Fluctuations supraconductrices dans les supraconducteurs organiques quasi-bidimensionnels

Jean-Sébastien Landry

22 août 2001

Table des matières

1 Introduction

Étant donnée la présence d'atomes de carbone qui peuvent former jusqu'à quatre liens chimiques, les substances organiques sont souvent composées de molécules comportant des dizaines d'atomes. Ces dernières sont généralement linéaires ou planes, de sorte que le cristal organique résulte de l'arrangement ordonné d'unités de grande taille interagissant habituellement peu entre elles. Dans le cas des plastiques, on obtient ainsi une substance isolante très malléable. Cependant, tous les composés organiques ne sont pas des isolants: dans les conditions appropriées, certains sont de bons conducteurs ou même des supraconducteurs. Les températures critiques maximales atteintes par les supraconducteurs organiques sont nettement inférieures à celles des cuprates, mais leur étude n'en est pas pour autant sans intérêt. En effet, la structure même des composés organiques ainsi que la présence d'orbitales moléculaires délocalisées de type π font en sorte que les propriétés électroniques de telles substances sont fortement anisotropes. Ainsi, le $(TMTSF)_2X$, où X est une molécule acceptant un électron et TMTSF est le tétraméthyltétrasélénafulvalène, est une famille où la conduction est nettement plus importante dans une direction que dans les deux autres, d'où le qualificatif de quasi-unidimensionnel. Comme exemple de quasi-bidimensionnel, mentionnons le BEDT-TTF (biséthylènedithiotétrathiafulvalène), aussi connu sous le nom de sels ET. La dimensionnalité réduite de ces systèmes en fait des candidats de choix pour l'étude des interactions entre les électrons, car, tout comme les cuprates, les supraconducteurs organiques sont des systèmes d'*électrons fortement corrélés*. Mentionnons finalement la richesse du diagramme de phase des composés organiques. Une même substance peut effectivement présenter des phases antiferromagnétique, supraconductrice, isolant de Mott et isolant paramagnétique, tout dépendant des conditions de pression et de température.

L'objectif de ce travail est de développer un formalisme permettant d'étudier l'influence des fluctuations supraconductrices sur la vitesse du son et sur l'atténuation sonore dans les supraconducteurs organiques quasi-2D. L'approche adoptée consistera à écrire la fonction de partition sous la forme d'une intégrale fonctionnelle mettant en évidence les corrections apportées au propagateur de phonons libre. Dans un premier temps, on négligera les fluctuations supraconductrices et on ne s'intéressera qu'à l'effet du couplage électron-phonon sur le propagateur de phonons. Cela sera fait dans les cinq prochaines sections. Ensuite, nous ajouterons les fluctuations supraconductrices dans notre approche. Les calculs diagrammatiques (basés sur les diagrammes de Feynman) ne seront pas menés à terme pour les expressions générales obtenues. Tout au plus effectuerons-nous de tels calculs dans des cas limites bien précis (sous-section (6.3, 8.3 et 8.5). De plus, nous n'avons pas tenu compte du couplage interplan, qui est pourtant un élément essentiel de l'analyse (voir la conclusion). C'est pourquoi ce travail ne se veut que la présentation d'un formalisme, non pas d'un ensemble de résultats originaux. Toutefois, si le travail a été bien fait, il sera possible d'utiliser le formalisme développé pour effectuer des calculs théoriques pour le BEDT-TTF pouvant ensuite être comparés à des résultats expérimentaux où la vitesse et l'atténuation du son ont été mesuré lors de la transition vers l'état supraconducteur.

2 Origine du couplage électron-phonon

Dans cette section, nous présenterons les hamiltoniens d'électrons libres, de phonons libres ainsi que l'origine de l'hamiltonien électron-phonon. Tout d'abord, dans l'approximation des liaisons fortes (faible recouvrement des orbitales atomiques; on ne perd pas les contributions individuelles), la propagation libre des électrons sur les sites du réseau 2D s'exprime à l'aide de l'hamiltonien:

$$H_{el}^0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \tag{1}$$

où $\mathbf{k}$ est un vecteur d'onde du réseau 2D, σ l'indice de spin et $\varepsilon(\mathbf{k})$ est le spectre (e.g. $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t[\cos(k_x d) + \cos(k_y d)]$ pour une bande de liaisons fortes et un réseau carré, où d est le pas du réseau et t est l'intégrale de saut au premier voisin). En deuxième lieu, les vibrations élastiques des ions autour de leur position d'équilibre sont décrites par l'hamiltonien:

$$H_{ph}^0 = \frac{1}{2} \sum_n K (u_{n+1} - u_n)^2 + \frac{1}{2} \sum_n M \dot{u}_n^2$$

où u_n est le déplacement du n^{ieme} ion par rapport à sa position d'équilibre, K est la constante élastique du réseau et M la masse d'un ion (on suppose qu'elle est identique pour les N ions). Avec la transformée de Fourier $u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_n}$ (et l'équivalent pour $\dot{u}_n$) ainsi que la quantification canonique des modes normaux (on prend $\hbar = 1$):

$$u_{\mathbf{q}} = \sqrt{\frac{1}{2M\omega_{\mathbf{q}}}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger)$$

$$p_{\mathbf{q}} = i \sqrt{\frac{M\omega_{\mathbf{q}}}{2}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger - b_{-\mathbf{q}})$$

on obtient que :

$$H_{ph}^0 = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + 1/2)$$

avec la relation de dispersion $\omega_{\mathbf{q}}^2 = \frac{2K}{M}[1 - \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{d})]$ (voir Mattuck p.275 pour une dérivation similaire et plus complète). En dernier lieu, le mouvement des ions autour de leur position d'équilibre engendre une modulation de l'énergie des électrons, d'où l'interaction électron-phonon. Si on considère de faibles écarts par rapport aux positions d'équilibre, l'intégrale de saut est $t_{<n,m>} \approx t_{<n,m>}^0 + \frac{\partial t}{\partial d}(u_n - u_m)$ avec $< n,m >$ premiers voisins, d'où:

$$H_{el}^0 \to H_{el}^0 - \frac{\partial t}{\partial d} \sum_{<n,m>,\sigma} (u_n - u_m)(c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} + c.h.) \tag{2}$$

où nous avons utilisé $H_{el}^0 = -\sum_{<n,m>,\sigma} t_{<n,m>}^0 (c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} + c.h.)$, la relation équivalente à (1) dans l'espace réel. Dans l'espace de Fourier, on peut écrire le dernier terme de l'équation (2) sous la forme:

$$H_{ep} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^\dagger) \tag{3}$$

où V est le "volume" à deux dimensions. Nous donnons sans démonstration la valeur de $g(\mathbf{k},\mathbf{q})$ (nous avons défini $t' \equiv \frac{\partial t}{\partial d}$):

$$g(\mathbf{k},\mathbf{q}) = \frac{-4it'\sqrt{V}}{\sqrt{2NM\omega_{\mathbf{q}}}} \left[\cos\left(\left(k_x + \frac{q_x}{2}\right)d\right) \sin\frac{q_x d}{2} + \cos\left(\left(k_y + \frac{q_y}{2}\right)d\right) \sin\frac{q_y d}{2} \right] \tag{4}$$

Cette quantité est une mesure directe de l'importance du couplage entre les électrons et les phonons. Notons que si on néglige la dépendance en $\mathbf{k}$, nous avons alors que $g(\mathbf{q})g(\text{-}\mathbf{q}) = \|g(\mathbf{q})\|^2$ où $\|...\|$ représente la norme. Ce dernier résultat nous sera utile plus loin.

Notre problème se situe donc dans un espace d'Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} \bigotimes \mathcal{H}_{ph}$, où $\mathcal{H}_{el}$ est l'espace de Fock pour les électrons (états d'occupation $|n_{\mathbf{k}_1,\sigma},...,n_{\mathbf{k}_i,\sigma},... >$) et $\mathcal{H}_{ph}$ est l'espace de Fock pour les phonons (états d'occupation $|n_{\mathbf{q}_1},...,n_{\mathbf{q}_{max}} >$, où nous supposons une fréquence de coupure pour les phonons). Comme ils agissent dans des espaces différents, $[H^0_{el}, H^0_{ph}] = 0$; cependant, $[H^0_{el}, H_{ep}] \neq 0$ et $[H^0_{ph}, H_{ep}] \neq 0$. Nous utiliserons donc la représentation d'interaction pour la fonction de partition:

$$Z = Tr \ \ e^{-\beta H} = Tr \ \ e^{-\beta H^0_{el}} \ \ e^{-\beta H^0_{ph}} \ \ T_\tau \ \ e^{-\int_0^\beta H_{ep}(\tau) d\tau} \tag{5}$$

où la trace porte sur les états $|el> \bigotimes |ph>$ et où $H_{ep}(\tau) \equiv e^{H_0\tau} H_{ep} e^{-H_0\tau}$, avec $H_0 \equiv H^0_{el} + H^0_{ph}$; T_τ est l'opérateur d'ordre chronologique.

3 Intégration des phonons

Lors de l'étude d'un système correspondant à un espace d'Hilbert produit tensoriel de plusieurs sous-espaces d'Hilbert, il est commun d'effectuer une trace partielle sur l'un ou l'autre de ces sous-espaces. Ainsi, dans cette section, nous ferons la trace sur les degrés de liberté associés aux phonons. Cette procédure porte le nom d'*intégration des phonons*. Nous verrons que la trace sur l'hamiltonien d'interaction électron-phonon fera naturellement apparaître le propagateur de phonons libre. Commençons par calculer la fonction de partition des phonons libres:

$$\begin{aligned}
Z^0_{ph} &\equiv Tr_{ph} \ \ e^{-\beta H^0_{ph}} \\
&= Tr_{ph} \ \ e^{-\sum_{\mathbf{q}} \beta\omega_{\mathbf{q}} (b^\dagger_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + 1/2)} \\
&= Tr_{ph} \ \ \prod_{\mathbf{q}} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}} (b^\dagger_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + 1/2)} \\
&= \prod_{\mathbf{q}} Tr_{ph=\mathbf{q}} \ \ e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}} (b^\dagger_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + 1/2)} \\
&= \prod_{\mathbf{q}} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}} n} \\
&= \prod_{\mathbf{q}} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}/2}}{1 - e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}}
\end{aligned} \tag{6}$$

car le nombre de phonons n'est pas fixé et $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$ si $|x| < 1$. Puisque par définition, la valeur moyenne thermodynamique d'une observable non perturbée est donnée par $\langle O \rangle_0 \equiv \frac{Tr_0 e^{-\beta H_0} O}{Z_0}$, on peut écrire (5) sous la forme:

$$Z = Z^0_{ph} \;\; Tr_{el} \;\; e^{-\beta H^0_{el}} \langle T_\tau \;\; e^{-\int_0^\beta H_{ep}(\tau) d\tau} \rangle_{0,ph} \tag{7}$$

Notons en passant que:

$$\begin{aligned} H_{ep}(\tau) &= e^{\tau H_0} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) c^\dagger_{\mathbf{k+q},\sigma} \mathbb{I} c_{\mathbf{k},\sigma} \mathbb{I} (b_\mathbf{q} + b^\dagger_{-\mathbf{q}}) e^{-\tau H_0} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) c^\dagger_{\mathbf{k+q},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) (b_\mathbf{q}(\tau) + b^\dagger_{-\mathbf{q}}(\tau)) \end{aligned}$$

où nous avons pour tout opérateur $a(\tau) \equiv e^{\tau H_0} a e^{-\tau H_0}$. Le calcul de la valeur moyenne non perturbée sur les phonons dans (7) peut s'effectuer exactement. En effet, si on développe l'exponentielle, on trouve que seuls les termes pairs sont non nuls, car les termes impairs ne peuvent conserver le nombre de phonons ($\Rightarrow$ produit de vecteurs propres d'occupation orthogonaux). Nous avons ainsi que:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \;\; e^{-\int_0^\beta H_{ep}(\tau) d\tau} \rangle_{0,ph} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) \ldots H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} \\ &\to \sum_{n \; pair}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) \ldots H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} \end{aligned}$$

Même pour les termes pairs, seuls ceux contenant un nombre égal d'opérateurs de création et d'annihilation donneront une contribution non nulle. Nous pouvons alors utiliser le théorème de Wick, qui stipule qu'une telle moyenne est égale à la somme de toutes les moyennes possibles de paires d'opérateurs:

$$\begin{aligned} &\int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) \ldots H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} = \\ &\int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) H_{ep}(\tau_2) \rangle_{0,ph} \ldots \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_{n-1}) H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} \\ &+ \int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) H_{ep}(\tau_3) \rangle_{0,ph} \ldots \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_{n-1}) H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} + \ldots \end{aligned}$$

Tous les termes du membre de droite sont égaux. Or, il y a (n-1) façons de former la première paire, (n-3) façons de former la seconde, etc. On trouve donc que:

$$\begin{aligned} &\int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) \ldots H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} = \\ &(n-1)!! \int_0^\beta d\tau_1 \ldots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_1) H_{ep}(\tau_2) \rangle_{0,ph} \ldots \langle T_\tau \;\; H_{ep}(\tau_{n-1}) H_{ep}(\tau_n) \rangle_{0,ph} \end{aligned}$$

Puisque $\frac{(n-1)!!}{n!} = \frac{1}{n(n-2)\ldots 2}$ et que n est pair, on fait le changement d'indice de sommation $n = 2m$, d'où:

$$
\begin{aligned}
\langle T_\tau \ \ e^{-\int_0^\beta H_{ep}(\tau)d\tau}\rangle_{0,ph} &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2m(2m-2)\dots 2} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_{2m} \langle T_\tau \ \ H_{ep}(\tau_1) H_{ep}(\tau_2)\rangle_{0,ph} \dots \\
&\times \langle T_\tau \ \ H_{ep}(\tau_{2m-1}) H_{ep}(\tau_{2m})\rangle_{0,ph} \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2^m m!} \left[\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \langle T_\tau \ \ H_{ep}(\tau) H_{ep}(\tau')\rangle_{0,ph} \right]^m \\
&= e^{\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \langle T_\tau \ \ H_{ep}(\tau) H_{ep}(\tau')\rangle_{0,ph}}
\end{aligned}
$$

Or, d'après (3), nous avons que:

$$
\begin{aligned}
\langle T_\tau \ \ H_{ep}(\tau) H_{ep}(\tau')\rangle_{0,ph} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{q}',\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) g(\mathbf{k}',\mathbf{q}') c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}',\sigma'}(\tau') c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau') \\
&\times \left[\langle T_\tau b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{-\mathbf{q}'}(\tau')\rangle_{0,ph} + \langle T_\tau b^\dagger_{-\mathbf{q}}(\tau) b_{\mathbf{q}'}(\tau')\rangle_{0,ph} \right] \\
&= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma,\mathbf{k}',\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) g(\mathbf{k}',-\mathbf{q}) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}(\tau') c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau') \\
&\times \left[\langle T_\tau b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} + \langle T_\tau b^\dagger_{-\mathbf{q}}(\tau) b_{-\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} \right]
\end{aligned}
$$

L'intégration exacte des degrés de liberté des phonons est donc équivalente à une *interaction retardée* (car il y a la présence des deux "temps" τ et τ') entre les électrons, cette dernière étant médiée par les phonons. En introduisant le propagateur de phonons libre $\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau-\tau') = -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} - \langle T_\tau b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau) b_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph}$, on peut donc écrire l'équation précédente sous la forme (puisque la somme sur $\mathbf{q}$ porte sur toute la zone de Brillouin):

$$
\langle T_\tau \ \ H_{ep}(\tau) H_{ep}(\tau')\rangle_{0,ph} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma,\mathbf{k}',\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) g(\mathbf{k}',-\mathbf{q}) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}(\tau') c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau') \mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau-\tau')
$$

Nous trouvons donc finalement que (7) s'écrit sous la forme:

$$
\begin{aligned}
Z = Z^0_{ph} \ \ Tr_{el} \ \ e^{-\beta H^0_{el}} \ \ \exp\Big(&-\frac{1}{2V} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma,\mathbf{k}',\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q}) g(\mathbf{k}',-\mathbf{q}) \\
&\times c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}(\tau') c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau') \mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau-\tau') \Big)
\end{aligned}
\tag{8}
$$

4 Notes sur le propagateur de phonons libres

Dans cette section, nous calculerons la valeur explicite du propagateur de phonons libre, autant en fonction du "temps" qu'en fonction de la "fréquence". Nous en profiterons pour réécrire la fonction de partition (8) en fonction de la "fréquence". Dans la suite de ce travail, nous aurons souvent à passer d'une représentation à l'autre, ce qui se fera par l'entremise des transformations de Fourier appropriées. Tout d'abord, nous savons que le propagateur de phonons libre est donné par l'expression:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau-\tau') &= -\langle T_\tau b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} - \langle T_\tau b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau) b_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph}\\ &= -\Theta(\tau-\tau')\left[\langle b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} + \langle b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau) b_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph}\right]\\ &\quad -\Theta(\tau'-\tau)\left[\langle b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau') b_{\mathbf{q}}(\tau)\rangle_{0,ph} + \langle b_{\mathbf{q}}(\tau') b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau)\rangle_{0,ph}\right]\end{aligned}$$

où $\Theta(\tau)$ est la fonction de Heaviside. Évaluons les valeurs moyennes:

$$\langle b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} \equiv \frac{Tr_{ph}\ \ e^{-\beta H^0_{ph}} b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')}{Z^0_{ph}} \equiv \frac{I}{Z^0_{ph}} \tag{9}$$

En utilisant le fait que le nombre de phonons n'est pas fixé, on a que:

$$\begin{aligned}I &= \prod_{\mathbf{q}'} Tr_{ph=\mathbf{q}'} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}(b^\dagger_{\mathbf{q}'}b_{\mathbf{q}'}+1/2)} e^{\tau\omega_{\mathbf{q}'}(b^\dagger_{\mathbf{q}'}b_{\mathbf{q}'}+1/2)} b_{\mathbf{q}} e^{-\tau\omega_{\mathbf{q}'}(b^\dagger_{\mathbf{q}'}b_{\mathbf{q}'}+1/2)}\\ &\times e^{\tau'\omega_{\mathbf{q}'}(b^\dagger_{\mathbf{q}'}b_{\mathbf{q}'}+1/2)} b^\dagger_{\mathbf{q}} e^{-\tau'\omega_{\mathbf{q}'}(b^\dagger_{\mathbf{q}'}b_{\mathbf{q}'}+1/2)}\\ &= \prod_{\mathbf{q}'}^{(\mathbf{q})} Tr_{ph=\mathbf{q}'} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}(b^\dagger_{\mathbf{q}'}b_{\mathbf{q}'}+1/2)}\ \ Tr_{ph_{\mathbf{q}}} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}(b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}+1/2)} e^{\tau\omega_{\mathbf{q}}(b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}+1/2)} b_{\mathbf{q}} e^{-\tau\omega_{\mathbf{q}}(b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}+1/2)}\\ &\times e^{\tau'\omega_{\mathbf{q}}(b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}+1/2)} b^\dagger_{\mathbf{q}} e^{-\tau'\omega_{\mathbf{q}}(b^\dagger_{\mathbf{q}}b_{\mathbf{q}}+1/2)}\\ &= \prod_{\mathbf{q}'}^{(\mathbf{q})} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}/2}}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}}} \sum_{n=0}^{\infty} \Big(e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}n} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}/2} e^{\tau\omega_{\mathbf{q}}n} e^{\tau\omega_{\mathbf{q}}/2}\\ &\times \sqrt{n+1}\ \ e^{-\tau\omega_{\mathbf{q}}(n+1)} e^{-\tau\omega_{\mathbf{q}}/2} e^{\tau'\omega_{\mathbf{q}}(n+1)} e^{\tau'\omega_{\mathbf{q}}/2} \sqrt{n+1}\ \ e^{-\tau'\omega_{\mathbf{q}}n} e^{-\tau'\omega_{\mathbf{q}}/2}\Big)\\ &= \prod_{\mathbf{q}'}^{(\mathbf{q})} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}/2}}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}}} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}/2} e^{-\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}n}\end{aligned}$$

où dans la première ligne, nous avons directement simplifié les $e^{\pm\tau H^0_{el}}$ puisque la trace ne porte que sur les phonons et où $\prod^{(\mathbf{q})}_{\mathbf{q}'}$ signifie le produit sur tous les $\mathbf{q}'$, sauf $\mathbf{q}'=\mathbf{q}$. Puisque $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} = \frac{1}{1-e^{-x}}$, alors $\sum_{n=0}^{\infty} ne^{-xn} = \frac{e^{-x}}{(1-e^{-x})^2}$; ainsi:

$$\begin{aligned}I &= \prod_{\mathbf{q}'}^{(\mathbf{q})} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}/2}}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}}} e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}/2} e^{-\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')} \left(\frac{1}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}} + \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}}{(1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}})^2}\right)\\ &= e^{-\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')} \prod_{\mathbf{q}'} \frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}/2}}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}'}}} \left(1+\frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}}\right)\end{aligned}$$

Puisque $\frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}}{1-e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}} = \frac{1}{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}}-1} \equiv n_B(\omega_{\mathbf{q}})$ (la fonction de distribution de Bose-Einstein), on trouve d'après (6) et (9) que $\langle b_{\mathbf{q}}(\tau) b^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau')\rangle_{0,ph} = e^{-\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')}\left[1+n_B(\omega_{\mathbf{q}})\right]$. Le propagateur de phonons libre prend donc la forme:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau-\tau') &= -\Theta(\tau-\tau')\left[e^{-\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')}\big(1+n_B(\omega_{\mathbf{q}})\big)+e^{\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')}n_B(\omega_{\mathbf{q}})\right]\\
&\quad-\Theta(\tau'-\tau)\left[e^{\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')}\big(1+n_B(\omega_{\mathbf{q}})\big)+e^{-\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')}n_B(\omega_{\mathbf{q}})\right]\\
&= -\left[e^{-\omega_{\mathbf{q}}|\tau-\tau'|}+2n_B(\omega_{\mathbf{q}})\cosh[\omega_{\mathbf{q}}(\tau-\tau')]\right]
\end{aligned}
$$

Cette expression nous permet de calculer la transformée de Fourier $\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m)$ du propagateur de phonons libre, où $\omega_m = 2\pi m/\beta$ sont les fréquences de Matsubara (paires pour des phonons). Cette représentation en "fréquence" nous sera utile pour effectuer la transformation d'Hubbard-Stratonovich ainsi que pour certains calculs. Nous avons que:

$$
\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau) = \frac{1}{\beta}\sum_m e^{-i\omega_m\tau}\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m) \tag{10}
$$

$$
\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau}\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau) \tag{11}
$$

Ainsi, en posant $\tau-\tau'\to\tau>0$ et en utilisant le fait que $e^{i\omega_m\beta}=1$, on trouve que:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m) &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau}\left[n_B(\omega_{\mathbf{q}})e^{\omega_{\mathbf{q}}\tau}+\big(n_B(\omega_{\mathbf{q}})+1\big)e^{-\omega_{\mathbf{q}}\tau}\right]\\
&= -n_B(\omega_{\mathbf{q}})\left[\frac{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}}-1}{i\omega_m+\omega_{\mathbf{q}}}\right]-(n_B(\omega_{\mathbf{q}})+1)\left[\frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}-1}{i\omega_m-\omega_{\mathbf{q}}}\right]\\
&= \frac{-1}{i\omega_m+\omega_{\mathbf{q}}}-\frac{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}}}{e^{\beta\omega_{\mathbf{q}}}-1}\left[\frac{e^{-\beta\omega_{\mathbf{q}}}-1}{i\omega_m-\omega_{\mathbf{q}}}\right]\\
&= \frac{-1}{i\omega_m+\omega_{\mathbf{q}}}+\frac{1}{i\omega_m-\omega_{\mathbf{q}}}=\frac{-2\omega_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}^2+\omega_m^2}
\end{aligned} \tag{12}
$$

Nous pouvons à présent exprimer la fonction de partition (8) en terme des fréquences de Matsubara. Avec:

$$
c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_n e^{-i\omega_n\tau}c_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma} \tag{13}
$$

où $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ (fréquences de Matsubara impaires pour des fermions) et la définition équivalente pour $c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)$, on peut en effet procéder à la réécriture suivante:

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{2V}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma,\mathbf{k}',\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q})g(\mathbf{k}',-\mathbf{q})c^\dagger_{\mathbf{k+q},\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}(\tau')c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau')\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau-\tau')\\
&=-\frac{1}{2V}\frac{1}{\beta^3}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma,\mathbf{k}',\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q})g(\mathbf{k}',-\mathbf{q})\sum_{m,\{n\}} c^\dagger_{\mathbf{k+q},\omega_{n1},\sigma}c_{\mathbf{k},\omega_{n2},\sigma}c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\omega_{n3},\sigma'}c_{\mathbf{k}',\omega_{n4},\sigma'}\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m)\\
&\times e^{i\omega_{n1}\tau}e^{-i\omega_{n2}\tau}e^{i\omega_{n3}\tau}e^{-i\omega_{n4}\tau}e^{-i\omega_m(\tau-\tau')}\\
&=-\frac{1}{2V\beta}\sum_{\{\ldots\}} g(\mathbf{k},\mathbf{q})g(\mathbf{k}',-\mathbf{q})\sum_{m,\{n\}} c^\dagger_{\mathbf{k+q},\omega_{n1},\sigma}c_{\mathbf{k},\omega_{n2},\sigma}c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\omega_{n3},\sigma'}c_{\mathbf{k}',\omega_{n4},\sigma'}\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m)\delta_{m-n1+n2,0}\delta_{m+n3-n4,0}\\
&=-\frac{1}{2V\beta}\sum_{\{\ldots\}} g(\mathbf{k},\mathbf{q})g(\mathbf{k}',-\mathbf{q})\sum_{m,n,n'} c^\dagger_{\mathbf{k+q},\omega_{n+m},\sigma}c_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma}c^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\omega_{n'-m},\sigma'}c_{\mathbf{k}',\omega_{n'},\sigma'}\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m)
\end{aligned}
$$

car $\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau}=\beta\delta_{n,0}$. En introduisant les bivecteurs $\tilde{k}=(\mathbf{k},\omega_n)$ et $\tilde{q}=(\mathbf{q},\omega_m)$, l'expression précédente devient:

$$
-\frac{1}{2V\beta}\sum_{\tilde{k},\tilde{k}',\tilde{q},\sigma,\sigma'} g(\mathbf{k},\mathbf{q})g(\mathbf{k}',-\mathbf{q})c^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}c^\dagger_{\tilde{k}'-\tilde{q},\sigma'}c_{\tilde{k}',\sigma'}\mathcal{D}^o(\tilde{q})
$$

La fonction de partition (8) se récrit donc finalement sous la forme:

$$
Z=Z^0_{ph}\;\; Tr_{el}\;\; e^{-\beta H^0_{el}}\;\; \exp\Big(-\frac{1}{2V\beta}\sum_{\{\ldots\}} g(\mathbf{k},\mathbf{q})g(\mathbf{k}',-\mathbf{q})c^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}c^\dagger_{\tilde{k}'-\tilde{q},\sigma'}c_{\tilde{k}',\sigma'}\mathcal{D}^o(\tilde{q})\Big) \tag{14}
$$

5 Première transformation Hubbard-Stratonovich

Dans cette section, nous effectuerons une transformation d'Hubbard-Stratonovich sur la fonction de partition (14). Cette transformation repose sur l'identité suivante, valable pour une matrice H hermitique positive de dimension $n\times n$, (voir Negele et Orland p.34 pour la preuve):

$$
\frac{(2i\pi)^n}{\det H}e^{J_i^* H_{ij}^{-1} J_j}=\int\prod_{i=1}^n d\varphi_i d\varphi_i^*\;\; e^{-\varphi_i^* H_{ij}\varphi_j+J_i^*\varphi_i+J_i\varphi_i^*} \tag{15}
$$

où les sommes sur les indices répétés sont implicites. Dans les trois prochaines sous-sections, nous commencerons par définir deux nouveaux opérateurs, puis nous procéderons à la transformation d'Hubbard-Stratonovich et finalement, nous réexprimerons le résultat obtenu sous une forme plus simple.

5.1 Opérateurs B et B†

Définissons $B^\dagger_{\tilde{q}}\equiv\sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}}{\sqrt{V}}$, d'où $B_{\tilde{q}}=\sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^\dagger_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{\sqrt{V}}$. Nous allons brièvement montrer que ces opérateurs possèdent deux propriétés intéressantes. Tout d'abord, nous pouvons effectuer le changement d'indice de sommation $\tilde{k}\to\tilde{k}\pm\tilde{q}$ dans ces expressions. Ensuite, les opérateurs $B^\dagger_{\tilde{q}}$ et $B_{\tilde{q}}$ commutent.

• Changement d'indice

En premier lieu, les conditions aux limites périodiques font en sorte que nous avons $\sum_{\mathbf{k}} c^{(\dagger)}_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} c^{(\dagger)}_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q},\omega_n,\sigma}$. De plus, nous avons que $\sum_n c^{(\dagger)}_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma} = \sum_n c^{(\dagger)}_{\mathbf{k},\omega_{n\pm m},\sigma}$ car $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta, n \in \mathbb{Z}$ et $\omega_m = 2m\pi/\beta, m \in \mathbb{Z}$. On obtient donc, en utilisant la notation des bivecteurs, que $\sum_{\tilde{k}} c^\dagger_{\tilde{k},\sigma} = \sum_{\tilde{k}} c^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}$. Ceci est également valable pour le produit d'un nombre arbitraire d'opérateurs $c^\dagger_{\tilde{k},\sigma}$, à condition d'effectuer le même changement d'indice pour tous les opérateurs. En particulier:

$$B_{\tilde{q}} = \sum_{\tilde{k},\sigma} \frac{c^\dagger_{\tilde{k},\sigma} c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{\sqrt{V}} = \sum_{\tilde{k},\sigma} \frac{c^\dagger_{\tilde{k}-\tilde{q},\sigma} c_{\tilde{k},\sigma}}{\sqrt{V}} \Rightarrow B^\dagger_{\tilde{q}} = B_{-\tilde{q}}$$

⋆ Interprétation physique: l'opérateur $B^\dagger_{\tilde{q}}$ ($B_{\tilde{q}}$) augmente (diminue) de $\mathbf{q}$ le vecteur d'onde et de ω_m la "fréquence" des électrons. Nous rappelons que la "fréquence" vient de l'interaction retardée.

• Commutation

De manière générale, nous avons les relations d'anticommutation suivantes entre les fermions: $\{c_{\tilde{k},\sigma}, c^\dagger_{\tilde{k}',\sigma'}\} = \delta_{\tilde{k},\tilde{k}'}\delta_{\sigma,\sigma'}$; $\{c_{\tilde{k},\sigma}, c_{\tilde{k}',\sigma'}\} = 0$. Alors, lorsque $\sigma \neq \sigma'$ OU lorsque $\tilde{k} \neq \tilde{k}' - \tilde{q}$, nous avons:

$$\begin{aligned} B^\dagger_{\tilde{q}} B_{\tilde{q}} &= \sum_{\tilde{k},\tilde{k}',\sigma,\sigma'} \frac{c^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma} c_{\tilde{k},\sigma} c^\dagger_{\tilde{k}'-\tilde{q},\sigma'} c_{\tilde{k}',\sigma'}}{V} \\ &= \sum_{\tilde{k},\tilde{k}',\sigma,\sigma'} \frac{c^\dagger_{\tilde{k}'-\tilde{q},\sigma'} c_{\tilde{k}',\sigma'} c^\dagger_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma} c_{\tilde{k},\sigma}}{V} \\ &= B_{\tilde{q}} B^\dagger_{\tilde{q}} \end{aligned}$$

À l'opposé, lorsque $\sigma = \sigma'$ ET $\tilde{k} = \tilde{k}' - \tilde{q}$, nous avons:

$$
\begin{aligned}
B_{\tilde{q}}^{\dagger}B_{\tilde{q}} &= \sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}c^{\dagger}_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{V}\\
&= \sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{V}-\sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c^{\dagger}_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{V}\\
&= \sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{V}-\sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k},\sigma}c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}}{V}\\
&= \sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}}{V}-\sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}}{V}+\sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}}{V}\\
&= \sum_{\tilde{k},\sigma}\frac{c^{\dagger}_{\tilde{k},\sigma}c_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c^{\dagger}_{\tilde{k}+\tilde{q},\sigma}c_{\tilde{k},\sigma}}{V} = B_{\tilde{q}}B_{\tilde{q}}^{\dagger}
\end{aligned}
$$

Nous voyons donc que $B_{\tilde{q}}^{\dagger}$ et $B_{\tilde{q}}$ commutent.

5.2 Introduction des champs φ et φ^*

Nous pouvons utiliser les opérateurs $B_{\tilde{q}}^{\dagger}$ et $B_{\tilde{q}}$ pour écrire la fonction de partition (14) sous la forme:

$$
Z = Z^0_{ph}\ \ Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ \exp\left(-\frac{1}{2\beta}\sum_{\tilde{q}} g(\mathbf{q})g(-\mathbf{q})\mathcal{D}^o(\tilde{q})B_{\tilde{q}}^{\dagger}B_{\tilde{q}}\right)
$$

où nous avons supposé que $g(\mathbf{k},\mathbf{q}) = g(\mathbf{q})$. En définissant $H_{\tilde{q}} \equiv \frac{-g(\mathbf{q})g(-\mathbf{q})\mathcal{D}^o(\tilde{q})}{2\beta} = \frac{\|g(\mathbf{q})\|^2|\mathcal{D}^o(\tilde{q})|}{2\beta}$, l'équation précédente devient $Z = Z^0_{ph}\ \ Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ \exp\left(\sum_{\tilde{q}} B_{\tilde{q}}^{\dagger}H_{\tilde{q}}B_{\tilde{q}}\right)$. Puisque $H_{\tilde{q}}$ est une matrice hermitique positive, nous pouvons directement utiliser (15) et obtenir:

$$
\begin{aligned}
Z &= Z^0_{ph}\ \ Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ \frac{\det H^{-1}}{(2i\pi)^{2n+1}}\int\prod_{\tilde{q}}^{2\tilde{n}+1} d\varphi_{\tilde{q}}d\varphi^*_{\tilde{q}}\exp\left(-\varphi^*_{\tilde{q}}H^{-1}_{\tilde{q}}\varphi_{\tilde{q}}+B^{\dagger}_{\tilde{q}}\varphi_{\tilde{q}}+B_{\tilde{q}}\varphi^*_{\tilde{q}}\right)\\
&= \frac{Z^0_{ph}}{[\det H](2i\pi)^{2n+1}}Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ \int\prod_{\tilde{q}}^{2\tilde{n}+1} d\varphi_{\tilde{q}}d\varphi^*_{\tilde{q}}\exp\left(-\frac{\varphi^*_{\tilde{q}}\varphi_{\tilde{q}}}{H_{\tilde{q}}}+B^{\dagger}_{\tilde{q}}\varphi_{\tilde{q}}+B_{\tilde{q}}\varphi^*_{\tilde{q}}\right)
\end{aligned}
\tag{16}
$$

où $\tilde{q}$ varie de $-\tilde{n}$ à $+\tilde{n}$ et où les sommes sur les indices répétés sont implicites. Lors du passage à la seconde ligne, nous avons utilisé le fait que H est une matrice diagonale ($\Rightarrow H_k^{-1} = 1/H_k$, d'où $\det H^{-1} = \prod_k H_k^{-1} = \prod_k(1/H_k) = 1/[\det H]$).

5.3 Expression en fonction d'un seul champ

Dans l'expression (16) pour la fonction de partition, nous n'avons pas réellement besoin des deux champs φ et φ^*. En effet, posons $\Phi^*_{\tilde{q}} = \frac{1}{2}(\varphi^*_{\tilde{q}}+\varphi_{-\tilde{q}})$; $\Psi_{\tilde{q}} = \frac{1}{2}(\varphi_{\tilde{q}}-\varphi^*_{-\tilde{q}})$, d'où $\Phi_{\tilde{q}} = \Phi^*_{-\tilde{q}}$; $\Psi^*_{\tilde{q}} = -\Psi_{-\tilde{q}}$. Inversement, on a que $\varphi^*_{\tilde{q}} = \Phi^*_{\tilde{q}}+\Psi^*_{\tilde{q}}$; $\varphi_{\tilde{q}} = \Phi_{\tilde{q}}+\Psi_{\tilde{q}}$. Ainsi:

$$\sum_{\tilde q}\varphi^*_{\tilde q}\varphi_{\tilde q} = \sum_{\tilde q}\Big(\|\Phi_{\tilde q}\|^2+\|\Psi_{\tilde q}\|^2+\Phi_{\tilde q}\Psi_{\tilde q}+\Phi^*_{\tilde q}\Psi^*_{\tilde q}\Big)$$
$$= \sum_{\tilde q}\Big(\|\Phi_{\tilde q}\|^2+\|\Psi_{\tilde q}\|^2+\Phi_{\tilde q}\Psi_{\tilde q}-\Phi_{\tilde q}\Psi_{\tilde q}\Big)$$

De même, on a que $\sum_{\tilde q} B^\dagger_{\tilde q}\varphi_{\tilde q}+B_{\tilde q}\varphi^*_{\tilde q} = \sum_{\tilde q} B_{\tilde q}\Big(\varphi_{-\tilde q}+\varphi^*_{\tilde q}\Big) = 2\sum_{\tilde q} B_{\tilde q}\Phi_{-\tilde q}$. Ceci nous permet donc d'écrire:

$$\int\prod_{\tilde q}^{2\tilde n+1} d\varphi_{\tilde q}d\varphi^*_{\tilde q}\exp\Big(-\frac{\varphi^*_{\tilde q}\varphi_{\tilde q}}{H_{\tilde q}}+B^\dagger_{\tilde q}\varphi_{\tilde q}+B_{\tilde q}\varphi^*_{\tilde q}\Big) = J\int\prod_{\tilde q}^{2\tilde n+1} d\Phi_{\tilde q}d\Psi_{\tilde q}\exp\Big(-\frac{(\|\Phi_{\tilde q}\|^2+\|\Psi_{\tilde q}\|^2)}{H_{\tilde q}}+2B_{\tilde q}\Phi_{-\tilde q}\Big)$$

où J est le jacobien de la transformation. Il est possible de procéder à l'intégrale sur les $\Psi_{\tilde q}$. On commence par noter que ($\Re$ étant la partie réelle et $\Im$ étant la partie imaginaire):

$$\int\prod_{\tilde q}^{2\tilde n+1} d\Psi_{\tilde q}\exp\Big(-\sum_{\tilde q}\Big[\frac{|\Re\{\Psi_{\tilde q}\}|^2}{H_{\tilde q}}+\frac{|\Im\{\Psi_{\tilde q}\}|^2}{H_{\tilde q}}\Big]\Big) =$$
$$\int d\Psi_0\exp\Big(-\Big[\frac{|\Re\{\Psi_0\}|^2}{H_0}+\frac{|\Im\{\Psi_0\}|^2}{H_0}\Big]\Big)\int\prod_{\tilde q>0}\exp\Big(-2\sum_{\tilde q>0}\Big[\frac{|\Re\{\Psi_{\tilde q}\}|^2}{H_{\tilde q}}+\frac{|\Im\{\Psi_{\tilde q}\}|^2}{H_{\tilde q}}\Big]\Big)$$

car $H_{\tilde q} = H_{-\tilde q}$ et $\|\Psi_{\tilde q}\|^2 = \|\Psi_{-\tilde q}\|^2$, d'où $\exp\Big(\frac{\|\Psi_{\tilde q}\|^2}{H_{\tilde q}}+\frac{\|\Psi_{-\tilde q}\|^2}{H_{-\tilde q}}\Big)\to\exp\Big(2\frac{\|\Psi_{\tilde q}\|^2}{H_{\tilde q}}\Big)$. Puisque $\Psi_{-\tilde q} = -\Psi^*_{\tilde q}$, on a que $\Re\{\Psi_0\} = 0$. En posant $\Psi_{\tilde q} = u_{\tilde q}+iv_{\tilde q}$, on écrit l'expression précédente sous la forme:

$$\int idv_0e^{-v_0^2/H_0}\int\prod_{\tilde q>0}^{\tilde n} 2idu_{\tilde q}dv_{\tilde q}\exp\Big(-2\sum_{\tilde q>0}\Big[\frac{u^2_{\tilde q}}{H_{\tilde q}}+\frac{v^2_{\tilde q}}{H_{\tilde q}}\Big]\Big) = i\sqrt{\pi H_0}(2i)^{\tilde n}\prod_{\tilde q>0}^{\tilde n}\sqrt{\frac{\pi}{2}H_{\tilde q}}\sqrt{\frac{\pi}{2}H_{\tilde q}}$$
$$= \frac{2^{\tilde n}}{2^{\tilde n}}i^{\tilde n+1}(\sqrt{\pi})^{2\tilde n+1}\prod_{\tilde q}^{2\tilde n+1}\sqrt{H_{\tilde q}}$$
$$= i^{\tilde n+1}(\sqrt{\pi})^{2\tilde n+1}\,[\det H]^{1/2}$$

On voit donc que la fonction de partition (16) devient:

$$Z = \frac{Z^0_{ph}Ji^{\tilde n+1}(\sqrt{\pi})^{2\tilde n+1}}{[\det H]^{1/2}\,(2i\pi)^{2\tilde n+1}}Tr_{el}\;\; e^{-\beta H^0_{el}}\;\;\int\prod_{\tilde q}^{2\tilde n+1} d\Phi_{\tilde q}\exp\Big(-\frac{\|\Phi_{\tilde q}\|^2}{H_{\tilde q}}+2B_{\tilde q}\Phi_{-\tilde q}\Big)$$

En posant $\mathcal{A} = \frac{J}{[\det H]^{1/2}i^{\tilde n}2^{2\tilde n+1}(\sqrt{\pi})^{2\tilde n+1}}$, on a que:

$$Z = \mathcal{A}Z^0_{ph}Tr_{el}\;\; e^{-\beta H^0_{el}}\;\;\int\mathcal{D}\Phi\exp\Big(-\frac{\|\Phi_{\tilde q}\|^2}{H_{\tilde q}}+2B_{\tilde q}\Phi_{-\tilde q}\Big) \tag{17}$$

où la somme sur $\tilde q$ dans l'argument de l'exponentielle est implicite. Notons en passant qu'il semble que $J = 2^{\tilde n+1}$; c'est du moins le cas pour $\tilde n = 0$ et $\tilde n = 1$. Nous n'avons toutefois pas vérifié la généralité de cette expression.

6 Première correction au propagateur de phonons

Dans cette section, nous calculerons la correction (au premier ordre non nul) apportée par le couplage électron-phonon au propagateur de phonons libre. En premier lieu, nous réexprimerons la fonction de partition (17) en fonction du "temps". En deuxième lieu, nous utiliserons l'approximation des cumulants sur cette nouvelle expression, ce qui fera apparaître directement la "bulle" électron-trou. En dernier lieu, nous calculerons la valeur de cette "bulle" pour certains cas limites très simples. Veuillez noter que le retour partiel à l'expression "temporelle" pour la fonction de partition n'a pour but que de nous permettre de rencontrer des termes connus lors du développement menant à la "bulle" électron-trou, i.e. des fonctions de Green. Pour les calculs comme tels, nous retournerons à une représentation purement en "fréquences".

6.1 Retour partiel à la représentation "temporelle"

Pour réexprimer l'intégrale fonctionnelle dans (17) en terme de variables "temporelles", nous utiliserons les transformations de Fourier déjà définies pour $\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\tau)$, $\mathcal{D}^o(\mathbf{q},\omega_m)$, $c^{(\dagger)}_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)$ et $c^{(\dagger)}_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma}$. Pour le champ auxiliaire Φ, nous utiliserons plutôt:

$$\Phi_{\mathbf{q}}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_m e^{-i\omega_m\tau}\Phi_{\mathbf{q},\omega_m} \;\; ; \;\; \Phi_{\mathbf{q},\omega_m} = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau}\Phi_{\mathbf{q}}(\tau)$$

Étant donné que $\Phi_{\mathbf{q},\omega_m} = \Phi^*_{-\mathbf{q},-\omega_m}$, on déduit que $\Phi^*_{-\mathbf{q}}(\tau) = \Phi_{\mathbf{q}}(\tau)$. Rappelons aussi que $\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau} = \beta\delta_n,0$ et que $\sum_\omega e^{i\omega\tau} = \beta\delta(\tau)$. Nous avons donc que:

$$\begin{aligned}
2\sum_{\omega_m} B(\mathbf{q},\omega_m)\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m} &= \frac{2}{\sqrt{V}}\sum_{\omega_m,\mathbf{k},\omega_n,\sigma} c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega_n-\omega_m,\sigma}c_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma}\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m}\\
&= \frac{2}{\beta\sqrt{V}}\sum_{\omega_m,\mathbf{k},\omega_n,\sigma}\int_0^\beta d\tau_1 e^{-i(\omega_n-\omega_m)\tau_1}c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}(\tau_1)\int_0^\beta d\tau_2 c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau_2)e^{i\omega_n\tau_2}\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m}\\
&= \frac{2}{\sqrt{V}}\sum_{\omega_m,\mathbf{k},\sigma}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau}c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m}\\
&= 2\sqrt{\frac{\beta}{V}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int_0^\beta d\tau c^\dagger_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}(\tau)c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau)\\
&= 2\sqrt{\beta}\int_0^\beta d\tau B_{\mathbf{q}}(\tau)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau)
\end{aligned}$$

Notons au passage que:

$$-\sum_{\omega_m}\frac{\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}}{H_{\mathbf{q},\omega_m}} = \frac{2\beta}{\|g(\mathbf{q})\|^2}\sum_{\omega_m}\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m}\mathcal{D}^{o^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m)$$

Il est donc possible d'écrire (17) sous la forme:

$$
\begin{aligned}
Z = \mathcal{A} Z^0_{ph} Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ T_\tau \int \mathcal{D}\Phi \exp\Big(\sum_{\mathbf{q},\omega_m} \frac{2\beta}{\|g(\mathbf{q})\|^2} \Phi_{\mathbf{q},\omega_m} \Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m} \mathcal{D}^{o^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m) \\
+ \sum_{\mathbf{q}} 2\sqrt{\beta} \int_0^\beta d\tau B_{\mathbf{q}}(\tau) \Phi_{-\mathbf{q}}(\tau) \Big)
\end{aligned} \tag{18}
$$

6.2 Correction d'ordre $\Phi\Phi^*$

Dans l'expression précédente, le premier terme de l'exponentielle ne contient pas d'opérateurs agissant sur les états propres d'occupation électroniques. Il reste donc uniquement à calculer:

$$
Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ T_\tau \exp\Big(2\sqrt{\beta} \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau B_{\mathbf{q}}(\tau)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau)\Big) = Z^0_{el}\ \ \langle T_\tau \exp\Big(2\sqrt{\beta}\sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau B_{\mathbf{q}}(\tau)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau)\Big)\rangle_{0,el}
$$

Le théorème des cumulants donne le développement $\langle e^x \rangle = e^{\langle x \rangle + \frac{1}{2}\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle + \frac{1}{6}\langle(x-\langle x\rangle)^3\rangle + \cdots}$ (voir Le Bellac, p.112). Dans notre cas, $\langle T_\tau 2\sqrt{\beta}\sum_{\mathbf{q}}\int_0^\beta d\tau B_{\mathbf{q}}(\tau)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau)\rangle_{0,el} = 0$ car l'opérateur $B_{\mathbf{q}}$ ne conserve pas la quantité de mouvement des électrons et on se retrouve donc avec le produit d'états propres d'occupation orthogonaux. Cependant (le 2! provient du développement en cumulants):

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2!}\langle T_\tau 4\beta \sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 B_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Phi_{-\mathbf{q}_1}(\tau_1) B_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Phi_{-\mathbf{q}_2}(\tau_2)\rangle_{0,el} \\
&= 2\beta \langle T_\tau \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 B_{-\mathbf{q}}(\tau_1)\Phi_{\mathbf{q}}(\tau_1) B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el} \\
&= 2\beta \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_\tau B_{-\mathbf{q}}(\tau_1) B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}\ \ \Phi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau_2)
\end{aligned}
$$

L'expression (18) pour la fonction de partition devient donc, en arrêtant le développement en cumulants au premier terme non nul:

$$
\begin{aligned}
Z = \mathcal{A} Z^0_{ph} Z^0_{el} \int \mathcal{D}\Phi \exp\Big(2\beta \sum_{\mathbf{q}} \Big(\sum_{\omega_m} \frac{1}{\|g(\mathbf{q})\|^2} \Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m} \mathcal{D}^{o^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m) \\
+ \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \langle T_\tau B_{-\mathbf{q}}(\tau_1) B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}\ \ \Phi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau_2)\Big)\Big)
\end{aligned} \tag{19}
$$

6.3 Calcul de la "bulle" électron-trou

Dans cette sous-section, nous ferons le calcul général de la "bulle" électron-trou, ce qui nous conduira à la fonction de Lindhard. Nous ne calculerons la valeur de cette fonction que pour deux cas limites bien précis. On peut trouver dans la littérature des résultats correspondants à des cas plus généraux que ceux que nous traiterons.

D'après le théorème de Wick, on pourrait s'attendre à ce que la valeur moyenne $\langle T_\tau B_{-\mathbf{q}}(\tau_1)B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}$ conduise à la somme de deux termes, soit un de la forme $\langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}(\tau_1)c_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}(\tau_1)\rangle_{0,el}\ \ \langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}(\tau_2)c_{\mathbf{k}_2,\sigma_2}(\tau_2)\rangle_{0,el}$ et un autre de la forme $\langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}(\tau_1)c_{\mathbf{k}_2,\sigma_2}(\tau_2)\rangle_{0,el}\ \ \langle T_\tau c_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}(\tau_2)\rangle_{0,el}$. En langage diagrammatique, le premier de ces termes correspond à deux diagrammes non connexes, tandis que le second correspond à un diagramme connexe. Or, d'après le "linked cluster theorem", seuls les diagrammes connexes contribuent aux valeurs moyennes. Ainsi, il ne reste que le second terme, qui correspond au diagramme appelé la "bulle" électron-trou. Nous commencerons par exprimer cette "bulle" en terme des fonctions de Green, puis nous reviendrons à une représentation en "fréquences", suite à quoi nous effectuerons une somme sur les fréquences de Matsubara.

Comme nous l'avons mentionné, le théorème de Wick, le "linked cluster theorem" et l'orthogonalité de vecteurs propres d'occupation différents nous permettent de procéder au calcul suivant (pour une configuration donnée des spins, il n'y a qu'une seule contraction possible, par exemple (14)(23)):

$$\begin{aligned}
\langle T_\tau B_{-\mathbf{q}}(\tau_1)B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el} &\equiv \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\sigma_1,\sigma_2}\langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}(\tau_1)c_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}(\tau_2)c_{\mathbf{k}_2,\sigma_2}(\tau_2)\rangle_{0,el}\\
&= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\sigma_1,\sigma_2}\langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}(\tau_1)c_{\mathbf{k}_2,\sigma_2}(\tau_2)\rangle_{0,el}\langle T_\tau c_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}(\tau_2)\rangle_{0,el}\\
&= -\frac{1}{V}\sum_{\dots}\langle T_\tau c_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}(\tau_2)c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}(\tau_1)\rangle_{0,el}\langle T_\tau c_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1}(\tau_2)\rangle_{0,el}\delta_{\sigma_1,\sigma_2}\delta_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1+\mathbf{q}}\\
&= -\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_2-\tau_1)\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},\tau_1-\tau_2)\\
&= -\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_2-\tau_1)\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},\tau_1-\tau_2)
\end{aligned} \tag{20}$$

où nous avons utilisé la définition de la fonction de Green de Matsubara $\mathcal{G}^0(\mathbf{k},\tau)\equiv-\langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau)c^\dagger_{\mathbf{k}}(0)\rangle_{0,el}$. Le diagramme de Feynman correspondant à ce terme est le diagramme 1 (voir l'appendice II). Avec la transformation de Fourier $\mathcal{G}^0(\mathbf{k},\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}e^{-i\omega_n\tau}\mathcal{G}^0(\mathbf{k},i\omega_n)$ ainsi que celle pour $\Phi_{\mathbf{q}}(\tau)$, on a que:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\langle T_\tau B_{-\mathbf{q}}(\tau_1)B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}\ \ \Phi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau_2)\\
&= -\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_2-\tau_1)\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},\tau_1-\tau_2)\Phi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Phi_{-\mathbf{q}}(\tau_2)\\
&= -\frac{2}{V}\frac{1}{\beta^3}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega_{n1},\omega_{n2},\omega_{m1},\omega_{m2}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_{n1})\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},i\omega_{n2})\Phi_{\mathbf{q},\omega_{m1}}\Phi_{-\mathbf{q},\omega_{m2}}\\
&\times e^{-i\tau_1(\omega_{n2}+\omega_{m1}-\omega_{n1})}e^{-i\tau_2(\omega_{n1}-\omega_{n2}+\omega_{m2})}\\
&= -\frac{2}{V\beta}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\dots}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_{n1})\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},i\omega_{n2})\Phi_{\mathbf{q},\omega_{m1}}\Phi_{-\mathbf{q},\omega_{m2}}\delta_{\omega_{n2}+\omega_{m1}-\omega_{n1},0}\delta_{\omega_{n1}-\omega_{n2}+\omega_{m2},0}\\
&= -\frac{2}{V\beta}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega_m,\omega_n}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_n+i\omega_m)\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},i\omega_n)\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m}
\end{aligned} \tag{21}$$

Nous voulons donc calculer $\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)\equiv-\frac{2}{V\beta}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_n+i\omega_m)\,\mathcal{G}^0(\mathbf{k},i\omega_n)$. On effectue la translation

$\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu \rightarrow \varepsilon_{\mathbf{k}}$ pour l'échelle d'énergie (l'énergie de Fermi est le nouveau zéro de l'énergie); nous avons alors que $\mathcal{G}^0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$. Ainsi:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \mathcal{G}^0(\mathbf{k}, i\omega_n)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\omega_n + i\omega_m) &= \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}\frac{1}{i\omega_n + i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\ &= \frac{1}{\beta}\frac{1}{i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}\sum_{\omega_n}\left[\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{i\omega_n + i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\right]\end{aligned} \tag{22}$$

Pour effectuer une telle somme sur les fréquences de Matsubara, on passe dans le plan complexe et il est nécessaire d'introduire un facteur de convergence: $\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{\beta}\lim_{\eta\rightarrow 0^+}\sum_{\omega_n}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}+1}$. La dernière égalité provient du théorème des résidus (voir Fetter et Walecka, p.248) qui donne:

$$\sum_{\omega_n}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n - x} = -\frac{\beta}{2i\pi}\int_C \frac{dz}{e^{\beta x}+1}\frac{e^{\eta z}}{z-x}$$

car $-\beta(e^{\beta z}+1)^{-1}$ a des pôles simples en $z = i\omega_n$, avec un résidu égal à 1. Le contour C est le contour résultant de tous les contours circulaires (sens antihoraire) autour des pôles $i\omega_n$. Ce contour peut être déformé continuement en un nouveau contour n'entourant cette fois que le pôle en $z = x$, dans le sens horaire (le facteur $(e^{\beta z}+1)^{-1}$ assure la convergence pour $\Re\{z\} > 0$, tandis que le facteur $e^{\eta z}$ assure la convergence pour $\Re\{z\} < 0$; il n'y a pas de contribution lorsque $\Re\{z\} = \pm\infty$). Bref, nous avons donc que:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n - x} = \lim_{\eta\rightarrow 0^+}\frac{e^{\eta x}}{e^{\beta x}+1} = \frac{1}{e^{\beta x}+1}$$

ce qui est la fonction de distribution de Fermi-Dirac $f(x)$. La somme (22) devient donc $\frac{1}{i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}[f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})]$, d'où:

$$\chi^0(\mathbf{q}, i\omega_m) = -\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

C'est ce que l'on appelle la fonction de Lindhard. On peut en effectuer le prolongement analytique $i\omega_n \rightarrow \lim_{\eta\rightarrow 0^+}(\omega + i\eta)$, pour obtenir:

$$\chi^0(\mathbf{q}, \omega) = -\lim_{\eta\rightarrow 0^+}\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\omega + i\eta - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tag{23}$$

Dans les deux prochaines sous-sections, nous calculerons la valeur de cette dernière expression dans deux cas limites. Tout d'abord, lorsque la "fréquence" est nulle et que le vecteur d'onde ainsi que la température tendent vers 0. Ensuite, lorsque la "fréquence" et le vecteur d'onde sont très faibles et que la température tend vers 0.

6.3.1 Calcul à $\omega = 0$, $\mathbf{q} \to 0$ et $T \to 0$

En utilisant le passage à la limite continue $\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} \to \int\int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}$, l'expression (23) devient égale à:

$$-2\lim_{\mathbf{q}\to 0}\int\int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

Or $\lim_{\mathbf{q}\to 0}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})-f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{\mathbf{k}}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}}$. De plus, à $T \to 0$, on a que $f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \to 1 - \Theta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_F})$, d'où $\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} = -\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_F})$. Dans la limite étudiée et si on suppose une surface de Fermi circulaire (i.e. $\varepsilon = \mathbf{k}^2/2m^*$ où m^* est la masse effective), nous avons donc que:

$$\begin{aligned}
\chi^0(\mathbf{q}\to 0,\omega = 0) &= \frac{2}{4\pi^2}\int\int d^2\mathbf{k}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_F}) \\
&= \frac{1}{2\pi^2}\int\int d^2\mathbf{k}2m^*\delta(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_F^2) \\
&= \frac{m^*}{\pi^2}2\pi\int kdk\delta(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_F^2) \\
&= \frac{2m^*}{\pi}\int\frac{dy}{2}\delta(y - y_F) \\
&= \frac{m^*}{\pi}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le changement de variable $y = k^2$. À 2D, la densité d'états par unité de "volume" $n(\varepsilon) \equiv \frac{1}{V}\frac{dN}{d\varepsilon}$ est constante et égale à m^*/π. Nous trouvons donc finalement que pour $T \to 0$, nous avons que:

$$\chi^0(\mathbf{q}\to 0,\omega = 0) = n(\varepsilon_F) \tag{24}$$

$\star$ À 1D et à 3D, nous aurions aussi trouvé que $\chi^0(\mathbf{q}\to 0,\omega = 0)$ est proportionnelle à la densité d'états par unité de volume évaluée à l'énergie de Fermi.

6.3.2 Calcul à faible ω et faible $\mathbf{q}$, $T \to 0$

Puisque $\lim_{\eta\to 0^+}\frac{1}{a-\omega-i\eta} = \mathcal{P}\frac{1}{a-\omega} + i\pi\delta(a-\omega)$ où $\mathcal{P}$ signifie la partie principale, nous avons les expressions suivantes pour la partie réelle et la partie imaginaire de $\chi^0(\mathbf{q},\omega)$:

$$\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{2}{(2\pi)^2}\mathcal{P}\int\int d^2\mathbf{k}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega}$$

$$\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega) = -\frac{2\pi}{(2\pi)^2}\int\int\left[f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}})\right]\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega)$$

Puisque nous sommes à faible $\mathbf{q}$, nous utiliserons le développement $f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \approx f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}}\left(\frac{kq\cos\theta}{m^*} + \mathcal{O}(q^2)\right)$ où θ est l'angle entre les vecteurs $\mathbf{k}$ et $\mathbf{q}$. De plus, puisque nous supposons que la température tend vers zéro, nous avons que $\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}} = \left(\frac{\partial f}{\partial k}\right)_{k_F}\left(\frac{\partial k}{\partial \varepsilon}\right)_{k_F} = -\delta(k-k_F)\frac{m^*}{k_F}$. Ces résultats nous seront utiles dans les calculs qui suivent.

• Calcul de la partie réelle

Avec les résultats précédents, nous voyons que:

$$\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega) = \frac{m^*}{2\pi^2 k_F}\mathcal{P}\int_0^\infty k dk \delta(k-k_f)\int_0^{2\pi}\frac{d\theta\cos\theta}{\cos\theta - \frac{m^*\omega}{kq}}$$

De manière générale, nous avons que:

$$\int \frac{\cos x dx}{a+b\cos x} = \frac{x}{b} - \frac{a}{b}\int\frac{dx}{a+b\cos x}$$

ainsi que (si $|a| < |b|$):

$$\int \frac{dx}{a+b\cos x} = \frac{1}{\sqrt{b^2-a^2}}\ln\left|\frac{\sqrt{b^2-a^2}\tan\frac{x}{2}+a+b}{\sqrt{b^2-a^2}\tan\frac{x}{2}-a-b}\right|$$

Nous verrons lors du calcul de la partie imaginaire que la condition $|a| < |b|$ (i.e. $\frac{m^*\omega}{kq} < 1$) doit être respectée. Ainsi, nous avons que:

$$\int_0^{2\pi}\frac{d\theta\cos\theta}{\cos\theta - \frac{m^*\omega}{qk}} = 2\pi$$

d'où le résultat:

$$\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega) = \frac{m^*}{2\pi^2 k_F}2\pi\int_0^\infty k dk\delta(k-k_f) = \frac{m^*}{\pi} = n(\varepsilon_F)$$

Nous retrouvons donc le même résultat que dans la limite précédente.

• Calcul de la partie imaginaire

Pour le calcul de la partie imaginaire, nous utiliserons le fait que $\delta[g(x)] = \sum_j \frac{\delta(x-x_j)}{|g'(x_j)|}$ où x_j sont les zéros de $g(x)$, mais pas de la dérivée $g'(x)$. Ainsi:

$$\delta\left(\cos\theta - \frac{m^*\omega}{kq}\right) = \sum_j \frac{\delta(\theta-\theta_j)}{|\sin(\theta_j)|}$$

où $\theta_j \equiv \arccos\left(\frac{m^*\omega}{kq}\right)$. Il est alors nécessaire d'avoir $\frac{m^*\omega}{kq} < 1$ pour avoir convergence de l'intégrale sur θ. Il existe donc deux valeurs différentes de θ_j (une positive et l'autre négative), mais elles conduisent toutes à la même valeur du rapport $\frac{\cos(\theta_j)}{|\sin(\theta_j)|}$. On peut donc ne considérer que la valeur positive, à condition de multiplier par 2 le résultat. Ainsi, le calcul de la partie imaginaire s'effectue comme suit:

$$\begin{aligned}
\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty dk\int_0^{2\pi} d\theta \frac{m^*}{k_F} k\delta(k-k_F)\frac{kq\cos\theta}{m^*}\delta\left(\frac{kq\cos\theta}{m^*}-\omega\right) \\
&= \frac{m^*}{2\pi k_F}\int_0^\infty kdk\delta(k-k_F)\int_0^{2\pi} d\theta\cos\theta\delta\left(\cos\theta-\frac{m^*\omega}{kq}\right) \\
&= \frac{m^*}{2\pi k_F}\int_0^\infty kdk\delta(k-k_F)2\int_0^{2\pi} d\theta\cos\theta\frac{\delta(\theta-\theta_j)}{|\sin\theta_j|} \\
&= \frac{m^*}{\pi k_F}\int_0^\infty kdk\frac{\delta(k-k_F)}{|\tan\theta_j|} \\
&= \frac{m^*}{\pi}\frac{1}{|\tan\theta_{j,k_F}|}
\end{aligned}$$

où $\theta_{j,k_F} \equiv \arccos\left(\frac{m^*\omega}{k_F q}\right)$. On peut réexprimer ce résultat sans faire appel aux fonctions trigonométriques de la façons suivante (en se rappelant que $n(\varepsilon_F) = \frac{m^*}{\pi}$):

$$\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega) = n(\varepsilon_F)\frac{\frac{m^*\omega}{k_F q}}{\sqrt{1-\left(\frac{m^*\omega}{k_F q}\right)^2}}$$

Contrairement à la partie réelle, la partie imaginaire présente donc une dépendance en q et en ω dans cette limite.

6.4 Vitesse du son et atténuation sonore

Dans cette sous-section, nous utiliserons les résultats obtenus pour quantifier les modifications à la vitesse du son et à l'atténuation sonore introduites par le couplage électron-phonon. D'après les équations (19), (20) et (21) ainsi que la définition de $\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)$, nous voyons que nous pouvons écrire:

$$Z = \mathcal{A} Z^0_{ph} Z^0_{el}\int \mathcal{D}\Phi \exp\left[\frac{2\beta}{\|g(\mathbf{q})\|^2}\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\left(\mathcal{D}^{o^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m)+\|g(\mathbf{q})\|^2\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)\right)\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi_{-\mathbf{q},-\omega_m}\right] \tag{25}$$

Le terme entre paranthèses correspond au nouveau propagateur de phonons, contenant la correction (au premier ordre non nul) provenant du couplage électron-phonon. Désignons ce nouveau propagateur par $\tilde{\mathcal{D}}(\mathbf{q},\omega_m)$. Nous avons alors que:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{D}}^{-1}(\mathbf{q},\omega_m) &= \frac{\omega_m^2+\omega_{\mathbf{q}}^2}{-2\omega_{\mathbf{q}}}+\|g(\mathbf{q})\|^2\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m) \\
&\longrightarrow_{prol.analyt.} \frac{-\omega^2+\omega_{\mathbf{q}}^2}{-2\omega_{\mathbf{q}}}+\|g(\mathbf{q})\|^2\left[\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega)+i\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega)\right] \\
&= \left[\frac{\omega^2-\omega_{\mathbf{q}}^2}{2\omega_{\mathbf{q}}}+\|g(\mathbf{q})\|^2\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega)\right]+i\left[\|g(\mathbf{q})\|^2\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega)\right]
\end{aligned}$$

La nouvelle vitesse du son est donnée par le premier terme, tandis que l'atténuation sonore est donnée par le second terme. Nous allons maintenant obtenir ces valeurs dans les deux cas limites que nous avons examinés précédemment.

6.4.1 Calcul à $\omega = 0$, $\mathbf{q} \to 0$ et $T \to 0$

Puisque $\chi^{0\prime\prime}(\mathbf{q},\omega) = 0$, il n'y a pas d'atténuation sonore provenant du couplage électron-phonon dans cette limite. Pour la vitesse du son, on a:

$$-\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2} + \|g(\mathbf{q})\|^2 n(\varepsilon_F) = \frac{-1}{2}\left[\omega_{\mathbf{q}} - 2\|g(\mathbf{q})\|^2 n(\varepsilon_F)\right] \equiv -\frac{\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}}{2}$$

Or nous avons que $\lim_{q\to 0}\omega_{\mathbf{q}} = \lim_{q\to 0} 2\sqrt{\frac{K}{M}}\sin\frac{qd}{2} \approx d\sqrt{\frac{K}{M}}q \Rightarrow v_s = d\sqrt{\frac{K}{M}}$ (car $\omega_q = v_s q$), où v_s est la vitesse du son. De plus, nous avons que (voir l'équation (4)):

$$\begin{aligned}
\lim_{q\to 0}\|g(\mathbf{q})\|^2 &= \lim_{q\to 0}\frac{16(t'd)^2}{2M\omega_{\mathbf{q}}}\cos^2\left(\frac{qd}{2}\right)\sin^2\left(\frac{qd}{2}\right) \\
&= \frac{8(t'd)^2}{Md\sqrt{\frac{K}{M}}q}\frac{q^2d^2}{4} \\
&= \frac{2t'^2d^3q}{\sqrt{MK}}
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que pour un réseau carré, $V = d^2\left[N - 2\sqrt{N} + 1\right]$, expression que nous avons simplifiée à $V = Nd^2$, valable dans la limite des grands N. Ainsi, la nouvelle vitesse du son sera donc:

$$\tilde{v}_s(q) = d\sqrt{\frac{K}{M}} - \frac{4t'^2d^3}{\sqrt{MK}}n(\varepsilon_F)$$

6.4.2 Calcul à faible ω et faible $\mathbf{q}$, $T \to 0$

Cette fois, nous avons une atténuation sonore provenant du couplage électron-phonon; elle est donnée par:

$$\Gamma(\mathbf{q},\omega) = \|g(\mathbf{q})\|^2 n(\varepsilon_F)\frac{\frac{m^*\omega}{k_F q}}{\sqrt{1 - \left(\frac{m^*\omega}{k_F q}\right)^2}}$$

Pour la nouvelle vitesse du son, il faut résoudre l'équation quadratique suivante:

$$\frac{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}}^2}{2\omega_{\mathbf{q}}} + \|g(\mathbf{q})\|^2\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega) = \frac{\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2}{2\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}}$$

avec $\chi^{0\prime}(\mathbf{q},\omega) = n(\varepsilon_F)$, ce qui donne:

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{q}} = \frac{\omega_{\mathbf{q}}^2 - \omega^2 - 2\omega_{\mathbf{q}} c}{2\omega_{\mathbf{q}}} + \frac{1}{2\omega_{\mathbf{q}}}\sqrt{\omega^4 + \omega_{\mathbf{q}}^4 + 4\omega_{\mathbf{q}}^2 c^2 + 2\omega^2\omega_{\mathbf{q}}^2 + 4\omega^2\omega_{\mathbf{q}} c - 4\omega_{\mathbf{q}}^3 c}$$

où $c \equiv \|g(\mathbf{q})\|^2 n(\varepsilon_F)$.

$\star$ On remarque que les corrections apportées augmentent avec $\|g(\mathbf{q})\|^2$. Cela est normal, car ce terme indique l'importance du couplage électron-phonon. On remarque également que ce dernier diminue la vitesse du son: une partie de l'énergie sonore passe du réseau aux électrons avant de revenir au réseau, d'où un ralentissement de la propagation des ondes sonores.

7 Ajout du terme supraconducteur et seconde transformation Hubbard-Stratonovich

Nous allons maintenant ajouter le terme supraconducteur et reprendre le traitement effectué précédemment. Seulement, nous aurons cette fois accès aux corrections provenant des fluctuations supraconductrices. Pour simplifier, nous supposerons que les paires de Cooper ont une symétrie de type s, comme dans les supraconducteurs conventionnels. Toutefois, comme c'est le cas avec les cuprates, une symétrie de type $d_{x^2-y^2}$ correspondrait davantage aux observations expérimentales. L'hamiltonien supraconducteur est alors:

$$H_{BCS} = -|\lambda| \sum_{\mathbf{q}} \Delta_{\mathbf{q}}^{\dagger} \Delta_{\mathbf{q}}$$

où $\Delta_{\mathbf{q}}^{\dagger} \equiv \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},-\sigma}^{\dagger}$, ce qui implique que $\Delta_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma c_{-\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}$. La présence de l'indice de spin σ devant les opérateurs de création et d'annihilation permet d'obtenir l'état singulet. Ainsi, on peut voir $\Delta_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ ($\Delta_{\mathbf{q}}$) comme l'opérateur créant (détruisant) une paire de Cooper dans l'état singulet et avec une quantité de mouvement nette $\mathbf{q}$. $|\lambda|$ est une constante de couplage entre les paires de Cooper et les phonons. L'origine exacte d'un tel couplage dans les organiques est aujourd'hui encore incertaine, mais il semble que le magnétisme soit impliqué. La fonction de partition (7) prend donc cette fois la forme suivante après l'intégration des phonons:

$$\begin{aligned} Z &= Tr\ e^{-\beta H_{el}^0}\ e^{-\beta H_{ph}^0}\ T_\tau\ e^{-\int_0^\beta [H_{ep}(\tau)+H_{BCS}(\tau)]d\tau} \\ &= Tr_{el}\ e^{-\beta H_{el}^0}\ Z_{ph}^0 \langle T_\tau e^{-\int_0^\beta [H_{ep}(\tau)+H_{BCS}(\tau)]d\tau} \rangle_{0,ph} \\ &= Z_{ph}^0 Tr_{el}\ e^{-\beta H_{el}^0} T_\tau\ \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \|g(\mathbf{q})\|^2 B_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau_1) B_{\mathbf{q}}(\tau_2) \mathcal{D}^0(\mathbf{q},\tau_1-\tau_2) \\ &+ |\lambda| \sum_{\mathbf{q}} \int_0^\beta d\tau \Delta_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) \Delta_{\mathbf{q}}(\tau) \Big) \end{aligned} \tag{26}$$

Passons à présent à une représentation "en fréquences" pour être en mesure d'effectuer une transformation d'Hubbard-Stratonovich. Nous savons déjà que:

$$\int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 B_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau_1) B_{\mathbf{q}}(\tau_2) \mathcal{D}^0(\mathbf{q},\tau_1-\tau_2) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} B_{\mathbf{q},\omega_m}^{\dagger} B_{\mathbf{q},\omega_m} \mathcal{D}^0(\mathbf{q},\omega_m)$$

tandis que pour les termes supraconducteurs, nous avons que:

$$\int_0^\beta d\tau \Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau)\Delta_{\mathbf{q}}(\tau) = \frac{1}{V}\int_0^\beta d\tau \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} \sigma\sigma' c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau) c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},-\sigma'}(\tau) c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau)$$
$$= \frac{1}{V\beta^2}\int_0^\beta d\tau \sum_{\dots}\sigma\sigma' \sum_{\omega_{n1},\omega_{n2},\omega_{n3},\omega_{n4}} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_{n1},\sigma} c^\dagger_{-\mathbf{k},\omega_{n2},-\sigma} c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\omega_{n3},-\sigma'} c_{\mathbf{k}',\omega_{n4},\sigma'}$$
$$\times e^{i\omega_{n1}\tau} e^{i\omega_{n2}\tau} e^{-i\omega_{n3}\tau} e^{-i\omega_{n4}\tau}$$
$$= \frac{1}{V\beta}\sum_{\dots}\sigma\sigma' \sum_{\omega_{n1},\omega_{n2},\omega_{n3},\omega_{n4}} \delta_{n1+n2-n3-n4,0} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_{n1},\sigma} c^\dagger_{-\mathbf{k},\omega_{n2},-\sigma} c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\omega_{n3},-\sigma'} c_{\mathbf{k}',\omega_{n4},\sigma'}$$
$$= \frac{1}{V\beta}\sum_{\dots}\sigma\sigma' \sum_{\omega_n,\omega_{n'},\omega_m} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_n+\omega_m,\sigma} c^\dagger_{-\mathbf{k},-\omega_n,-\sigma} c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},-\omega_{n'}+\omega_m,-\sigma'} c_{\mathbf{k}',\omega_{n'},\sigma'}$$
$$= \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_m} \Delta^\dagger_{\mathbf{q},\omega_m}\Delta_{\mathbf{q},\omega_m}$$

La fonction de partition (26) peut donc s'écrire:

$$Z = Z^0_{ph} Tr_{el} \;\; e^{-\beta H^0_{el}} \exp\left[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\mathbf{q},\omega_m} \|g(\mathbf{q})\|^2 B^\dagger_{\mathbf{q},\omega_m} B_{\mathbf{q},\omega_m} \mathcal{D}^0(\mathbf{q},\omega_m)\right]$$
$$\times \exp\left[\frac{|\lambda|}{\beta}\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\Delta^\dagger_{\mathbf{q},\omega_m}\Delta_{\mathbf{q},\omega_m}\right]$$

La première transformation d'Hubbard-Stratonovich donne (voir (17)):

$$Z = \mathcal{A} Z^0_{ph} Tr_{el} \;\; e^{-\beta H^0_{el}} \exp\left[\frac{|\lambda|}{\beta}\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\Delta^\dagger_{\mathbf{q},\omega_m}\Delta_{\mathbf{q},\omega_m}\right]$$
$$\times \int \mathcal{D}\Phi \exp\left[2\beta \sum_{\mathbf{q},\omega_m} \frac{\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}}{\|g(\mathbf{q})\|^2} \mathcal{D}^{0^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m) + 2\sum_{\mathbf{q},\omega_m} B_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}\right]$$

La seconde transformation d'Hubbard-Stratonovich sur la partie BCS est (on réintroduit la notation des bivecteurs et les sommes sont implicites sur les indices répétés):

$$\exp\left[\Delta^\dagger_{\tilde{q}}\frac{|\lambda|}{\beta}\Delta_{\tilde{q}}\right] = \frac{(\beta/|\lambda|)^{2\tilde{n}+1}}{(2i\pi)^{2\tilde{n}+1}} \int \prod_{\tilde{q}}^{2\tilde{n}+1} d\Psi_{\tilde{q}} d\Psi^*_{\tilde{q}} \exp\left[-\Psi^*_{\tilde{q}}\frac{\beta}{|\lambda|}\Psi_{\tilde{q}} + \Delta^\dagger_{\tilde{q}}\Psi_{\tilde{q}} + \Delta_{\tilde{q}}\Psi^*_{\tilde{q}}\right]$$

En posant $\mathcal{B} \equiv \left(\frac{\beta}{|\lambda| 2i\pi}\right)^{2\tilde{n}+1}$, on obtient la fonction de partition suivante:

$$Z = \mathcal{A}\mathcal{B} Z^0_{ph} Tr_{el} \;\; e^{-\beta H^0_{el}} \int \mathcal{D}\Phi \int \mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\Psi^* \exp\Bigg(\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\Big(2\beta\frac{\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}}{\|g(\mathbf{q})\|^2}\mathcal{D}^{0^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m) + 2B_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}$$
$$- \frac{\beta\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}}{|\lambda|} + \Delta^\dagger_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m} + \Delta_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m}\Big)\Bigg) \tag{27}$$

8 Transition supraconductrice et seconde correction au propagateur de phonons

Cette section est le coeur même de ce travail. Nous calculerons les deux premières corrections à la vitesse du son et à l'atténuation sonore amenées par la présence des paires de Cooper ainsi que la première correction apportée par le couplage entre ces dernières et les phonons. Pour ce faire, nous suivrons sensiblement la même démarche que dans la section 6, où nous avions calculé la correction provenant du couplage électron-phonon (terme d'ordre $\Phi\Phi^*$). Après avoir effectué un retour partiel à la représentation "temporelle", nous utiliserons encore l'approximation des cumulants pour trouver la correction d'ordre $\Psi\Psi^*$, que nous calculerons dans certains cas limites. Cela nous permettra de trouver une première valeur pour T_c, la température critique de transition vers l'état supraconducteur. Nous trouverons ensuite les corrections quartiques $\Psi\Psi\Psi^*\Psi^*$ et $\Psi\Psi^*\Phi\Phi^*$, la première nous permettant d'obtenir la fonctionnelle de Ginzburg-Landau.

8.1 Retour partiel à la représentation "temporelle"

Nous savons déjà que $2\sum_{\omega_m} B_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m} = 2\sqrt{\beta}\int_0^\beta d\tau B_{\mathbf{q}}(\tau)\Phi_{\mathbf{q}}(\tau)$. Avec les transformations de Fourier $\Psi_{\mathbf{q}}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_m e^{-i\omega_m\tau}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}$ et $\Psi_{\mathbf{q},\omega_m} = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_m\tau}\Psi_{\mathbf{q}}(\tau)$, nous avons pour les termes supraconducteurs:

$$\begin{aligned}
\sum_{\omega_m}\Delta^\dagger_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m} &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\omega_m}\sum_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma}\sigma c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\omega_n+\omega_m,\sigma}c^\dagger_{-\mathbf{k},-\omega_n,-\sigma}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\\
&= \frac{1}{\beta\sqrt{V}}\sum_{\omega_m}\sum_{\mathbf{k},\omega_n,\sigma}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\sigma c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau_1)c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_2)e^{-i(\omega_n+\omega_m)\tau_1}e^{-i(-\omega_n)\tau_2}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\\
&= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\omega_m}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int_0^\beta d\tau\sigma c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau)c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau)e^{-i\omega_m\tau}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\\
&= \sqrt{\frac{\beta}{V}}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\int_0^\beta d\tau\sigma c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau)c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau)\Psi_{\mathbf{q}}(\tau)\\
&= \sqrt{\beta}\int_0^\beta d\tau\Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau)\Psi_{\mathbf{q}}(\tau)
\end{aligned}$$

Semblablement, on a que $\sum_{\omega_m}\Delta_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m} = \sqrt{\beta}\int_0^\beta d\tau\Delta_{\mathbf{q}}(\tau)\Psi^*_{\mathbf{q}}(\tau)$, d'où:

$$\begin{aligned}
Z = \mathcal{A}\mathcal{B}Z^0_{ph}Tr_{el}\ \ e^{-\beta H^0_{el}}\ \ T_\tau\int\mathcal{D}\Phi\int\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\Psi^*\exp\Bigg(\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\Big(2\beta\frac{\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}}{\|g(\mathbf{q})\|^2}\mathcal{D}^{0^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m) - \frac{\beta\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}}{|\lambda|}\Big)\\
+\sqrt{\beta}\sum_{\mathbf{q}}\int_0^\beta d\tau\Big(2B_{\mathbf{q}}(\tau)\Phi^*_{\mathbf{q}}(\tau)+\Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau)\Psi_{\mathbf{q}}(\tau)+\Delta_{\mathbf{q}}(\tau)\Psi^*_{\mathbf{q}}(\tau)\Big)\Bigg)
\end{aligned} \tag{28}$$

8.2 Corrections d'ordre $\Phi\Phi^*$ et $\Psi\Psi^*$

Dans l'expression précédente, les deux premiers termes de l'exponentielle ne contiennent pas d'opérateurs agissant sur les états propres d'occupation électroniques. Il faut donc uniquement tenir compte des trois termes suivants pour le développement en cumulants. Encore une fois, il n'y a pas de contribution au premier ordre, car les opérateurs $B_{\mathbf{q}}(\tau)$, $\Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau)$ et $\Delta_{\mathbf{q}}(\tau)$ ne conservent pas pas le nombre d'électrons dans chaque état d'occupation. Au deuxième ordre, on a 3×3 termes; seuls le terme d'ordre $\Phi\Phi^*$ ainsi que les deux termes d'ordre $\Psi\Psi^*$ ont une contribution non nulle à la valeur moyenne. Nous savons déjà que $\sum_{\mathbf{q}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau B_{-\mathbf{q}}(\tau_1)B_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}\Phi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Phi^*_{\mathbf{q}}(\tau_2) = \sum_{\mathbf{q},\omega_m}\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}$, où nous avons calculé $\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)$ dans deux cas limites bien précis. Nous voulons maintenant calculer les termes $\langle T_\tau \Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Delta_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}$ et $\langle T_\tau \Delta_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}$, qui sont évidemment égaux. En arrêtant le développement en cumulants aux termes du second ordre, la fonction de partition (28) se récrit:

$$
\begin{aligned}
Z = \mathcal{A}\mathcal{B}Z^0_{ph}Z^0_{el}\ \ T_\tau \int \mathcal{D}\Phi \int \mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\Psi^* \exp\Bigg(\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\Big(2\beta\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m}\Big(\frac{\mathcal{D}^{0^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m)}{\|g(\mathbf{q})\|^2}+\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)\Big) - \frac{\beta\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}}{|\lambda|}\Big) \\
+\beta\sum_{\mathbf{q}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau \Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Delta_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}}(\tau_2)\Bigg)
\end{aligned}
\tag{29}
$$

8.3 Calcul de la "bulle" des paires de Cooper

Dans cette sous-section, nous ferons le calcul général de la susceptibilité de paires, qui en langage diagrammatique est une "bulle" particule-particule (les "particules" étant en fait des paires de Cooper dans notre cas). Comme auparavant, nous exprimerons la "bulle" particule-particule en terme de fonctions de Green à l'aide du théorème de Wick et du "linked cluster theorem" et nous effectuerons une somme sur les fréquences de Matsubara. Puisque pour une configuration donnée des spins nous n'avons qu'un seul diagramme connexe possible (par exemple la contraction (14)(23)), on a que:

$$
\begin{aligned}
\langle T_\tau \Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Delta_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el} &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'}\langle T_\tau \sigma\sigma' c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau_1)c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},-\sigma'}(\tau_2)c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau_2)\rangle_{0,el} \\
&= \frac{1}{V}\sum_{\dots}\sigma\sigma'\langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}',\sigma'}(\tau_2)\rangle_{0,el}\langle T_\tau c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},-\sigma'}(\tau_2)\rangle_{0,el}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}'} \\
&= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\sigma^2\langle T_\tau c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau_2)\rangle_{0,el}\langle T_\tau c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_2)\rangle_{0,el} \\
&= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_2-\tau_1)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},\tau_2-\tau_1) \\
&= \frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_2-\tau_1)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},\tau_2-\tau_1)
\end{aligned}
$$

Le diagramme de Feynman correspondant est le diagramme 2 (voir l'appendice II). Nous trouvons alors que:

$$
\begin{aligned}
&\beta\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \langle T_\tau \Delta^\dagger_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Delta_{\mathbf{q}}(\tau_2)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}}(\tau_2)\\
&=\frac{2\beta}{V}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\, \mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},\tau_2-\tau_1)\,\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},\tau_2-\tau_1)\Psi_{\mathbf{q}}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}}(\tau_2)\\
&=\frac{2\beta}{\beta^3 V}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\omega_{n1},\omega_{n2},\omega_{m1},\omega_{m2}}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_{n1})\,\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},i\omega_{n2})\Psi_{\mathbf{q},\omega_{m1}}\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_{m2}}\\
&\times e^{-i\omega_{n1}(\tau_2-\tau_1)}e^{-i\omega_{n2}(\tau_2-\tau_1)}e^{-i\omega_{m1}\tau_1}e^{i\omega_{m2}\tau_2}\\
&=\frac{2\beta}{\beta V}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\cdots}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_{n1})\,\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},i\omega_{n2})\Psi_{\mathbf{q},\omega_{m1}}\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_{m2}}\delta_{\omega_{m1}-\omega_{n1}-\omega_{n2},0}\delta_{\omega_{n1}+\omega_{n2}-\omega_{m2},0}\\
&=\frac{2\beta}{\beta V}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\omega_n,\omega_m}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_n+i\omega_m)\,\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-i\omega_n)\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m}
\end{aligned}
$$

Nous voulons calculer $\chi_{pp}(\mathbf{q},i\omega_m)\equiv\frac{2}{\beta V}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_n+i\omega_m)\,\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-i\omega_n)$; commençons par la somme sur les fréquences de Matsubara (voir (22)):

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_n+i\omega_m)\,\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-i\omega_n) &= \frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n+i\omega_m-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\cdot\frac{1}{-i\omega_n-\varepsilon_{-\mathbf{k}}}\\
&=\frac{1}{\beta}\frac{1}{i\omega_m-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{-\mathbf{k}}}\sum_{\omega_n}\left[\frac{1}{i\omega_n+i\omega_m-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}-\frac{1}{i\omega_n+\varepsilon_{-\mathbf{k}}}\right]\\
&=\frac{1}{i\omega_m-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{-\mathbf{k}}}\left[f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})-f(-\varepsilon_{-\mathbf{k}})\right]
\end{aligned}
$$

d'où:

$$
\chi_{pp}(\mathbf{q},i\omega_m)=\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})-f(-\varepsilon_{-\mathbf{k}})}{i\omega_m-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{-\mathbf{k}}}\ \ ;\ \ \chi_{pp}(\mathbf{q},\omega)=\lim_{\eta\to 0^+}\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})-f(-\varepsilon_{-\mathbf{k}})}{\omega+i\eta-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{-\mathbf{k}}}
$$

Notons qu'en vertu de la symétrie d'inversion, nous avons que $\varepsilon_{\mathbf{k}}=\varepsilon_{-\mathbf{k}}$, peu importe la forme exacte de la surface de Fermi.

8.3.1 Calcul à $\omega = 0$, $\mathbf{q} = 0$, $T \to 0$

C'est à $\omega = 0$ et $\mathbf{q} = 0$ que la susceptibilité de paires sera maximale, car cette limite correspond à une quantité de mouvement nulle pour les paires de Cooper, donc à une énergie minimale. Ce sont alors les paires de Cooper respectant cette condition qui "condenseront" les premières et effectueront la transition vers l'état supraconducteur; c'est pourquoi le calcul dans cette limite est important. On trouve:

$$
\begin{aligned}
\chi_{pp}(\mathbf{q}=0,\omega=0) &= -\frac{2}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}})-f(-\varepsilon_{-\mathbf{k}})}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \\
&-\frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\frac{d^2\mathbf{k}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}\left[\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}+1}-\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}+1}\right] \\
&= -\frac{\pi}{2\pi^2}\int k\frac{dk}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}\left[\frac{1}{e^{\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}}\left(e^{\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}}+e^{-\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}}\right)}-\frac{1}{e^{-\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}}\left(e^{-\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}}+e^{\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}}\right)}\right] \\
&= -\frac{1}{2\pi}\int k\frac{d\varepsilon}{\varepsilon_{\mathbf{k}}}\frac{dk}{d\varepsilon}\left[-\tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}\int k\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}\frac{m^*}{k}\tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right) \\
&= \frac{n(\varepsilon_F)}{2}\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\tanh\left(\frac{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right)\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}
\end{aligned}
$$

Normalement, on s'attendrait à ce que les bornes inférieure et supérieure de l'intégrale précédente soit $\pm\infty$. La présence d'une énergie de coupure provient de la physique même. En effet, les électrons qui se regroupent en paires de Cooper sont près de la surface de Fermi, au plus à une "distance" ω_D de cette dernière, où ω_D est la fréquence de Debye du réseau cristallin et représente donc l'énergie maximale des phonons intervenant dans le processus de formation des paires de Cooper. Cette coupure devrait normalement être présente dans l'hamiltonien H_{BCS}. En fait, nous n'en tenons explicitement compte que lors de l'évaluation précise d'une expression, comme dans le cas présent. Nous trouvons alors que:

$$
\begin{aligned}
\chi_{pp}(\mathbf{q}=0,\omega=0) &= n(\varepsilon_F)\int_0^{\frac{\beta\omega_D}{2}}\tanh(x)\frac{dx}{x} \\
&= n(\varepsilon_F)\left[\ln(x)\tanh(x)|_0^{\frac{\beta\omega_D}{2}}-\int_0^{\frac{\beta\omega_D}{2}}\frac{\ln(x)}{\cosh^2(x)}dx\right] \\
&\approx n(\varepsilon_F)\left[\ln(\frac{\beta\omega_D}{2})-\int_0^{\infty}\frac{\ln(x)}{\cosh^2(x)}dx\right]
\end{aligned}
$$

où nous avons utilisé le fait que $\frac{\beta\omega_D}{2}\gg 1$. L'intégrale définie dans la dernière expression a pour valeur $-\ln\left[\frac{4e^{\gamma}}{\pi}\right]$, où $\gamma\approx 0.57722$ est la constante d'Euler. Nous trouvons donc que:

$$
\begin{aligned}
\chi_{pp}(\mathbf{q}=0,\omega=0) &= n(\varepsilon_F)\left[\ln\left(\frac{\beta\omega_D}{2}\frac{4e^{\gamma}}{\pi}\right)\right] \\
&= n(\varepsilon_F)\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)
\end{aligned}
\tag{30}
$$

8.3.2 Calcul à $\omega=0$, $\mathbf{q}\to 0$ et $T\to 0$

Pour ce calcul, nous effectuerons la somme sur les vecteurs d'onde avant celle sur les fréquences de Matsubara. Retournons donc légèrement en arrière, à la formule $\chi_{pp}(\mathbf{q},i\omega_m)\equiv\frac{2}{\beta V}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q},i\omega_n+i\omega_m)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-i\omega_n)$.

Dans le cas $i\omega_m = 0$, cette expression devient:

$$\chi_{pp}(\mathbf{q}, i\omega_m = 0) = \frac{2}{V\beta} \sum_{\mathbf{k},\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \cdot \frac{1}{-i\omega_n - \varepsilon_{-\mathbf{k}}}$$
$$= -\frac{2}{V\beta} \sum_{\mathbf{k},\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}} \cdot \frac{1}{i\omega_n + \varepsilon_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}}$$

Or, $\varepsilon_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{kq\cos\theta}{2m^*} + O(q^2)$ et comme $\mathbf{q}$ est faible, on pose que $\frac{kq\cos\theta}{2m^*} \approx \frac{k_F q}{2m^*}$, d'où:

$$\chi_{pp}(\mathbf{q} \to 0, i\omega_m = 0) = -\frac{2}{V\beta} \sum_{\mathbf{k},\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{k_F q}{2m^*}} \cdot \frac{1}{i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{k_F q}{2m^*}}$$
$$= -\frac{2}{V\beta(\pi T)^2} \sum_{\mathbf{k},n} \frac{1}{i(2n+1) - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}} \cdot \frac{1}{i(2n+1) + \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}}$$
$$= -\frac{2}{\pi} \sum_n \int_{-\frac{\omega_D}{\pi T}}^{\frac{\omega_D}{\pi T}} \frac{n(\varepsilon_F)}{2} d\tilde{\varepsilon} \frac{1}{i(2n+1) - \tilde{\varepsilon} - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}} \cdot \frac{1}{i(2n+1) + \tilde{\varepsilon} - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}}$$

où $\tilde{\varepsilon} \equiv \frac{\varepsilon}{\pi T}$. Le premier terme de l'expression précédente possède des pôles en $\tilde{\varepsilon} = i(2n+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}$, tandis que le second terme en possède en $\tilde{\varepsilon} = -i(2n+1) + \frac{k_F q}{2\pi m^* T}$. Le contour que nous choisissons dans le plan complexe suit l'axe réel, puis effectue un demi-cercle dans le demi-plan supérieur (sens antihoraire). En prenant q positif, les pôles du premier terme qui seront contenus dans le contour sont ceux pour lesquels $n \geqslant 0$, tandis que pour le second terme, ce seront ceux pour lesquels $n < 0$. En utilisant le théorème des résidus, on trouve donc que:

$$\begin{aligned}\chi_{pp}(\mathbf{q} \to 0, \omega = 0) &= -\frac{n(\varepsilon_F)}{\pi} \sum_{n \geqslant 0} \frac{2\pi i(-1)}{2\left[i(2n+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}\right]} - \frac{n(\varepsilon_F)}{\pi} \sum_{n<0} \frac{2\pi i}{2\left[i(2n+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}\right]} \\ &= i n(\varepsilon_F) \left(\sum_{n \geqslant 0} \frac{1}{i(2n+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}} - \sum_{n'>0} \frac{1}{i(-2n'+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}} \right) \\ &= i n(\varepsilon_F) \sum_{n \geqslant 0} \left[\frac{1}{i(2n+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}} - \frac{1}{-i(2n+1) - \frac{k_F q}{2\pi m^* T}} \right] \\ &= \frac{n(\varepsilon_F)}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{n + \frac{1}{2} + i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}} + \frac{1}{n + \frac{1}{2} - i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}} \right]\end{aligned} \tag{31}$$

Or, pour la fonction digamma définie par $\psi(x) \equiv \frac{d\ln\Gamma(x)}{dx}$ où $\Gamma(x)$ est la fonction gamma d'Euler, nous avons le développement suivant (formule de Weierstrass):

$$\psi(z) = -\gamma + \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{n+1} - \frac{1}{z+n} \right)$$

Cependant, la véritable borne des sommes n'est pas l'infini, car les véritables bornes de l'intégrale dans le plan complexe n'étaient pas non plus l'infini. Nous continuerons tout de même à employer cette notation, mais en gardant à l'esprit que ces sommes portent sur un nombre fini de termes. En fait, nous savons que pour $q = 0$, nous avons que $\chi_{pp} = n(\varepsilon_F)\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)$. D'après l'équation précédente ainsi que la dernière équation de (31), nous voyons donc que $\sum_n \frac{1}{n+\frac{1}{2}} = \ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)$. Ainsi, nous avons que:

$$\begin{aligned}
\chi_{pp}(\mathbf{q}\to 0,\omega=0) &= \frac{n(\varepsilon_F)}{2}\left[-\gamma-\psi\left(\frac{1}{2}+i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)-\gamma-\psi\left(\frac{1}{2}-i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)+2\sum_n\frac{1}{n+1}\right] \\
&= \frac{n(\varepsilon_F)}{2}\left[-2\gamma-\psi\left(\frac{1}{2}+i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}-i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)+2\left(\gamma+\psi\left(\frac{1}{2}\right)+\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)\right)\right] \\
&= n(\varepsilon_F)\left[\psi\left(\frac{1}{2}\right)+\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)-\frac{1}{2}\left(\psi\left(\frac{1}{2}+i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)+\psi\left(\frac{1}{2}-i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)\right)\right]
\end{aligned}$$

En utilisant l'identité $\psi^{(n)}\left(\frac{1}{2}\right) = (-1)^{n+1}n!(2^{n+1}-1)\zeta(n+1)$ où ζ est la fonction zeta de Riemann, on a les développements de Taylor suivants:

$$\begin{aligned}
\psi\left(\frac{1}{2}-i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right) &\approx \psi\left(\frac{1}{2}\right)+(2^2-1)\zeta(2)\left(-i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)+\frac{1}{2!}(-1)2!(2^3-1)\zeta(3)\left(-i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)^2 \\
\psi\left(\frac{1}{2}+i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right) &\approx \psi\left(\frac{1}{2}\right)+(2^2-1)\zeta(2)\left(i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)+\frac{1}{2!}(-1)2!(2^3-1)\zeta(3)\left(i\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)^2
\end{aligned}$$

ce qui donne:

$$\begin{aligned}
\chi_{pp}(\mathbf{q}\to 0,\omega=0) &= n(\varepsilon_F)\left[\psi\left(\frac{1}{2}\right)+\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}\right)-7\zeta(3)\left(\frac{k_F q}{4\pi m^* T}\right)^2\right] \\
&= n(\varepsilon_F)\left[\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)-\frac{7}{16}\frac{\zeta(3)k_F^2}{\pi^2 m^{*2}T^2}q^2\right]
\end{aligned}$$

où $\zeta(3)\approx 1.20206$.

8.4 Première estimation de la température critique de transition

Dans cette sous-section, nous allons obtenir une première estimation de la température T_c de transition vers l'état supraconducteur. De par les propriétés des intégrales gaussiennes, nous savons que la susceptibilité de paires (la fonction de réponse en "champs" Hubbard-Stratonovich $\mathbf{\Psi}$ et $\mathbf{\Psi}^*$ nuls) sera infinie lorsque l'argument de l'exponentielle contenant les "champs" $\mathbf{\Psi}$ et $\mathbf{\Psi}^*$ sera nul. Or, une susceptibilité de paires de Cooper infinie signifie une transition de phase vers l'état supraconducteur, car le système est "infiniment instable" en regard de la formation de paires de Cooper. La correction d'ordre $\mathbf{\Psi}\mathbf{\Psi}^*$ nous permet donc d'avoir un premier estimé de la température de transition T_c. À l'ordre $\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^*$ et $\mathbf{\Psi}\mathbf{\Psi}^*$, la fonction de partition (29) devient:

$$\begin{aligned}
Z = \mathcal{A}\mathcal{B}Z_{ph}^0 Z_{el}^0 \int\mathcal{D}\mathbf{\Phi}\int\mathcal{D}\mathbf{\Psi}\mathcal{D}\mathbf{\Psi}^*\exp\Bigg(&\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\frac{2\beta}{\|g(\mathbf{q})\|^2}\left(\mathcal{D}^{0^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m)+\|g(\mathbf{q})\|^2\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)\right)\mathbf{\Phi}_{\mathbf{q},\omega_m}\mathbf{\Phi}^*_{\mathbf{q},\omega_m} \\
&-\sum_{\mathbf{q},\omega_m}\beta\left(\frac{1}{|\lambda|}-\chi_{pp}(\mathbf{q},i\omega_m)\right)\mathbf{\Psi}_{\mathbf{q},\omega_m}\mathbf{\Psi}^*_{\mathbf{q},\omega_m}\Bigg)
\end{aligned} \tag{32}$$

La condition pour déterminer la température de transition est donc $\frac{1}{|\lambda|} - \chi_{pp}(\mathbf{q}, i\omega_m) = 0$. Il suffit de considérer le cas $\omega = 0$ et $q = 0$, car, comme nous l'avons expliqué, ce sont ces paires de Cooper qui effectueront en premier la transition vers l'état supraconducteur. D'après le résultat (30), nous voyons alors que:

$$T_c = 1.13\omega_D \exp\left(-\frac{1}{|\lambda| n(\varepsilon_F)}\right)$$

8.5 Correction d'ordre $\Psi\Psi\Psi^*\Psi^*$

Les corrections suivantes apparaissent à l'ordre quatre, car tous les termes d'ordre trois provenant du développement en cumulants sont nuls (pour la même raison que les termes d'ordre un). Les corrections non nulles seront celles d'ordre $\Phi\Phi\Phi^*\Phi^*$, $\Psi\Psi\Psi^*\Psi^*$ ainsi que le terme croisé $\Phi\Phi^*\Psi\Psi^*$. Dans cette sous-section, nous exprimerons le terme d'ordre $\Psi\Psi\Psi^*\Psi^*$ et nous le calculerons explicitement pour un cas particulier, qui correspond à l'*approximation locale*. Le terme d'ordre $\Phi\Phi\Phi^*\Phi^*$ ne sera pas traité dans ce travail, tandis que celui d'ordre $\Phi\Phi^*\Psi\Psi^*$ le sera dans la sous-section suivante.

Pour le terme $\Psi\Psi\Psi^*\Psi^*$, le théorème des cumulants nous donne $\frac{3!}{4!}\beta^2 \sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4} \int_0^\beta \int_0^\beta \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4$ $\langle \Delta^\dagger_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Delta^\dagger_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Delta_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Delta_{\mathbf{q}_4}(\tau_4)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Psi^*_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Psi^*_{\mathbf{q}_4}(\tau_4)$, le 3! venant du nombre de termes identiques. Pour une configuration donnée des spins, il existe deux diagrammes connexes équivalents (par exemple les contractions $(18)(26)(35)(47)$ et $(15)(27)(38)(46)$), qui imposent les conditions $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_4 = \sigma$; $\sigma_3 = -\sigma$ et $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4$ (conservation de l'impulsion). Ainsi, à l'aide du théorème de Wick et du "linked cluster theorem", le terme précédent donne:

$$\begin{aligned}
&\frac{\beta^2}{4V^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\tau_1 \ldots d\tau_4 \sum_{\{\mathbf{k}\},\{\sigma\}} \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4 \langle c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{-\mathbf{k}_1,-\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2,\sigma_2}(\tau_2)c^\dagger_{-\mathbf{k}_2,-\sigma_2}(\tau_2)\\
&\times c_{-\mathbf{k}_3+\mathbf{q}_3,-\sigma_3}(\tau_3)c_{\mathbf{k}_3,\sigma_3}(\tau_3)c_{-\mathbf{k}_4+\mathbf{q}_4,-\sigma_4}(\tau_4)c_{\mathbf{k}_4,\sigma_4}(\tau_4)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Psi^*_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Psi^*_{\mathbf{q}_4}(\tau_4)\\
&= \frac{2\beta^2}{4V^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\tau_1 \ldots d\tau_4 \sum_{\{\mathbf{k}\},\{\sigma\}} \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4 \langle c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,\sigma_1}(\tau_1)c_{\mathbf{k}_4,\sigma_4}(\tau_4)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k}_1,-\sigma_1}(\tau_1)c_{\mathbf{k}_3,\sigma_3}(\tau_3)\rangle_{0,el}\\
&\times \langle c^\dagger_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2,\sigma_2}(\tau_2)c_{-\mathbf{k}_3+\mathbf{q}_3,-\sigma_3}(\tau_3)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k}_2,-\sigma_2}(\tau_2)c_{-\mathbf{k}_4+\mathbf{q}_4,-\sigma_4}(\tau_4)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Psi^*_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Psi^*_{\mathbf{q}_4}(\tau_4)\\
&\times \delta_{\sigma_1,\sigma_4}\delta_{\sigma_1,-\sigma_3}\delta_{\sigma_2,-\sigma_3}\delta_{\sigma_2,\sigma_4}\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,\mathbf{k}_4}\delta_{-\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_3}\delta_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2,-\mathbf{k}_3+\mathbf{q}_3}\delta_{-\mathbf{k}_2,-\mathbf{k}_4+\mathbf{q}_4}\\
&= -\frac{\beta^2}{2V^2}\sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3}\int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\tau_1 \ldots d\tau_4 \sum_{\mathbf{k},\sigma}\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_3)\rangle_{0,el}\\
&\times \langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_2)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_3)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,-\sigma}(\tau_2)c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,-\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Psi^*_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Psi^*_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3}(\tau_4)\\
&= -\frac{\beta^2}{2V^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\int_0^\beta \ldots \int_0^\beta d\tau_1 \ldots d\tau_4 \sum_{\mathbf{k},\sigma}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\tau_4-\tau_1)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},\tau_3-\tau_1)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_3,\tau_3-\tau_2)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,\tau_4-\tau_2)\\
&\times \Psi_{\mathbf{q1}}(\tau_1)\Psi_{\mathbf{q2}}(\tau_2)\Psi^*_{\mathbf{q3}}(\tau_3)\Psi^*_{\mathbf{q1+q2-q3}}(\tau_4)
\end{aligned}$$

Le diagramme de Feynman correspondant est le diagramme 3 (voir l'appendice II). Nous pouvons effectuer la transformation de Fourier habituelle pour retourner à une représentation en "fréquences" et obtenir pour cette expression (la somme sur les spins faisant disparaître le facteur $1/2$):

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\beta^2}{V^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\sum_{\omega_{m1},\omega_{m2},\omega_{m3}}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\frac{1}{\beta^2}\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\omega_n+\omega_{m1})\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-\omega_n)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_3,\omega_n+\omega_{m3}) \\
&\times\mathcal{G}^0(-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,-\omega_n+\omega_{m2}-\omega_{m3})\Psi_{\mathbf{q}_1,\omega_{m1}}\Psi_{\mathbf{q}_2,\omega_{m2}}\Psi^*_{\mathbf{q}_3,\omega_{m3}}\Psi^*_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,\omega_{m1}+\omega_{m2}-\omega_{m3}}
\end{aligned}
\tag{33}
$$

car nous avons la condition $\omega_{m1}+\omega_{m2}=\omega_{m3}+\omega_{m4}$. Les sommes sur $\mathbf{k}$ et sur ω_n des différentes fonctions de Green sont très difficiles à calculer dans le cas général. C'est pourquoi nous allons recourir à l'approximation locale, qui consiste à supposer que $\mathbf{q}_i=\omega_{mi}=0\ \ \forall i$, c'est-à-dire que l'interaction entre les paires de Cooper est locale et instantanée. Nous avons alors que:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\beta V}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\mathcal{G}^{0^2}(\mathbf{k},\omega_n)\mathcal{G}^{0^2}(-\mathbf{k},-\omega_n) &= \frac{1}{\beta V}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\frac{1}{[i\omega_n-\varepsilon_{\mathbf{k}}]^2}\cdot\frac{1}{[-i\omega_n-\varepsilon_{-\mathbf{k}}]^2} \\
&= \frac{1}{\beta V(\pi T)^4}\sum_{\mathbf{k},n}\frac{1}{[i(2n+1)-\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}]^2}\cdot\frac{1}{[i(2n+1)+\tilde{\varepsilon}_{-\mathbf{k}}]^2} \\
&= \frac{1}{\beta(\pi T)^3}\int_{-\frac{\omega_D}{\pi T}}^{\frac{\omega_D}{\pi T}}\frac{n(\varepsilon_F)}{2}d\tilde{\varepsilon}\frac{1}{[i(2n+1)-\tilde{\varepsilon}]^2}\cdot\frac{1}{[i(2n+1)+\tilde{\varepsilon}]^2} \\
&\approx \frac{n(\varepsilon_F)}{2\pi(\pi T)^2}\int_{-\infty}^{\infty}d\tilde{\varepsilon}\frac{1}{[i(2n+1)-\tilde{\varepsilon}]^2}\cdot\frac{1}{[i(2n+1)+\tilde{\varepsilon}]^2}
\end{aligned}
$$

Le premier terme possède des pôles doubles en $\tilde{\varepsilon}=i(2n+1)$, tandis que le second en possède en $\tilde{\varepsilon}=-i(2n+1)$. En prenant comme contour un demi-cercle dans la partie supérieure du plan complexe, le théorème des résidus donne pour l'expression précédente:

$$
\begin{aligned}
&\frac{n(\varepsilon_F)}{2\pi(\pi T)^2}\left[\sum_{n\geqslant 0}\frac{2\pi i(-2)}{[2i(2n+1)]^3}+\sum_{n<0}\frac{2\pi i(2)}{[2i(2n+1)]^3}\right] \\
&= \frac{n(\varepsilon_F)}{2\pi(\pi T)^2}\frac{\pi}{2}\left[\sum_{n\geqslant 0}\frac{1}{(2n+1)^3}-\sum_{n'>0}\frac{1}{(-2n'+1)^3}\right] \\
&= \frac{n(\varepsilon_F)}{32(\pi T)^2}\sum_{n\geqslant 0}\left[\frac{1}{(n+\frac{1}{2})^3}-\frac{1}{(-n-\frac{1}{2})^3}\right] \\
&= \frac{n(\varepsilon_F)}{(4\pi T)^2}\sum_{n\geqslant 0}\frac{1}{(n+\frac{1}{2})^3}
\end{aligned}
$$

En utilisant le développement en série de la fonction polygamma d'ordre k: $\psi^{(k)}(z)=(-1)^{k+1}k!\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+z)^{k+1}}$, on trouve que $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+\frac{1}{2})^3}=-\frac{\psi^{(2)}(1/2)}{2}$. Or, nous avons déjà mentionné qu'il existe entre la fonction polygamma et la fonction zeta de Riemann la relation $\psi^{(k)}(1/2)=(-1)^{k+1}k!(2^{k+1}-1)\zeta(k+1)$, ce qui fait que $\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+\frac{1}{2})^3}=7\zeta(3)$. L'expression (33) devient donc, dans le cadre de l'approximation locale:

$$
-\frac{\beta}{V}\frac{7\zeta(3)n(\varepsilon_F)}{(4\pi T)^2}\Psi^2_{\mathbf{q}=0,\omega_m=0}\Psi^{*^2}_{\mathbf{q}=0,\omega_m=0}
$$

Avec les corrections d'ordre $\Phi\Phi^*$, $\Psi\Psi^*$ et $\Psi\Psi\Psi^*\Psi^*$ (et dans le cadre de l'approximation locale pour ce dernier terme), la fonction de partition s'écrit alors:

$$\begin{aligned} Z = \mathcal{A}\mathcal{B}Z^0_{ph}Z^0_{el}\int \mathcal{D}\Phi \int \mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\Psi^* \exp\Bigg(&\sum_{\mathbf{q},\omega_m} \frac{2\beta}{\|g(\mathbf{q})\|^2}\left[\mathcal{D}^{0^{-1}}(\mathbf{q},\omega_m) + \|g(\mathbf{q})\|^2\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)\right]\Phi_{\mathbf{q},\omega_m}\Phi^*_{\mathbf{q},\omega_m} \\ &- \sum_{\mathbf{q},\omega_m}\beta\left[\frac{1}{|\lambda|} - \chi_{pp}(\mathbf{q},i\omega_m)\right]\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\Psi^*_{\mathbf{q},\omega_m} - \frac{\beta}{V}\frac{7\zeta(3)n(\varepsilon_F)}{(4\pi T)^2}\|\Psi_{\mathbf{q}=0,\omega_m=0}\|^4\Bigg) \end{aligned} \tag{34}$$

où nous avons calculé $\chi^0(\mathbf{q},i\omega_m)$ ainsi que $\chi_{pp}(\mathbf{q},i\omega_m)$ dans deux cas limites bien précis.

8.6 Fonctionnelle Ginzburg-Landau statique

L'expression (34) de la fonction de partition nous permet d'obtenir la fonctionnelle de Ginzburg-Landau pour la partie supraconductrice, du moins dans la limite statique et à faible $\mathbf{q}$ (grandes longueurs d'onde pour les vibrations sonores). Cette fonctionnelle d'énergie libre est telle que $Z_{supra} = \int \mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\Psi^* e^{-\beta\mathcal{F}_{GL}}$, le développement en termes des "champs" Ψ et Ψ^* s'arrêtant à l'ordre 4 dans la fonctionnelle. Dans l'espace réciproque de Fourier-Matsubara et dans le cas statique ($\omega = 0$) et la limite locale pour le terme d'ordre 4, nous avons pour cette fonctionnelle:

$$\mathcal{F}_{GL} = \sum_{\mathbf{q},\omega_m=0}\left(r(T) + c(T)q^2\right)\|\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\|^2 + \sum_{\mathbf{q}=0,\omega_m=0} b(T)\|\Psi_{\mathbf{q},\omega_m}\|^4$$

où $r(T) = \frac{1}{|\lambda|} - n(\varepsilon_F)\ln\left(\frac{1.13\omega_D}{T}\right)$; $c(T) = \frac{7\zeta(3)k_F^2}{(4\pi m^* T)^2}n(\varepsilon_F)$; $b(T) = \frac{7\zeta(3)n(\varepsilon_F)}{(4\pi T)^2}$. Dans l'espace réel et en utilisant l'instantanéité des interactions ($\Psi(r,\tau) \rightarrow \Psi(r)$), on obtient plutôt:

$$\mathcal{F}_{GL} = \beta V \int d^2r \left[r(T)\|\Psi(r)\|^2 + c(T)\|\nabla\Psi(r)\|^2 + \beta V b(T)\|\Psi(r)\|^4\right]$$

où nous avons utilisé le fait que:

$$\begin{aligned} &\sum_{\mathbf{q}}\int\int d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 q^2 e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\Psi(\mathbf{r}_1)\Psi^*(\mathbf{r}_2) \\ &= \sum_{\mathbf{q}}\int\int d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 \Psi(\mathbf{r}_1)\Psi^*(\mathbf{r}_2)\left(\hat{\mathbf{r}}_2\cdot\nabla_{\mathbf{r}_2}\left(\hat{\mathbf{r}}_1\cdot\nabla_{\mathbf{r}_1}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\right)\right) \\ &= \sum_{\mathbf{q}}\int d^2\mathbf{r}_1 \Psi(\mathbf{r}_1)\Psi^*(\mathbf{r}_2)\left(\hat{\mathbf{r}}_1\cdot\nabla_{\mathbf{r}_1}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\right)|_{\Omega_2} - \sum_{\mathbf{q}}\int\int d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 \Psi(\mathbf{r}_1)\left(\hat{\mathbf{r}}_1\cdot\nabla_{\mathbf{r}_1}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\right)\left(\hat{\mathbf{r}}_2\cdot\nabla_{\mathbf{r}_2}\Psi^*(\mathbf{r}_2)\right) \\ &= -\sum_{\mathbf{q}}\int d^2\mathbf{r}_2 \Psi(\mathbf{r}_1)e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\left(\hat{\mathbf{r}}_2\cdot\nabla_{\mathbf{r}_2}\Psi^*(\mathbf{r}_2)\right)|_{\Omega_1} + \sum_{\mathbf{q}}\int\int d^2\mathbf{r}_1 d^2\mathbf{r}_2 e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\left(\hat{\mathbf{r}}_1\cdot\nabla_{\mathbf{r}_1}\Psi(\mathbf{r}_1)\right)\left(\hat{\mathbf{r}}_2\cdot\nabla_{\mathbf{r}_2}\Psi^*(\mathbf{r}_2)\right) \\ &= V\int d^2\mathbf{r}\|\nabla\Psi(\mathbf{r})\|^2 \end{aligned}$$

les autres termes étant nuls étant donné les conditions aux limites périodiques (Ω_1 et Ω_2 sont les domaines d'intégration des variables $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$).

8.7 Correction d'ordre $\Psi\Psi^*\Phi\Phi^*$

Le terme d'ordre $\Psi\Psi^*\Phi\Phi^*$ représente la première correction amenée par les fluctuations supraconductrices à la vitesse du son et à l'atténuation sonore. Dans cette sous-section, nous obtiendrons l'expression générale de ce terme, mais nous n'en ferons aucun calcul explicite. En retournant à l'expression (28) pour la fonction de partition, nous voyons que le terme d'ordre $\Psi\Psi^*\Phi\Phi^*$ est donné par (le facteur 12 vient du nombre de termes identiques et le facteur 4 provient du 2 se trouvant devant l'opérateur $B_{\mathbf{q}}(\tau)$):

$$\begin{aligned}
&\frac{12}{4!}4\beta^2\sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3,\mathbf{q}_4}\int_0^\beta\int_0^\beta\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 \langle\Delta^\dagger_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Delta_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)B_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)B_{\mathbf{q}_4}(\tau_4)\rangle_{0,el}\\
&\times\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Phi_{-\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Phi_{-\mathbf{q}_4}(\tau_4)\\
&=\frac{2\beta^2}{V^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\int_0^\beta\int_0^\beta\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4\sum_{\{\mathbf{k}\},\{\sigma\}}\sigma_1\sigma_2\langle c^\dagger_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1,\sigma_1}(\tau_1)c^\dagger_{-\mathbf{k}_1,-\sigma_1}(\tau_1)c_{-\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2,-\sigma_2}(\tau_2)c_{\mathbf{k}_2,\sigma_2}(\tau_2)\\
&\times c^\dagger_{\mathbf{k}_3+\mathbf{q}_3,\sigma_3}(\tau_3)c_{\mathbf{k}_3,\sigma_3}(\tau_3)c^\dagger_{\mathbf{k}_4-\mathbf{q}_4,\sigma_4}(\tau_4)c_{\mathbf{k}_4,\sigma_4}(\tau_4)\rangle_{0,el}\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Phi_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Phi^*_{\mathbf{q}_4}(\tau_4)
\end{aligned}$$

Il existe deux configurations de spins pour lesquelles on peut avoir des valeurs moyennes non nulles, soient 6 $\uparrow$ et 2 $\downarrow$ (ou inversement) ainsi que 4 $\uparrow$ et 4 $\downarrow$. Dans le premier cas, nous avons deux diagrammes connexes correspondants, par exemple, aux contractions (16)(24)(37)(58) et (18)(24)(35)(67), tandis que dans le second cas, nous avons un diagramme connexe, correspondant, par exemple, à la contraction (16)(28)(35)(47) (voir les diagrammes de Feynman 4, 5 et 6 de l'appendice II). Le terme d'ordre $\Psi\Psi^*\Phi\Phi^*$ est donc:

$$\begin{aligned}
&\frac{2\beta^2}{V^2}\sum_{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3}\int_0^\beta\int_0^\beta\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4\sum_{\mathbf{k},\sigma}\Bigg(+1\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_2)\rangle_{0,el}\\
&\times\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,\sigma}(\tau_2)c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,\sigma}(\tau_3)\rangle_{0,el}\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_3)c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\\
&-1\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_3)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_2)\rangle_{0,el}\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,\sigma}(\tau_2)c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_3)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\\
&+1\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_1)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\sigma}(\tau_3)\rangle_{0,el}\langle c^\dagger_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_1)c_{-\mathbf{k},-\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_2)c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\sigma}(\tau_3)\rangle_{0,el}\\
&\times\langle c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,-\sigma}(\tau_2)c^\dagger_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,-\sigma}(\tau_4)\rangle_{0,el}\Bigg)\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Phi_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Phi_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3-\mathbf{q}_2}(\tau_4)\\
&=\frac{4\beta^2}{V^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\int_0^\beta\ldots\int_0^\beta d\tau_1\ldots d\tau_4\sum_{\mathbf{k}}\Bigg(2\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\tau_3-\tau_1)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},\tau_2-\tau_1)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,\tau_2-\tau_4)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\tau_4-\tau_3)\\
&+\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\tau_3-\tau_1)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},\tau_4-\tau_1)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\tau_2-\tau_3)\mathcal{G}^0(-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,\tau_2-\tau_4)\Bigg)\\
&\times\Psi_{\mathbf{q}_1}(\tau_1)\Psi^*_{\mathbf{q}_2}(\tau_2)\Phi_{\mathbf{q}_3}(\tau_3)\Phi_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3-\mathbf{q}_2}(\tau_4)
\end{aligned}$$

car nous avons $\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3=\mathbf{q}_2+\mathbf{q}_4$. En passant à une représentation en "fréquences", nous avons plutôt:

$$\frac{4\beta^2}{V^2\beta^2}\sum_{\{\mathbf{q}\}}\sum_{\omega_{m1},\omega_{m2},\omega_{m3}}\sum_{\mathbf{k},\omega_n}\Bigg(2\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\omega_n+\omega_{m1})\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-\omega_n)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_2,\omega_n+\omega_{m2})\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\omega_n+\omega_{m1}+\omega_{m3})$$

$$+\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1,\omega_n+\omega_{m1})\mathcal{G}^0(-\mathbf{k},-\omega_n)\mathcal{G}^0(\mathbf{k}+\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3,\omega_n+\omega_{m1}+\omega_{m3})\mathcal{G}^0(-\mathbf{k}+\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,-\omega_n+\omega_{m2}-\omega_{m1}-\omega_{m3})\Bigg)$$

$$\times\,\boldsymbol{\Psi}_{\mathbf{q}_1,\omega_{m1}}\boldsymbol{\Psi}^*_{\mathbf{q}_2,\omega_{m2}}\boldsymbol{\Phi}_{\mathbf{q}_3,\omega_{m3}}\boldsymbol{\Phi}_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_3-\mathbf{q}_2,\omega_{m1}+\omega_{m3}-\omega_{m2}}$$

car nous avons $\omega_{m1}+\omega_{m3}=\omega_{m2}+\omega_{m4}$.

9 Conclusion

Dans ce travail, nous avons utilisé la transformation d'Hubbard-Stratonovich pour obtenir, sous forme d'intégrale fonctionnelle, les corrections apportées au propagateur de phonons libre. Ces corrections apparaissent à l'aide du développement en cumulants et permettent de quantifier l'influence du couplage électron-phonon et de la présence des paires de Cooper sur la vitesse et l'atténuation du son dans un supraconducteur organique quasi-bidimensionnel. Cependant, d'après le théorème de Mermin-Wagner, il ne peut y avoir de transition vers l'état supraconducteur dans un système 2D. Il est donc absolument essentiel d'incorporer le couplage interplan dans l'analyse, ce que nous n'avons pas eu le temps de faire. Pour ce faire, il n'est pas nécessaire de tout recommencer du début, mais il suffit plutôt de procéder à un ajout au traitement 2D déjà effectué, car le couplage interplan étant très faible, il peut être traité comme une "perturbation". Pour compléter ce projet, il reste à effectuer le calcul explicite du terme d'ordre $\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^*\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\Psi}^*$ pour obtenir l'effet des fluctuations supraconductrices sur la vitesse du son et l'atténuation sonore. Il reste également à justifier pourquoi on peut (si c'est le cas) laisser le tomber le diagramme Aslamazov-Larkin dans ces calculs, car ce diagramme est considéré du même ordre que les diagrammes de Feynman 4, 5 et 6 (voir l'appendice II).

10 Appendice I- Références utiles

Voici une liste de références utiles reliées à ce travail et dont certaines ont été explicitement citées.

BOURBONNAIS, C., *Physique statistique*, notes de cours (PHY-741), Université de Sherbrooke, 1999.

FETTER, A.L., WALECKA, J.D., *Quantum theory of many-particle systems*, McGraw-Hill, 1971.

LE BELLAC, M., *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, InterEditions, 1988.

MATTUCK, R.D., *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*, McGraw-Hill, 1976.

NEGELE, J.W., ORLAND, H., *Quantum many-particle systems*, Addison-Wesley, 1988.

SÉNÉCHAL, D., *Mécanique quantique*, notes de cours (PHY-731), Université de Sherbrooke, 2000.

TREMBLAY, A.-M., *Problème à N-corps*, notes de cours (PHY-892), Université de Sherbrooke, 1997.

11 Appendice II- Diagrammes de Feynman