^{(s)} \frac{1}{N_\parallel^2} \frac{1}{N_\perp^2} \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \sum_{\vartheta} N_\parallel \delta_{q_\parallel, k'_\parallel + k_\parallel} \times \\
& \times \big[N_\perp \delta_{q_\perp, k'_\perp + k_\perp} L_{\mathbf{k}'\vartheta\sigma'} R_{\mathbf{k}\vartheta\sigma} \\
& \quad + N_\perp \delta_{q_\perp, k'_\perp + k_\perp + \frac{\pi}{b}} L_{\mathbf{k}'(\vartheta+\pi)\sigma'} R_{\mathbf{k}\vartheta\sigma} \big] \times \\
& \times \begin{cases} 1 & (s) \\ \sqrt{2}\cos lb(k_\perp + \frac{\vartheta}{b}) & (d\,;\, g) \end{cases} \\
& + h.c. \\
= \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{q}}^{(s,\Upsilon)*} & \sum_{\sigma'\sigma} \tau_{\sigma'\sigma}^{(s)} \sum_{m'm} \frac{1}{N_\parallel^2} \frac{1}{N_\perp^2} \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \sum_{\vartheta} N_\parallel \delta_{q_\parallel, k'_\parallel + k_\parallel} \times \\
& \times \big[N_\perp \delta_{q_\perp, k'_\perp + k_\perp} \gamma_{k'_\perp}^{m'\vartheta *} \gamma_{k_\perp}^{m\vartheta *} \\
& \quad + N_\perp \delta_{q_\perp, k'_\perp + k_\perp + \frac{\pi}{b}} \gamma_{k'_\perp}^{m'(\vartheta+\pi)*} \gamma_{k_\perp}^{m\vartheta *} \big] L_{\mathbf{k}'m'\sigma'} R_{\mathbf{k}m\sigma} \times \\
& \times \begin{cases} 1 & (s) \\ \sqrt{2}\cos lb(k_\perp + \frac{\vartheta}{b}) & (d\,;\, g) \end{cases} \\
& + h.c. \\
\stackrel{!}{=} \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{q}}^{(s,\Upsilon)*} & \sum_{\sigma'\sigma} \tau_{\sigma'\sigma}^{(s)} \sum_{m'm} \frac{1}{N_\parallel^2} \frac{1}{N_\perp^2} \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} N_\parallel \delta_{q_\parallel, k'_\parallel + k_\parallel} \times \\
& \times N_\perp \delta_{q_\perp, k'_\perp + k_\perp \bmod \frac{\pi}{b}} \\
& \times z_{(s,\Upsilon)}((\mathbf{k}', m'), (\mathbf{k}, m); \mathbf{q}) L_{\mathbf{k}'m'\sigma'} R_{\mathbf{k}m\sigma} \\
& + h.c.
\end{aligned}
\tag{E.2}
$$

(cf. les équations (3.25),(3.27),(3.33)).

Annexe F

Fermions sur une échelle

Des fermions sur une échelle constituent un cas spécial relativement simple d'un système à deux bandes. Fabrizio [62] a établi les équations de renormalisation à deux boucles pour ces systèmes, en tenant compte de la renormalisation de la surface de Fermi de plus. Dans cette annexe, nous allons faire le lien entre ses équations et celles que nous avons dérivées dans le chapitre 5.

Il se trouve que les états $c_{o/\pi}$ diagonalisent déjà la partie libre du Hamiltonien, avec la dispersion

$$\epsilon(r,k,\vartheta) = v_F(rk - k_F^{1D}) - t_\perp \cos\vartheta.$$

Les ondes avec $q_\perp = 0$ et $q_\perp = \frac{\pi}{b}$ restent donc découplées, et les susceptibilités diagonales en $\mathbf{q}$. Avec les vecteurs de Fermi des deux bandes,

$$k_{F,\vartheta} = k_F^{1D} + \kappa\cos\vartheta,$$

où κ est défini à partir de l'écart entre les deux bandes,

$$\Delta \equiv 2t_\perp =: 2v_F\kappa,$$

la dispersion s'écrit

$$\epsilon(r,k,\vartheta) = v_F(rk - k_{F,\vartheta}) \ .$$

Les fonctions $A_{\mathcal{C}/\mathcal{P}}$ que nous utilisons dans les équations de renormalisation deviennent

$$\begin{aligned} A_{\mathcal{C}}(\vartheta,\vartheta',r,q_{\mathcal{C}}) &:= v_F\kappa(\cos\vartheta - \cos\vartheta') - rv_Fq_{\mathcal{C}} \\ A_{\mathcal{P}}(\vartheta,\vartheta',\tilde{q}_{\mathcal{P}}) &:= v_F\kappa(\cos\vartheta + \cos\vartheta') - v_F\tilde{q}_{\mathcal{P}}. \end{aligned}$$

(On note que, avec les définitions utilisées ici, $q_{\mathcal{C}}, \tilde{q}_{\mathcal{P}} \neq 0$ même pour des processus où tous les vecteurs d'onde sont des points de Fermi !)

En profitant des symétries par rapport à l'échange des particules entrantes ou sortantes, la parité, l'équation (A.4) et les symétries de la matrice

$A_{\parallel\perp}$ (éq. (A.8)), nous pouvons nous restreindre à l'étude des couplages suivants :

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\alpha,o} &:= \Gamma_\alpha(o,o,o,o) \\
\Gamma_{\alpha,\pi} &:= \Gamma_\alpha(\pi,\pi,\pi,\pi,) \\
\Gamma_{\alpha,t} &:= \Gamma_\alpha(o,o,\pi,\pi,) \\
\Gamma_{\alpha,f} &:= \Gamma_\alpha(o,\pi,\pi,o) \\
\Gamma_{\alpha,b} &:= \Gamma_\alpha(o,\pi,o,\pi) \\
\Gamma_{\alpha,3o} &:= \Gamma_\alpha(o,o,o,\pi) \\
\Gamma_{\alpha,3\pi} &:= \Gamma_\alpha(o,\pi,\pi,\pi),
\end{aligned}$$

où les α désignent toujours la dépendance en spin. Pour $N_\perp = 2$, les restrictions sur $k_\perp$ nous limitent à $k_\perp = 0$, de sorte que les seuls processus avec Umklapp transversal sont les Γ_t ; il n'y a pas de processus Γ_{3o} ou $\Gamma_{3\pi}$. Pour tous les couplages sauf Γ_b, il est possible de poser que tous les vecteurs d'onde sont des points de Fermi sans que la conservation du vecteur d'onde total soit violée. Si nous ajoutons une symétrie par rapport à la transformation

$$\left(o \leftrightarrow \pi, k_{j\parallel} \equiv r\left|k_{j\parallel}\right| \mapsto r(-k_{j\parallel} + 2k_F^{1D})\right)$$

simultanément pour tous les arguments d'un couplage, nous obtenons

$$\Gamma_b(0,0,0,4\kappa) = \Gamma_b(0,0,4\kappa,0) = \Gamma_b(0,-4\kappa,0,0) = \Gamma_b(-4\kappa,0,0,0) =: \Gamma_b,$$

et cette égalité sera conservée par le flot de renormalisation. Par la même symétrie, $\Gamma_o = \Gamma_\pi =: \Gamma_{in}$.

Les expressions pour les valeurs de départ se simplifient aussi :

$$\begin{aligned}
g(\{(\sigma_j, k_{\parallel j})\}) &= U f_I(\{(\sigma_j, k_{\parallel j})\}), \\
z_\alpha(\vartheta', \vartheta; q_\perp = 0) &= \delta_{\vartheta',\vartheta}, \\
z_\alpha(\vartheta', \vartheta; q_\perp = \frac{\pi}{b}) &= \delta_{\vartheta',\vartheta+\pi}.
\end{aligned}$$

Pour la supraconductivité d, il faut ajouter un facteur $\cos\vartheta$.

Les équations de renormalisation découlent de celles que nous avons éta-

blies dans la section 5.3.2. Nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_{\alpha,in} &= \frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,in}\tilde{\Gamma}_{j,in} + \tilde{\Gamma}_{i,t}\tilde{\Gamma}_{j,t}\big) \\
&\quad -\frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,in}\tilde{\Gamma}_{j,in} + I\tilde{\Gamma}_{i,b}\tilde{\Gamma}_{j,b}\big)\ , \\
\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_{\alpha,t} &= \frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,in}\tilde{\Gamma}_{j,t} + \tilde{\Gamma}_{i,t}\tilde{\Gamma}_{j,in}\big) \\
&\quad -\frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,t}\tilde{\Gamma}_{j,f} + \tilde{\Gamma}_{i,f}\tilde{\Gamma}_{j,t}\big)\ , \\
\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_{\alpha,f} &= \frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,f}\tilde{\Gamma}_{j,f} + I\tilde{\Gamma}_{i,b}\tilde{\Gamma}_{j,b}\big) \\
&\quad -\frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,t}\tilde{\Gamma}_{j,t} + \tilde{\Gamma}_{i,f}\tilde{\Gamma}_{j,f}\big)\ , \\
\frac{d}{dl}\tilde{\Gamma}_{\alpha,b} &= \frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{C}}_{\alpha,ij}\big(I\tilde{\Gamma}_{i,b}\tilde{\Gamma}_{j,f} + \tilde{\Gamma}_{i,f}\tilde{\Gamma}_{j,b}\big) \\
&\quad -\frac{1}{4}\sum_{ij} C^{\mathcal{P}}_{\alpha,ij}\big(\tilde{\Gamma}_{i,in}\tilde{\Gamma}_{j,b} + I\tilde{\Gamma}_{i,b}\tilde{\Gamma}_{j,in}\big)\ ,
\end{aligned}$$

ù

$$I := \frac{2\Lambda}{2\Lambda + 2\Delta}.$$

Ces équations sont les mêmes que celles trouvées par Fabrizio, si on se restreint à la renormalisation à une boucle, sauf que Fabrizio utilise un schéma de renormalisation dans lequel un des propagateurs internes d'un diagramme de renormalisation est sur la coupure $\nu\Lambda$, et le second correspond à une énergie de valeur absolue égale ou *inférieure* à Λ. Ceci fait que les coefficients I sont remplacés par

$$I_F = \frac{2\Lambda}{2\Lambda - 2\Delta}$$

dans la référence [62][1]. De plus, ces termes sont coupés à $\Lambda = 2\Delta$ dans [62]. Le schéma de renormalisation "ordre de Wick" donnerait les mêmes équations que celles obtenues par Fabrizio. Vu les résultats de la section 3.4, il serait intéressant d'étendre notre étude à deux boucles et d'inclure la renormalisation des points de Fermi, pour comparer des résultats d'après notre schéma à ceux de la référence [62].

En ce qui concerne les fonctions de réponse, nous définissons

[1]Dans l'équation qui est donnée pour $\frac{d}{dl}\Gamma_b$ dans l'annexe de [62], on trouve 2 au lieu de $(1+I)$. Par contre, dans le développement limité (21) de la même équation, c'est bien le développement de I qui apparaît.

– pour les ondes de densité :

$$\begin{aligned} z_j(q_\perp = 0) &:= z_j((-k_{F,\vartheta},\vartheta),(k_{F,\vartheta},\vartheta);(2k_{F,\vartheta},0)) \ , \\ z_j(q_\perp = \frac{\pi}{b}) &:= z_j((-k_{F,o},o),(k_{F,\pi},\pi);(2k_F^{1D},\frac{\pi}{b})) \\ &\big(\equiv z_j((-k_{F,\pi},\pi),(k_{F,o},o);(2k_F^{1D},\frac{\pi}{b}))\big) \ , \end{aligned}$$

– pour la supraconductivité singulet :

$$\begin{aligned} z_j(q_\perp = 0) &:= z_j((-k_{F,o},o),(k_{F,o},o);0) \\ &\big(\equiv \pm z_j((-k_{F,\pi},\pi),(k_{F,\pi},\pi);0)\big) \ , \\ z_j(q_\perp = \frac{\pi}{b}) &:= z_j((-k_{F,\pi},\pi),(k_{F,o},o);(2\kappa,\frac{\pi}{b})) \\ &\big(\equiv \pm z_j((-k_{F,o},o),(k_{F,\pi},\pi);(-2\kappa,\frac{\pi}{b}))\big) \ , \end{aligned}$$

où le signe "+" dans les parenthèses correspond aux paires avec symétrie s et le signe "−" à la symétrie d.

Comme nous négligeons la dépendance des Γ_j en la distance des vecteurs d'onde aux points de Fermi, les z_j de $q_\parallel$ différents sont renormalisés de façon identique, de sorte que, dans cette approximation, il n'y a pas plus de z_j différents que ceux énumérés dans la liste précédente. Les équations de renormalisation correspondantes sont :

– avec $j = C, S$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} z_j(0) &= \frac{1}{4} z_j(0)\big(\tilde{\Gamma}_{j,in} + I\tilde{\Gamma}_{j,b}\big) \ , \\ \frac{d}{dl} z_j(\frac{\pi}{b}) &= \frac{1}{4} z_j(\frac{\pi}{b})(\tilde{\Gamma}_{j,t} + \tilde{\Gamma}_{j,f}) \ , \end{aligned}$$

– avec $j = (s, \Upsilon)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl} z_j(0) &= \frac{1}{4} z_j(0)(\tilde{\Gamma}_{j,in} \pm \tilde{\Gamma}_{j,t}) \ , \\ \frac{d}{dl} z_j(\frac{\pi}{b}) &= \frac{1}{4} z_j(\frac{\pi}{b})\big(\tilde{\Gamma}_{j,f} \pm I\tilde{\Gamma}_{j,b}\big) \end{aligned}$$

("+" si $\Upsilon = s$, "−" si $\Upsilon = d$).

Pour les susceptibilités, on a dans le cas des ondes de densité

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl}\left(\frac{a}{\pi v_F}\chi_{ODj}(q_\perp = 0)\right) &= -(1+I)[z_j(0)]^2 \ , \\ \frac{d}{dl}\left(\frac{a}{\pi v_F}\chi_{ODj}(q_\perp = \frac{\pi}{b})\right) &= -2[z_j(\frac{\pi}{b})]^2 \ , \end{aligned}$$

et dans celui de la supraconductivité singulet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dl}\left(\frac{a}{\pi v_F}\chi_{SCs,\Upsilon}(q_\perp = 0)\right) &= -2[z_{s,\Upsilon}(0)]^2 \, , \\ \frac{d}{dl}\left(\frac{a}{\pi v_F}\chi_{SCs,\Upsilon}(q_\perp = \frac{\pi}{b})\right) &= -(1+I)[z_{s,\Upsilon}(\frac{\pi}{b})]^2 \ . \end{aligned}$$

(donc identiques pour la supraconductivité de type s et celle de type d).

Bibliographie

[1] A. A. Abrikosov. *Sov. Phys. JETP*, 37 :503, 1983.

[2] P. W. Anderson. *J. Phys. Chem. Solids*, 11 :26, 1959.

[3] P. W. Anderson et G. Yuval. *Phys. Rev. Lett.*, 23 :89, 1970.

[4] L. J. Azevedo, J. E. Schirber, et E. M. Engler. *Phys. Rev. B*, 27 :5842, 1983.

[5] T. Baier, E. Bick, et C. Wetterich. cond-mat/0308591.

[6] L. Balicas, K. Behnia, W. Kang, E. Canadell, P. Auban-Senzier, D. Jérome, M. Ribault, et J. M. Fabre. *J. Phys. I (France)*, 4 :1539, 1994.

[7] S. Barišić. *J. Phys. (Paris)*, 44 :185, 1983.

[8] S. Barišić. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–991, 1983.

[9] S. Barišić. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 119 :413, 1985.

[10] S. Barišić et S. Brazovskii. *Recent Developments in Condensed Matter Physics*, volume 1, page 327. Plenum, New York, 1981.

[11] M.T. Béal-Monod, C. Bourbonnais, et V. J. Emery. *Phys. Rev. B*, 34 :7716, 1986.

[12] K. Bechgaard, K. Carneiro, O. Eg, M. Olsen, F. B. Rasmussen, C. Jacobsen, and G. Rindorf. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 79 :271, 1982.

[13] T. Becker, M. Gabay, et T. Giamarchi. *Phys. Rev. B*, 62 :12489, 2000.

[14] J. G. Bednorz et K. A. Müller. *Z. Phys. B*, 64 :189, 1986.

[15] S. Belin et K. Behnia. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :2125, 1997.

[16] G. Benfatto et G. Gallavotti. *Phys. Rev. B*, 42 :9967, 1990.

[17] S. Biermann, A. Georges, T. Giamarchi, et A. Lichtenstein. *Strongly Correlated Fermions and Bosons in Low Dimensional Disordered Systems*, page 81. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002. cond-mat/0201542.

[18] S. Biermann, A. Georges, A. Lichtenstein, et T. Giamarchi. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :276405, 2001.

[19] B. Binz. *Weak Coupling Instabilities of Two-Dimensional Lattice Electrons*. Thèse, Univ. de Fribourg et Univ. Paris 7, 2002.

[20] B. Binz, D. Baeriswyl, et B. Douçot. *Eur. Phys. J. B*, 25 :69, 2002.

[21] B. Binz, D. Baeriswyl, et B. Douçot. *Ann. Phys.*, 12 :704, 2003.

[22] D. Boies, C. Bourbonnais, et A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.*, 74 :968, 1995.

[23] M. Bonini, M. D'Attanasio, et G. Marchesini. Università di Parma preprint UPRF 92-360.

[24] S. Botrić et S. Barišić. *J. Phys. (Paris)*, 45 :185, 1984.

[25] S. Bouffard, M. Ribault, R. Brusetti, D. Jérome, et K. Bechgaard. *J. Phys. C*, 15 :2951, 1982.

[26] C. Bourbonnais. A renormalization group approach to electronic and lattice correlations in organic conductors. *In "Strongly interacting fermions and high-T_c superconductivity"*, Les Houches, Session LVI (1991), édité par B. Douçot et J. Zinn-Justin. Elsevier Science, 1995.

[27] C. Bourbonnais et L. G. Caron. *Phys. Rev. B*, 29 :5007, 1984.

[28] C. Bourbonnais et L. G. Caron. *Physica*, 143B :450, 1986.

[29] C. Bourbonnais et L. G. Caron. *Europhys. Lett.*, 5 :209, 1988.

[30] C. Bourbonnais et L. G. Caron. *Int. J. Mod. Phys. B*, 5(2) :1033, 1991.

[31] C. Bourbonnais et R. Duprat. *J. de Phys. IV*, 114 :3, 2004.

[32] C. Bourbonnais et D. Jérome. *In "Advances in Synthetic Metals"*, édité par P. Bernier, S. Lefrant, et G. Bidan. Elsevier Science, 1999.

[33] S. Brazovskii et V. Yakovenko. *J. de Phys. (Paris) Lett.*, 46 :L111, 1985.

[34] R. Brusetti, P. Garoche, et K. Bechgaard. *J. Phys. C*, 16 :3535, 1983.

[35] N. Bulut et D. J. Scalapino. *Phys. Rev. B*, 45 :2371, 1992.

[36] N. Bulut et D. J. Scalapino. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :706, 1992.

[37] T. Busche, L. Bartosch, et P. Kopietz. *J. Phys. : Condens. Matter*, 14 :8513, 2002.

[38] Yu. A. Bychkov, L. P. Gor'kov, et I. E. Dzyaloshinskii. *Sov. Phys. JETP*, 23 :489, 1966.

[39] B. S. Chandrasekhar. *Appl. Phys. Lett.*, 1 :7, 1962.

[40] G. Y. Chitov et D. Sénéchal. *Phys. Rev. B*, 52 :13487, 1995.

[41] G. Y. Chitov et D. Sénéchal. *Phys. Rev. B*, 57 :1444, 1998.

[42] M.-Y. Choi, P. M. Chaikin, S. Z. Huang, P. Haen, E. M. Engler, et R. L. Greene. *Phys. Rev. B*, 25 :6208, 1982.

[43] A. M. Clogston. *Phys. Rev. Lett.*, 9 :266, 1962.

[44] C. Coulon, P. Delhaes, J. Amiell, J. P. Manceau, J. M. Fabre, et L. Giral. *J. Phys. (Paris)*, 43 :1721, 1982.

[45] G. M. Danner, W. Kang, et P. M. Chaikin. *Phys. Rev. Lett.*, 72 :3714, 1994.

[46] B. Dardel, D. Malterre, M. Grioni, P. Weibel, Y. Baer, J. Voit, et D. Jérome. *Europhys. Lett.*, 24 :687, 1993.

[47] L. Ducasse, M. Abderrabba, J. Hoarau, M. Pesquer, B. Gallois, et J. Gaultier. *J. Phys. C*, 19 :3805, 1986.

[48] R. Duprat. *Antiferromagnétisme et Supraconductivité dans les Conducteurs quasi-unidimensionnels.* Thèse, Univ. de Sherbrooke, 2003.

[49] R. Duprat et C. Bourbonnais. Communication privée.

[50] R. Duprat et C. Bourbonnais. *Eur. Phys. J. B*, 21 :219, 2001.

[51] N. Dupuis. *Eur. Phys. J. B*, 3 :315, 1998.

[52] N. Dupuis et G. Y. Chitov. *Phys. Rev. B*, 54 :3040, 1996.

[53] N. Dupuis, G. Montambaux, et C. A. R. Sa de Melo. *Phys. Rev. Lett.*, 70 :2613, 1993.

[54] S. Dusuel et B. Douçot. *Phys. Rev. B*, 67 :205111, 2003.

[55] S. Dusuel et D. Zanchi. cond-mat/0401242.

[56] I. E. Dzyaloshinskii. *Sov. Phys. JETP*, 66 :848, 1987.

[57] I. E. Dzyaloshinskii et A. I. Larkin. *Sov. Phys. JETP*, 34 :422, 1972.

[58] V. J. Emery. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–977, 1983.

[59] V. J. Emery. *Synthetic Metals*, 13 :21, 1986.

[60] V. J. Emery, R. Bruinsma, et S. Barišić. *Phys. Rev. Lett.*, 48 :1039, 1982.

[61] F. H. L. Essler et A. L. Tsvelik. *Phys. Rev. B*, 65 :115117, 2001.

[62] M. Fabrizio. *Phys. Rev. B*, 48(21) :15838, 1993.

[63] J. Feldman, H. Knörrer, D. Lehmann, et E. Trubowitz. *In "Constructive Physics"*, édit'e par V. Rivasseau. Springer Lecture Notes in Physics. Springer, 1995.

[64] J. Feldman, J. Magnen, V. Rivasseau, et E. Trubowitz. *Helv. Phys. Acta*, 65 :679, 1992.

[65] J. Feldman, J. Magnen, V. Rivasseau, et E. Trubowitz. *Helv. Phys. Acta*, 66 :498, 1993.

[66] J. Feldman, J. Magnen, V. Rivasseau, et E. Trubowitz. *In "The State of Matter"*, édité par M. Aizenmann et H. Araki. Advanced Series in Mathematical Physics. World Scientific, 1994.

[67] J. Feldman, M. Salmhofer, et E. Trubowitz. *J. Stat. Phys.*, 84 :1209, 1996.

[68] J. Feldman, M. Salmhofer, et E. Trubowitz. *Commun. Pure. Appl. Math.*, 51 :1133, 1998.

[69] J. Feldman et E. Trubowitz. *Helv. Phys. Acta*, 63 :157, 1990.

[70] J. Feldman et E. Trubowitz. *Helv. Phys. Acta*, 64 :213, 1991.

[71] P. Fertey, M. Poirier, et P. Batail. *Eur. Phys. J. B*, 10 :305, 1999.

[72] P. Fulde et R. A. Ferrell. *Phys. Rev.*, 135 :A550, 1964.

[73] P. Garoche, R. Brusetti, et K. Bechgaard. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :1346, 1982.

[74] M. Gell-Mann et F. E. Low. *Phys. Rev.*, 95 :1300, 1993.

[75] T. Giamarchi. *Physica B*, 230 :975, 1997.

[76] T. Giamarchi. *Quantum Physics in One Dimension*. Oxford Science Publications, 2004.

[77] T. Giamarchi, S. Biermann, A. Georges, et A. Lichtenstein. cond-mat/0401268.

[78] T. Giamarchi et H. J. Schulz. *J. Phys. France*, 49 :819, 1988.

[79] L. P. Gor'kov et D. Jérome. *J. de Phys. (Paris) Lett.*, 46 :L–646, 1985.

[80] P. M. Grant. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–847, 1983.

[81] 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.

[82] S. Haddad, S. Charfi-Kaddour, M. Héritier, et R. Bennaceur. *J. de Phys. IV*, 10 :Pr3–225, 2000.

[83] S. Haddad, S. Charfi-Kaddour, C. Nickel, M. Héritier, et R. Bennaceur. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :087001, 2002.

[84] C. Halboth et W. Metzner. *Phys. Rev. B*, 61 :7364, 2000.

[85] C. Halboth et W. Metzner. *Phys. Rev. Lett.*, 85 :5162, 2000.

[86] C. J. Halboth. *Niederenergie-Eigenschaften zweidimensionaler Fermi-Systeme*. Thèse, RWTH Aachen, 1999.

[87] Y. Hasegawa et H. Fukuyama. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 55 :3978, 1986.

[88] Y. Hasegawa et H. Fukuyama. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 56 :877, 1987.

[89] Y. Hasegawa, K. Kishigi, et M. Miyazaki. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 67 :964, 1998.

[90] L. C. Hebel et C. P. Slichter. *Phys. Rev.*, 113 :1504, 1959.

[91] W. Henderson, V. Vescoli, P. Tran, L. Degiorgi, et G. Grüner. *Eur. Phys. J. B*, 11 :365, 1999.

[92] A. C. Hewson. *Adv. Phys.*, 43 :543, 1994.

[93] C. Honerkamp. *Superconductivity and Magnetism in the extended Hubbard model*. Thèse, ETH Zürich, 2000.

[94] C. Honerkamp. *Eur. Phys. J. B*, 21 :81, 2001.

[95] C. Honerkamp, D. Rohe, S. Andergassen, et T. Enss. cond-mat/0403633.

[96] C. Honerkamp et M. Salmhofer. *Phys. Rev. B*, 64 :184516, 2001.

[97] C. Honerkamp et M. Salmhofer. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :187004, 2001.

[98] C. Honerkamp et M. Salmhofer. *Phys. Rev. B*, 67 :174504, 2003.

[99] C. Honerkamp, M. Salmhofer, N. Furukawa, et T. M. Rice. *Phys. Rev. B*, 63 :35109, 2001.

[100] C. Honerkamp, M. Salmhofer, et T. M. Rice. *Eur. Phys. J. B*, 27 :127, 2002.

[101] L. Hubert. *Application du groupe de renormalisation aux conducteurs quasi-unidimensionnels soumis à un champ magnétique*. Thèse, Univ. de Sherbrooke, 1996.

[102] D. Jaccard, H. Wilhelm, D. Jérome, J. Moser, C. Carcel, et J. M. Fabre. *J. Phys. : Condens. Matter*, 13 :L89, 2001.

[103] D. Jérome. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–775, 1983.

[104] D. Jérome, A. Mazaud, M. Ribault, et K. Bechgaard. *J. de Phys. (Paris) Lett.*, 41 :L–95, 1980.

[105] I. Johannsen, K. Bechgaard, C. S. Jacobsen, G. Rindorf, N. Thorup, K. Mortensen, et D. Mailly. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 119 :277, 1985.

[106] N. Joo, P. Auban-Senzier, C. Pasquier, D. Jérome, et K. Bechgaard. cond-mat/0401420.

[107] L. P. Kadanoff. *Physics*, 2 :263, 1966.

[108] S. Kagoshima, Y. Saso, M. Maesato, R. Kondo, et T. Hasegawa. *Sol. State Comm.*, 110 :479, 1999.

[109] A. A. Katanin et A. P. Kampf. cond-mat/0310112.

[110] G. Keller, C. Kopper, et M. Salmhofer. *Helv. Phys. Acta*, 65 :32, 1992.

[111] J.-I. Kishine et K. Yonemitsu. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 67 :1714, 1998.

[112] P. Kopietz et T. Busche. *Phys. Rev. B*, 64 :155101, 2001.

[113] H. R. Krishna-Murthy, J. W. Wilkins, et K. G. Wilson. *Phys. Rev. B*, 21 :1003, 1980.

[114] K. Kuroki, Y. Tanaka, T. Kimura, et R. Arita. cond-mat/0307553.

[115] A. I. Larkin. *JETP Lett.*, 2 :130, 1965.

[116] A. I. Larkin et Yu. N. Ovchinnikov. *Sov. Phys. JETP*, 20 :762, 1965.

[117] A. G. Lebed. *JETP Lett.*, 44 :114, 1986.

[118] P. Lederer, G. Montambaux, et D. Poilblanc. *J. Phys. (Paris)*, 48 :1209, 1987.

[119] S. Ledowski et P. Kopietz. *J. Phys. : Condens. Matter*, 15 :4779, 2003.

[120] I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, W. Kang, et P. M. Chaikin. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :017004, 2002.

[121] I. J. Lee, P. M. Chaikin, et M. J. Naughton. *Phys. Rev. B*, 62 :R14669, 2000.

[122] I. J. Lee, P. M. Chaikin, et M. J. Naughton. *Phys. Rev. Lett.*, 88 :207002, 2002.

[123] I. J. Lee, D. S. Chow, W. G. Clark, J. Strouse, M. J. Naughton, P. M. Chaikin, et S. E. Brown. cond-mat/0001332.

[124] I. J. Lee, M. J. Naughton, G. M. Danner, et P. M. Chaikin. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :3555, 1997.

[125] W. Metzner, C. Castellani, et C. Di Castro. *Adv. Phys.*, 47 :317, 1998.

[126] W. Metzner, D. Rohe, et S. Andergassen. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :066402, 2003.

[127] G. Mihály, I. Készmárki, F. Zámborsky, et L. Forró. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :2670, 2000.

[128] F. Mila. *Phys. Rev. B*, 52 :4788, 1995.

[129] M. Miljak, J. R. Cooper, et K. Bechgaard. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–893, 1983.

[130] V. P. Mineev et K. V. Samokhin. *Introduction to Unconventional Superconductivity*. Gordon and Breach Science Publishers, 1999.

[131] H. Monien et D. Pines. *Phys. Rev. B*, 41 :6297, 1990.

[132] G. Montambaux. *Contribution à l'étude des conducteurs quasi-unidimensionnels sous champ magnétique*. Thèse, Université Paris-Sud, Orsay, 1985.

[133] G. Montambaux. *Phys. Rev. B*, 38 :4788, 1988.

[134] T. R. Morris. *Int. J. Mod. Phys.*, 9 :2411, 1994.

[135] K. Mortensen et E. M. Engler. *Phys. Rev. B*, 29 :842, 1984.

[136] K. Mortensen, Y. Tomkiewicz, T. D. Schultz, E. M. Engler, V. V. Patel, and A. R. Taranko. *Sol. State Comm.*, 40 :915, 1981.

[137] J. Moser. *Non liquide de Fermi dans les conducteurs organiques quasi-unidimensionnels*. Thèse, Université Paris-Sud, Orsay, 1999.

[138] J. Moser, J. R. Cooper, D. Jérome, B. Alavi, S. E. Brown, et K. Bechgaard. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :2674, 2000.

[139] J. Moser, M. Gabay, P. Auban-Senzier, D. Jérome, K. Bechgaard, et J. M. Fabre. *Eur. Phys. J. B*, 1 :39, 1998.

[140] J. W. Negele et H. Orland. *Quantum Many-Particle Systems*. Perseus Books Publishing, 1998.

[141] A. Neumayr et W. Metzner. *Phys. Rev. B*, 67 :035112, 2003.

[142] J. C. Nickel, G. Abramovici, et M. Héritier. travail en cours.

[143] P. Nozières. *J. Low Temp. Phys*, 17 :31, 1974.

[144] J. I. Oh et M. J. Naughton. cond-mat/0401611.

[145] S. Onari, R. Arita, K. Kuroki, et H. Aoki. cond-mat/0312314.

[146] S. S. P. Parkin, C. Coulon, et D. Jérome. *J. Phys. (Paris)*, 44 :603, 1983.

[147] K. Penc et F. Mila. *Phys. Rev. B*, 50 :11429, 1994.

[148] M. E. Peskin et D. V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Perseus Books Publishing, 1995.

[149] D. Le Pévelen, J. Gaultier, Y. Barrans, D. Chasseau, F. Castet, and L. Ducasse. *Eur. Phys. J. B*, 19 :363, 2001.

[150] J. Polchinski. *Nucl. Phys. B*, 231 :269, 1984.

[151] J. Polchinski. *In "Proceedings of the 1992 Theoretical Advanced Studies Institute in Elementary Particle Physics"*, édité par J. Harvey et J. Polchinski. World Scientific, Singapoore, 1993.

[152] J. P. Pouget. *J. de Phys. IV*, 10 :Pr3–43, 2000.

[153] J. P. Pouget et S. Ravy. *J. de Phys. I*, 6 :1501, 1996.

[154] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, et B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 2 edition, 1992.

[155] D. Radić, A. Bjeliš, et D. Zanchi. *J. de Phys. IV*, 12 :89, 2002.

[156] D. Radić, A. Bjeliš, et D. Zanchi. *Synth. Met.*, 137 :1285, 2003.

[157] D. Radić, A. Bjeliš, et D. Zanchi. *Phys. Rev. B*, 69 :014411, 2004.

[158] J. Rau. *Phys. Rev. E*, 55 :5147, 1997.

[159] S. Ravy. *Contribution à l'étude des systèmes de basse dimension par diffusion des rayons X*.
http ://www.lps.u-psud.fr/Utilisateurs/ravy/habil.htm, 2001. Thèse HDR.

[160] D. Rohe et W. Metzner. cond-mat/0406164.

[161] M. Salmhofer. *Nucl. Phys. (Poc. Suppl.) B*, 30 :81, 1993.

[162] M. Salmhofer. *Phys. Lett. B*, 408 :245, 1997.

[163] M. Salmhofer. *Commun. Math. Phys.*, 194 :249, 1998.

[164] M. Salmhofer. *Renormalization*. Springer, 1998.

[165] M. Sanquer et S. Bouffard. *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 119 :147, 1985.

[166] D. J. Scalapino. cond-mat/9908287.

[167] D. J. Scalapino. *Phys. Rep.*, 250 :329, 1995.

[168] H. J. Schulz. *J. Phys. C*, 16 :6769, 1987.

[169] H. J. Schulz. Coupled luttinger liquids. *In "Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems"*, édité par T. Martin, G. Montambaux, et J. Tran Thanh Van. Editions frontières, France, 1996.

[170] H. J. Schulz, G. Cuniberti, et P. Pieri. cond-mat/9807366.

[171] A. Schwartz, M. Dressel, G. Grüner, V. Vescoli, L. Degiorgi, and T. Giamarchi. *Phys. Rev. B*, 58 :1261, 1998.

[172] C. Seidel et V. N. Prigodin. *J. de Phys. (Paris) Lett.*, 44 :L–403, 1983.

[173] K. Sengupta et N. Dupuis. *Phys. Rev. B*, 65 :035108, 2002.

[174] L. Shampine, R. Allen, et S. Pruess. *Fundamentals of Numerical Computation*. John Wiley & Sons, 1997.

[175] R. Shankar. *Physica A*, 177 :530, 1991.

[176] R. Shankar. *Rev. Mod. Phys.*, 66(1) :129, 1994.

[177] H. Shimahara. *Phys. Rev. B*, 61 :R14936, 2000.

[178] H. Shimahara. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 69(7) :1966, 2000.

[179] J. Sólyom. *Adv. Phys.*, 28 :201, 1979.

[180] E. C. G. Stückelberg et A. Petermann. *Helv. Phys. Acta*, 26 :499, 1953.

[181] M. Takigawa et G. Saito. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 55 :1233, 1986.

[182] M. Takigawa, H. Yasuoka, et G. Saito. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 56 :873, 1987.

[183] N. Tetradis et C. Wetterich. *Nucl. Phys. B*, 422 :541, 1994.

[184] S. Tewari et J. Ruvalds. *Phys. Rev. B*, 53 :5696, 1996.

[185] D. Thelen, D. Pines, et J. P. Lu. *Phys. Rev. B*, 47 :9151, 1993.

[186] S. Tomić, D. Jérome, D. Mailly, M. Ribault, et K. Bechgaard. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–1075, 1983.

[187] S. Tomić, D. Jérome, P. Monod, et K. Bechgaard. *J. de Phys. Coll.*, 44 :C3–1083, 1983.

[188] V. Vescoli, L. Degiorgi, W. Henderson, G. Grüner, K. P. Starkey, et L. K. Montgomery. *Science*, 281 :1181, 1998.

[189] T. Vuletić, P. Auban-Senzier, C. Pasquier, S. Tomić, D. Jérome, M. Héritier, et K. Bechgaard. *Eur. Phys. J. B*, 25 :319, 2002.

[190] X. G. Wen. *Phys. Rev. B*, 42 :6623, 1990.

[191] C. Wetterich. *Phys. Lett. B*, 301 :90, 1993.

[192] C. Wieczerkowski. *Commun. Math. Phys.*, 120 :149, 1988.

[193] K. G. Wilson. *Rev. Mod. Phys.*, 47(4) :773, 1975.

[194] K. G. Wilson. *Scientific American*, 241(2) :140, 1979.

[195] K. G. Wilson et J. Kogut. *Phys. Rep.*, 12(2) :75, 1974.

[196] P. Wzietek, F. Creuzet, C. Bourbonnais, D. Jérome, K. Bechgaard, and P. Batail. *J. de Phys. I*, 3 :171, 1993.

[197] V. M. Yakovenko. *JETP Lett.*, 56 :510, 1992.

[198] K. Yamaji. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 51(9) :2787, 1982.

[199] H. Yoshino, A. Oda, T. Sasaki, T. Hanajiri, J. Yamada, S. Nakatsuji, H. Anzai, et K. Murata. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 68(10) :3142, 1999.

[200] D. Zanchi. *Fermions en faible interaction sur un réseau bidimensionnel.* Thèse, Univ. de Paris-Sud, 1996.

[201] D. Zanchi. *Europhys. Lett.*, 55 :376, 2001.

[202] D. Zanchi et A. Bjeliš. *Europhys. Lett.*, 56 :596, 2001.

[203] D. Zanchi et H. J. Schulz. cond-mat/9812303.

[204] D. Zanchi et H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, 61(20) :13609, 2000.

[205] F. Zwick, S. Brown, G. Margaritondo, C. Merlic, M. Onellion, J. Voit, et M. Grioni. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :3982, 1997.

Antiferromagnetism and Superconductivity in quasi-one-dimensional conductors, a renormalization group study

We study antiferromagnetism and superconductivity in quasi-one-dimensional Fermi systems. We start from a two-dimensional anisotropic Hubbard model. The phase diagram is established using the functional renormalization group. We obtain a crossover from a one-dimensional regime at high temperature to a two-dimensional regime at low temperature. Within the latter, spin and charge fluctuations can stabilize the following phases, depending on the nesting of the Fermi surface and the effective range of electron-electron interactions : Antiferromagnetism, singlet d-wave superconductivity, triplet f-wave superconductivity, or a charge density wave. These results are compared to experiments on the organic conductors $(TMTSF)_2X$ (the Bechgaard salts). Recent experiments on these materials could indicate the existence of triplet superconductivity next to the antiferromagnetic phase.

We also study the effect of an additional potential with double periodicity in a direction perpendicular to that of maximum conductivity. Such a potential is present in $(TMTSF)_2ClO_4$. In this case, there are two bands at the Fermi level. Several Fourier components of the spin fluctuations compete, and some of them are coupled. The same applies to the superconducting fluctuations. The resulting phase diagram is very rich. It contains two antiferromagnetic and two superconducting phases, one being predominantly d-wave and the other predominantly g-wave.

Résumé

Nous étudions l'antiferromagnétisme et la supraconductivité dans les systèmes fermioniques quasi-unidimensionnels à partir du modèle de Hubbard bidimensionnel anisotrope. Le diagramme de phases est obtenu en utilisant une approche de groupe de renormalisation fonctionnelle. Nous mettons en évidence l'existence d'un passage entre un régime unidimensionnel à haute température et un régime bidimensionnel à basse température. Dans ce dernier, selon les propriétés d'emboîtement de la surface de Fermi et la portée effective de l'interaction entre électrons, les fluctuations de spin et de charge peuvent induire une phase antiferromagnétique, une phase supraconductrice singulet de symétrie d, une phase supraconductrice triplet f ou une onde de densité de charge. Ces résultats sont comparés aux résultats expérimentaux obtenus dans les conducteurs organiques $(TMTSF)_2X$ de la famille des sels de Bechgaard, qui pourraient indiquer l'existence d'une phase supraconductrice triplet au voisinage de la phase antiferromagnétique.

Nous étudions également l'effet d'un potentiel supplémentaire de période double dans la direction perpendiculaire à celle de forte conductivité, situation réalisée dans le composé $(TMTSF)_2ClO_4$. Il y a dans ce cas deux bandes électroniques au niveau de Fermi. Plusieurs composantes de Fourier des fluctuations de spin sont alors en compétition, et parfois couplées. C'est également vrai pour les fluctuations supraconductrices. Il en résulte un diagramme de phases très riche, comprenant deux phases antiferromagnétiques et deux phases supraconductrices, l'une de symétrie dominante d, l'autre g.

Mots clés : fermions corrélés, conducteurs organiques quasi-unidimensionnels, onde de densité de spin, supraconductivité triplet, mécanismes d'appariement non conventionnels, groupe de renormalisation fonctionnel.