

# Sommaire

Depuis leur découverte, les études expérimentales ont démontré que les supraconducteurs à haute température ont une phase normale très étrange. Les propriétés de ces matériaux ne sont pas bien décrites par la théorie du liquide de Fermi. Le modèle de Hubbard bidimensionnel, bien qu'il ne soit pas encore résolu, est toujours considéré comme un candidat pour expliquer la physique de ces composés. Dans cet ouvrage, nous mettons en évidence plusieurs propriétés électroniques du modèle qui sont incompatibles avec l'existence de quasi-particules. Nous montrons notamment que la susceptibilité des électrons libres sur réseau contient des singularités logarithmiques qui influencent de façon déterminante les propriétés de la self-énergie à basse fréquence. Ces singularités sont responsables de la destruction des quasi-particules. En l'absence de fluctuations antiferromagnétiques, elles sont aussi responsables de l'existence d'un petit pseudogap dans le poids spectral au niveau de Fermi. Les propriétés du modèle sont également étudiées pour une surface de Fermi similaire à celle des supraconducteurs à haute température. Un parallèle est établi entre certaines caractéristiques du modèle et celles de ces matériaux.



# Remerciements

J'aimerais remercier chaleureusement M. André-Marie Tremblay pour avoir dirigé ce travail. En plus d'être un chercheur d'une grande compétence, M. Tremblay est d'une patience et d'une bonté que j'ai rarement rencontrée. Il a également fait preuve de compréhension à mon égard lors des moments plus difficiles. Enfin, il a su me laisser beaucoup de liberté dans mon travail.

Je remercie également toutes les personnes avec qui j'ai eu la chance de collaborer pendant mon séjour à Sherbrooke et plus particulièrement Steve Allen, David Poulin, Bumsoo Kyung et Yury Vilks ainsi que tout le personnel du département de physique.

Je remercie aussi Sylvie Hertrich, David Barba, Stéphane Pairault, Laurent Hubert, Francis Jackson, Alexandre Blais, Abdelouahab Sedeki, Michel Fournier, Hendrix Demers, Pierre Richard et Aldo Maccione pour leur support moral, leur aide et leur amitié.

Je remercie Chantale, Benoît, Guillaume, Mario, Ghislain, Daniel, Caroline, Pascal, Marie-Hélène, Normand, Sébastien et Sophie pour leur support moral, leur aide, leur amitié et un peu aussi pour le plaisir de la chose.

Je remercie Pierre, Nicole et Isabelle pour leur amour inconditionnel et réciproque, ainsi que pour leur support familial.

Je remercie la fondation André-Marie Tremblay, le CERPEMA, la fondation Famille-Lemay inc., le FCAR, l'ICRA et le CRSNG pour leur support financier.

Un remerciement tout particulier à Jacques Brel pour son support d'Amsterdam.



# Table des matières

<b>Sommaire</b>	<b>i</b>
<b>Remerciements</b>	<b>iii</b>
<b>Table des matières</b>	<b>iv</b>
<b>Table des figures</b>	<b>ix</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 État normal des supraconducteurs à haute température critique</b>	<b>5</b>
1.1 Caractéristiques des supraconducteurs . . . . .	5
1.2 Historique . . . . .	6
1.3 Supraconducteurs à haute température critique . . . . .	8
1.3.1 Structure chimique et diagramme de phase des SCHT . . . . .	8
1.3.2 Effet isotopique et mécanisme d'appariement . . . . .	11
1.3.3 Symétrie du paramètre d'ordre . . . . .	12
1.4 État normal sous-dopé des SCHT . . . . .	12
1.4.1 Régime non liquide de Fermi . . . . .	13
1.4.2 Régime pseudogap . . . . .	15
1.5 Théories phénoménologiques des SCHT . . . . .	18
1.6 Supraconducteurs organiques . . . . .	21
<b>2 Modèle de Hubbard</b>	<b>23</b>
2.1 Hamiltonien du modèle . . . . .	23
2.1.1 Limite de bande et limite atomique . . . . .	24
2.1.2 Propriétés exactes . . . . .	25
2.1.3 État fondamental . . . . .	26

2.2	Un modèle pour les SHT	27
2.3	Solutions approximatives du modèle de Hubbard	28
2.3.1	Champ moyen dynamique ( $d \rightarrow \infty$ )	28
2.3.2	Simulations Monte-Carlo quantique (SMCQ)	29
2.3.3	Méthode FLEX ( <i>fluctuation exchange</i> )	30
<b>3</b>	<b>Fluctuations dans les systèmes d'électrons libres sur réseau</b>	<b>33</b>
3.1	Considérations générales	33
3.2	Cas sans interactions	34
3.3	Susceptibilité des électrons libres dans le continuum	36
3.3.1	Bande liaison forte faiblement remplie	36
3.3.2	Calcul de $\chi^{0''}$ à température nulle	38
3.3.3	Effet de la température	40
3.4	Partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres dans une bande liaison forte	41
3.4.1	Calcul de $\chi^{0''}$	41
3.4.2	Interprétation physique des fréquences singulières	43
3.4.3	Effet du dopage à température nulle	45
3.4.4	Comportement à basse fréquence pour $\omega_s = 0$	46
3.4.5	Effet du dopage à température finie	48
3.4.6	Effet d'une amplitude de saut au second voisin	50
3.4.7	Effet de la dimensionnalité	53
3.5	Partie réelle de la susceptibilité des électrons libres dans une bande liaison forte	58
3.5.1	Comportement en fréquence de $\chi^{0'}$	58
3.5.2	Comportement en température de la susceptibilité statique	63
3.5.3	Position du maximum de la susceptibilité statique	64
3.6	Résumé des résultats importants	65
<b>4</b>	<b>Self-énergie des électrons : théorie des perturbations au second ordre</b>	<b>67</b>
4.1	Définition de la self-énergie	67
4.2	Théorie des perturbations au second ordre	70
4.3	Surface de Fermi circulaire	72
4.4	Surface de Fermi parfaitement emboîtée	75
4.4.1	Analyse du comportement de $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ à basse énergie	80

4.4.2	Dépendance en vecteur d'onde de $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ . . . . .	86
4.4.3	Calcul de $\Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ . . . . .	87
4.4.4	Robustesse du liquide emboîté . . . . .	88
4.5	Comparaison du liquide emboîté avec le liquide de Fermi marginal . . . . .	89
4.6	Effet du dopage . . . . .	91
4.7	Surface de Fermi des SCHAT : effet d'un saut au second voisin . . . . .	95
4.8	Résumé des résultats importants . . . . .	99
<b>5</b>	<b>Effet des interactions sur les fluctuations électroniques</b>	<b>101</b>
5.1	Équation de Bethe-Salpeter . . . . .	101
5.2	Solution de l'équation de Bethe-Salpeter avec l'approche auto-cohérente à deux particules . . . . .	103
5.2.1	Équations pour $U_{sp}$ , $U_{ch}$ et $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . . . . .	105
5.2.2	Caractéristiques de l'approche de Vilk et Tremblay . . . . .	107
5.3	Solutions des équations pour $U_{sp}$ , $U_{ch}$ et $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . . . . .	108
5.3.1	Résultats numériques . . . . .	108
5.3.2	Effet Pomerantchuk hors demi-remplissage . . . . .	112
5.4	Calcul des fluctuations . . . . .	115
5.4.1	Régime classique renormalisé : $n = 1$ et $t' = 0$ . . . . .	116
5.4.2	Comportement au voisinage de $\omega = \omega_s$ . . . . .	120
5.4.3	Effet du dopage . . . . .	122
5.4.4	Effet d'un saut au second voisin . . . . .	124
5.5	Résumé des résultats importants . . . . .	125
<b>6</b>	<b>Self-énergie des électrons : approche non-perturbative</b>	<b>127</b>
6.1	Formule de Vilk et Tremblay pour la self-énergie . . . . .	127
6.1.1	Formule symétrique . . . . .	129
6.1.2	Relation exacte entre les propriétés à une et à deux particules . . . . .	130
6.2	Propriétés à une particule dans le régime classique renormalisé . . . . .	131
6.3	Surface de Fermi des SCHAT : effet d'un saut au second voisin . . . . .	135
	<b>Conclusion</b>	<b>139</b>
<b>A</b>	<b>Analyse des comportements singuliers de <math>\chi^{0''}</math></b>	<b>143</b>

<b>B</b>	<b>Analyse des comportements singuliers de <math>\chi^{0''}</math> en présence d'un saut au second voisin</b>	<b>149</b>
<b>C</b>	<b>Fonction <math>\text{dilog}(x)</math></b>	<b>151</b>
<b>D</b>	<b>Méthodes de calcul numérique</b>	<b>153</b>
	D.1 Quantités statiques . . . . .	153
	D.2 Susceptibilité en fréquence réelle . . . . .	154
	D.3 Self-énergie . . . . .	154
<b>E</b>	<b>Comportement en fréquence de <math>\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)</math> : cas <math>T = 0</math></b>	<b>157</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>160</b>

# Table des figures

1.1	Structure chimique du $\text{La}_2\text{CuO}_4$ et du $\text{Ln}_2\text{CuO}_4$ ( $\text{Ln}=\text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$ ) [50]. . . . .	9
1.2	Structure chimique des plans $\text{CuO}_2$ . . . . .	9
1.3	Diagramme de phase schématique $T$ vs $x$ des SCHAT. Les lignes continues marquent une transition de phase. Les lignes pointillées marquent un changement de régime. . . . .	10
1.4	Résistivité $\rho_{ab}$ vs $T$ pour différentes valeurs de dopage du $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (sous-dopé) [72]. . . . .	14
1.5	Résistivité $\rho_{ab}$ vs $T$ pour différentes valeurs de dopage du $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (sur-dopé) [72]. . . . .	14
1.6	Coefficient de chaleur spécifique $\gamma$ vs $T$ pour différentes valeurs de dopage du $\text{Y}_{0,8}\text{Ca}_{0,2}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ . a) sur-dopé, b) sous-dopé [46]. . . . .	16
1.7	Spectre ARPES au niveau de Fermi pour une couche mince de $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-(x+y)}\text{La}_y\text{CuO}_{6-\delta}$ [33]. . . . .	17
1.8	Spectre ARPES au niveau de Fermi pour un composé de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ : état supraconducteur et état normal sur-dopé et sous-dopé (SC-O, SC-U, N-O et N-U respectivement) [44]. . . . .	17
1.9	Diagramme de phase température vs pression du $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{-Cu[N(CN)}_2\text{]Cl}$ [42]. . . . .	21
2.1	Diagramme de phase schématique $U/t$ vs $n$ pour l'état fondamental ( $T = 0$ ) du modèle de Hubbard tel qu'obtenu par champ moyen ( $d \geq 2$ ). Le point noir marque la transition de Mott [34] [60]. . . . .	26
3.1	Bulle de susceptibilité $\chi^0(q, iq_n)$ . . . . .	36
3.2	Surfaces de Fermi d'une bande liaison forte pour différents remplissages (à partir du centre : $n = 0,05, 0,37, 0,70, 1,00, 1,30, 1,63, 1,95$ ). . . . .	37

3.3	$\chi^{0''}$ dans le continuum vs $\omega$ pour différents vecteurs d'onde . $T = 0$ , $k_F^0{}^2 = 2, 0$ . . . . .	39
3.4	$\chi^{0''}$ dans le continuum vs $\omega$ pour différents vecteurs d'onde. $T = 0, 2$ , $k_F^0{}^2 = 2, 0$ . . . . .	40
3.5	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ pour différents vecteurs d'onde. $n = 1, T = 0, 2, \omega_s \neq 0, \omega_s \neq \omega_c$ . . . . .	44
3.6	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ pour différents vecteurs d'onde. $n = 1, T = 0, 2, \omega_s = \omega_c$ . . . . .	44
3.7	Lignes $\omega_s = 0$ dans la zone de Brillouin (pointillé). . . . .	46
3.8	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ pour différents vecteurs d'onde. $n = 1, T = 0, 2, \omega_s = 0$ . . . . .	47
3.9	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ : effet de la température. $n = 1$ , $\omega_s = 0$ . . . . .	48
3.10	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ : effet du dopage sur les singularités. $T = 0, 02, q = (\pi; 0, 8\pi), \omega_s = 0, 196$ . . . . .	50
3.11	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ : effet du dopage sur les singularités. $T = 0, 2, q = (\pi; 0, 8\pi), \omega_s = 0, 196$ . . . . .	51
3.12	$\chi^{0''}$ vs $\omega$ pour une bande liaison forte et pour le continuum. $T = 0, 1$ , $n = 0, 05, k_F^0{}^2 = 0, 3, q = k_F^0/10$ . . . . .	51
3.13	Effet de saut au second voisin sur la surface de Fermi à demi-remplissage.	52
3.14	a) $\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ : effet de saut au second voisin. $T = 0, 2, q = (\pi; \pi), n = 1$ . b) $\chi^{0''}/\omega$ vs $\omega$ . . . . .	54
3.15	$\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ : effet de saut au second voisin. $T = 0, 2, q = (\pi; \pi/2), n = 1$ . . . . .	54
3.16	a) $\omega_s$ vs $q_y/\pi$ pour $q_x = \pi/2$ : effet de saut au second voisin. b) $\omega_c$ vs $q_y/\pi$ pour $q_x = \pi/2$ . . . . .	55
3.17	$\chi^{0'}$ et $\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ . $T = 0, 2, n = 1, q =$ $(3\pi/4, \pi/4), \omega_c = 5, 23, \omega_s = 2, 16$ . . . . .	59
3.18	$\chi^{0'}$ et $\chi^{0''}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ . $T = 0, 2, n = 1, q = (\pi, 0)$ , $\omega_c = \omega_s = 4$ . . . . .	60
3.19	$\chi^{0'}$ d'une bande liaison forte vs $\omega$ . $T = 0, 2, n = 1, \omega_s = 0$ . . . . .	62
3.20	$\chi_T^0$ d'une bande liaison forte vs $T$ . $n = 1, \omega_s = 0$ . . . . .	63

4.1	Représentation diagrammatique de la self-énergie au second ordre en $U$ . Les lignes pointillées représentent l'interaction et les lignes continues sont des propagateurs de particules libres. . . . .	70
4.2	Surface de Fermi emboîtée : importance des fluctuations dont le vecteur d'onde $q$ est diagonal. . . . .	76
4.3	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour une surface de Fermi emboîtée. $T = 0, 2$ , $n = 1$ , $t' = 0$ , $U = 1$ . . . . .	77
4.4	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour une surface de Fermi emboîtée : largeur de l'anomalie de basse fréquence. $T = 0, 2$ , $n = 1$ , $t' = 0$ , $U = 1$ . . . . .	78
4.5	$\Sigma''(k, \omega)$ vs $\omega$ pour une surface de Fermi emboîtée : vecteurs d'onde loin de la surface de Fermi. $T = 0, 2$ , $n = 1$ , $t' = 0$ , $U = 1$ . . . . .	79
4.6	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour une surface de Fermi emboîtée : effet de la température. $k_F^0 = (\pi, 0)$ , $n = 1$ , $t' = 0$ , $U = 1$ . . . . .	79
4.7	$\Sigma''(k, 0)$ vs $T$ pour une surface de Fermi emboîtée. $n = 1$ , $t' = 0$ , $U = 1$ . . . . .	80
4.8	Fonctions $-\omega^2 +  \omega $ et $-\omega^2 + \sqrt{ \omega }$ vs $\omega$ . . . . .	85
4.9	Fonctions $-\omega - \omega \ln  \omega $ et $-\omega + \text{sgn}(\omega)\sqrt{ \omega }$ vs $\omega$ . . . . .	88
4.10	$\Sigma'(k_F^0, \omega)$ et $\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour une surface de Fermi emboîtée. $T = 0, 5$ , $n = 1$ , $U = 1$ , $k_F^0 = (3\pi/4, \pi/4)$ . . . . .	89
4.11	$\Sigma'(k, \omega)$ et $\Sigma''(k, \omega)$ vs $\omega$ pour un liquide de Fermi marginal. $T = 0, 1$ . . . . .	90
4.12	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages. $T = 0, 2$ , $U = 1, 0$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ . . . . .	92
4.13	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages. $T = 0, 2$ , $U = 1, 0$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . . . . .	93
4.14	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages. $T = 0, 5$ , $U = 1, 0$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ . . . . .	94
4.15	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages. $T = 0, 2$ , $U = 1, 0$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (\pi, 0)$ . . . . .	94
4.16	$\Sigma''(k_F^0, 0)$ vs $T$ pour différents remplissages. $U = 1, 0$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ . . . . .	95
4.17	$T$ vs $n$ : disparition de l'anomalie de la self-énergie par le dopage. . . . .	96
4.18	Surface de Fermi hors-demi remplissage avec saut au second voisin. . . . .	96
4.19	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures. $U = 1, 0$ , $n = 0, 90$ , $t' = -0, 2$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . . . . .	97

4.20	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures. $U = 1, 0$ , $n = 0, 85$ , $t' = -0, 3$ , $k_F^0$ selon la direction $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . . . . .	98
4.21	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différents vecteurs d'onde sur la surface de Fermi. $T = 0, 3$ , $U = 1, 0$ , $n = 0, 90$ , $t' = -0, 2$ . . . . .	98
5.1	Représentation diagrammatique de l'équation de Bethe-Salpeter. . . . .	102
5.2	Développement diagrammatique du vertex irréductible. Les lignes conti- nues sont des propagateurs habillés. . . . .	103
5.3	Représentation diagrammatique de l'approche Vilk-Tremblay pour l'équa- tion de Bethe-Salpeter. . . . .	104
5.4	$U_{sp}$ vs $U$ pour différents remplissages : $T = 0, 2$ , $t' = 0$ . . . . .	108
5.5	$U_{ch}$ vs $U$ pour différents remplissages : $T = 0, 2$ , $t' = 0$ . . . . .	109
5.6	$\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle / \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle$ vs $U$ pour différents remplissages : $T = 0, 2$ , $t' = 0$ . . . . .	110
5.7	$\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle / \langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle$ vs $T$ pour différents remplissages : $U = 4$ , $t' = 0$ . Les flèches indiquent la position des minima. . . . .	111
5.8	$U_{sp}$ vs $U$ pour différentes valeurs de $t'$ : $T = 0, 2$ , $n = 1, 0$ . . . . .	112
5.9	Diagramme de phase pression vs température pour l'hélium-3 : mini- mum de la courbe de fusion. . . . .	113
5.10	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $q = (\pi, \pi)$ , $n = 1, 0$ , $t' = 0$ . . . . .	116
5.11	Régime classique renormalisé dans un diagramme $T$ vs $U$ : $n = 1, 0$ , $t' = 0$ . . . . .	119
5.12	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $q = (\pi/2, \pi/2)$ , $n = 1, 0$ , $t' = 0$ . . . . .	120
5.13	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $q = (\pi, 3\pi/4)$ , $n = 1, 0$ , $t' = 0$ . . . . .	121
5.14	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages : $q = (\pi, \pi)$ , $T = 0, 3$ , $t' = 0$ . . . . .	122
5.15	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages : $q = (\pi/2, \pi/2)$ , $T = 0, 2$ , $t' = 0$ . . . . .	123
5.16	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différents remplissages : $q = (\pi, 3\pi/4)$ , $T = 0, 2$ , $t' = 0$ . . . . .	123
5.17	Régime classique renormalisé dans un diagramme $T$ vs $U$ pour diffé- rents remplissages. $t' = 0$ . . . . .	124
5.18	$\chi''_{sp}(q, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes valeurs de $t'$ : $q = (\pi, \pi)$ , $T = 0, 3$ , $U = 4, 0$ , $n = 1, 0$ . . . . .	125

6.1	Représentation diagrammatique de l'expression exacte pour la self- énergie. . . . .	128
6.2	Représentation diagrammatique de l'approche Vilk-Tremblay pour l'ex- pression de la self-énergie. . . . .	129
6.3	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 1, 0, k_F^0 = (\pi/2, \pi/2), U =$ $4, t' = 0$ . . . . .	133
6.4	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 1, 0, k_F^0 = (\pi, 0), U =$ $4, t' = 0$ . . . . .	133
6.5	$\Sigma''(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 1, 0, k_F^0 = (3\pi/4, \pi/4), U =$ $4, t' = 0$ . . . . .	134
6.6	$A(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 1, 0, k_F^0 = (3\pi/4, \pi/4), U =$ $4, t' = 0$ . . . . .	134
6.7	$A(k_F^0, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 1, 0, k_F^0 = (\pi, 0), U =$ $4, t' = 0$ . . . . .	135
6.8	$\Sigma''(k_F, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 0, 90, k_F$ selon la direction $\theta = \pi/10, U = 6, t' = -0, 2$ . . . . .	136
6.9	$A(k_F, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 0, 90, k_F$ selon la direction $\theta = \pi/10, U = 6, t' = -0, 2$ . . . . .	136
6.10	$\Sigma''(k_F, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 0, 90, k_F$ selon la direction $\theta = \pi/4, U = 6, t' = -0, 2$ . . . . .	137
6.11	$A(k_F, \omega)$ vs $\omega$ pour différentes températures : $n = 0, 90, k_F$ selon la direction $\theta = \pi/4, U = 6, t' = -0, 2$ . . . . .	138
D.1	Répartition des vecteurs d'onde $q$ dans la zone de Brillouin pour le calcul de la self-énergie. . . . .	155



# Introduction

Depuis leur découverte en 1986, les supraconducteurs à haute température (SCHT) ont suscité un effort de recherche remarquable dans la communauté scientifique et ce, autant du point de vue expérimental que théorique. Malgré cela, nous ne disposons pas à ce jour d'un modèle qui explique de façon unifiée les différentes propriétés de ces matériaux. Celles-ci sont fort inhabituelles et leur compréhension exige probablement l'élaboration de nouvelles idées physiques.

Cette découverte a stimulé la recherche dans le domaine des électrons fortement corrélés. Le contenu de cet ouvrage s'inscrit d'ailleurs dans ce contexte. Le modèle de Hubbard bidimensionnel a rapidement été proposé comme candidat possible pour expliquer la physique des SCHT. Malheureusement, les propriétés de ce modèle sont encore mal comprises et les efforts se poursuivent pour en trouver la solution. Dans ces matériaux, les interactions électroniques sont du même ordre de grandeur que la largeur de bande ce qui rend la tâche des théoriciens beaucoup plus difficile.

L'origine de la formation des paires de Cooper dans les SCHT reste encore un mystère. Mieux encore, les propriétés de l'état normal sont très étranges et sont elles aussi assez mal comprises. L'explication de la phase supraconductrice de ces matériaux passe par une meilleure compréhension de l'état normal.

Cet ouvrage a pour objet les propriétés électroniques de l'état normal du modèle de Hubbard bidimensionnel. La motivation de ce travail est une éventuelle compréhension de l'état normal des SCHT. Bien que nous n'ayons pas la prétention d'expliquer les propriétés des SCHT au-dessus de la phase supraconductrice, nous pensons que ce travail jette un éclairage nouveau sur la physique du modèle de Hubbard. Cette physique pourrait éventuellement servir de base à de nouvelles idées servant à comprendre les propriétés des SCHT.

Le chapitre 1 est consacré au phénomène de supraconductivité. Nous y présentons un survol historique allant de la découverte du phénomène au début du XXe s. à

celle des SHT en 1986 en passant par les idées qui ont mené à la théorie BCS publiée en 1957. Les différentes caractéristiques des SHT y sont expliquées et plus particulièrement celles de l'état normal. Enfin, nous y faisons un bref survol des différentes théories phénoménologiques existantes à l'heure actuelle.

Le modèle de Hubbard fait l'objet du chapitre 2. Nous expliquons les différentes propriétés du modèle, les raisons qui en font un candidat possible pour comprendre la physique des SHT et quelques unes des méthodes importantes élaborées jusqu'à ce jour pour en obtenir la solution.

Au chapitre 3, nous présentons une étude exhaustive des propriétés des fluctuations des électrons libres sur un réseau cristallin. Il appert que ces fluctuations sont très différentes de celles du continuum. Elles sont notamment caractérisées par la présence de singularités logarithmiques. Presque tous les aspects sont abordés : remplissage de la bande, saut au second voisin et effet de la dimensionnalité.

Le chapitre 4 est une étude de la self-énergie obtenue dans le cadre de la théorie des perturbations au second ordre. Les singularités contenues dans les fluctuations des électrons libres ont un effet important sur les propriétés à une particule. Le rôle des interactions est de coupler ces fluctuations à la fonction de Green. La self-énergie obtenue est analysée en détails. Nous montrons et expliquons la présence d'une anomalie de basse fréquence incompatible avec l'existence de quasi-particules. L'effet du remplissage et d'un saut au second voisin est également abordé.

L'effet des interactions sur les fluctuations de spin et de charge est le sujet du chapitre 5. Cette étude est menée dans le cadre d'une approche développée par Vilk et Tremblay. Les interactions favorisent les fluctuations de spin au détriment des fluctuations de charge. Près du demi-remplissage, l'existence de fluctuations antiferromagnétiques à basse température est mise en évidence. Ce phénomène déjà connu est analysé à la lumière des propriétés des fluctuations des électrons libres identifiées au chapitre 3. Un phénomène analogue à l'effet Pomerantchuk est observé dans la double occupation moyenne hors demi-remplissage.

Enfin au chapitre 6, nous revenons sur les propriétés de la self-énergie dans le cadre d'une approche non-perturbative pour mieux mesurer l'effet des interactions sur les propriétés à une particule. Les fluctuations antiferromagnétiques ouvrent un pseudogap dans le poids spectral conformément à ce qu'on trouve dans la littérature sur le sujet. Loin de ce régime, les conclusions de la théorie des perturbations s'avèrent qualitativement justes. Enfin, le cas d'une surface de Fermi similaire à celle des SHT

est abordé.



# Chapitre 1

## État normal des supraconducteurs à haute température critique

### 1.1 Caractéristiques des supraconducteurs

Historiquement, un supraconducteur est un matériau possédant trois caractéristiques importantes. Sous une certaine température critique ( $T_c$ ) à laquelle la phase supraconductrice apparaît, c'est un conducteur parfait i.e. que sa résistivité électrique devient brusquement nulle à  $T_c$ . De plus, si le supraconducteur est exposé à un champ magnétique externe inférieur à une certaine valeur de champ critique, ce dernier est expulsé hors du matériau de telle sorte que  $H = 0$  partout à l'intérieur sauf dans une mince couche superficielle dont l'épaisseur est donnée par la longueur de pénétration de London ( $\lambda_L$ ). C'est donc un diamagnétique parfait. Enfin, le spectre d'excitation électronique est généralement caractérisé par la présence d'un gap supraconducteur.

Le phénomène de supraconductivité n'est pas à toute épreuve. Pour un supraconducteur dit de type I, il existe un champ magnétique externe critique  $H_c(T)$  au-dessus duquel la supraconductivité est détruite. Ce champ critique augmente quand le matériau est refroidi et atteint une valeur maximale à  $T = 0$ . D'autre part, un courant électrique trop élevé peut aussi détruire la phase supraconductrice. Le matériau est donc également caractérisé par un courant critique  $J_c(T)$ .

Il existe des supraconducteurs dont les propriétés magnétiques sont plus complexes. Ceux-ci sont dits de type II. Ils sont caractérisés par deux valeurs critiques de champ magnétique externe. Pour un champ  $H$  tel que  $H_{c_2} > H > H_{c_1}$ , la supraconductivité n'est pas détruite complètement. Il se forme des îlots non-supraconducteurs

à l'intérieur desquels le champ pénètre. Le matériau n'est donc plus un diamagnétique parfait. Cette pénétration du champ externe se fait sous la forme de vortex. Lorsque  $H > H_{c_2}$ , la supraconductivité est complètement détruite.

Parmi les caractéristiques mentionnées jusqu'ici, aucune n'est vraiment nécessaire pour l'état supraconducteur. Un supraconducteur de type II exposé à un champ magnétique  $H > H_{c_1}$  a une résistivité non-nulle car les vortex bougent sous l'effet d'un champ électrique. De plus, ce n'est pas un diamagnétique parfait. Ajoutons aussi qu'il existe des supraconducteurs sans gap. La caractéristique la plus fondamentale d'un supraconducteur est donc l'existence d'un paramètre d'ordre supraconducteur à longue portée. Nous aborderons cette question quand nous parlerons de la théorie BCS.

## 1.2 Historique

La supraconductivité a été observée pour la première fois en 1911 par le physicien Kamerlingh Onnes. Utilisant l'hélium liquide pour refroidir des échantillons de mercure, il constate que leur résistivité électrique chute brusquement à zéro à 4,15K [59]<sup>1</sup>. L'année suivante, il découvre que le phénomène disparaît en présence d'un champ magnétique suffisamment élevé. Ce n'est qu'en 1933 que les physiciens Meissner et Ochsenfeld observent les propriétés de diamagnétisme parfait des supraconducteurs [53].

Cette découverte du diamagnétisme parfait inhérent aux supraconducteurs amène les frères Fritz et Heinz London à proposer une équation permettant d'expliquer cet effet et de prédire la grandeur de la longueur de pénétration du champ magnétique dans le matériau [45]. Cette équation est dérivée en 1950 par Ginzburg et Landau dans le cadre d'une théorie phénoménologique faisant appel à la notion de paramètre d'ordre [30]. Le paramètre d'ordre est simplement relié à la densité d'électrons supraconducteurs. Bien que très puissante, cette théorie est insatisfaisante car elle ne fournit aucune explication sur le mécanisme microscopique menant à la supraconductivité.

Toujours en 1950, Frölich prévoit que la température de transition supraconductrice devrait diminuer si on augmente la masse des isotopes [26]. L'effet isotopique,

---

<sup>1</sup>Les références bibliographiques sont en ordre alphabétique d'auteur et non pas en ordre d'apparition dans le texte.

observé expérimentalement la même année [51], suggère que les phonons jouent un rôle important dans le mécanisme de supraconductivité.

Il faut attendre jusqu'en 1957 pour que Bardeen, Cooper et Schrieffer proposent la théorie de la supraconductivité qui porte leurs noms (théorie BCS) [4]. En 1956, Cooper avait découvert que l'état fondamental d'un gaz d'électrons est instable si on introduit une interaction attractive et ce, aussi petite soit-elle [18]. Cette attraction est rendue possible grâce aux phonons qui en sont les médiateurs. Ce phénomène est le fondement de la théorie BCS.

Dans cette théorie, un paramètre d'ordre représenté par la fonction de paire est introduit :

$$\Phi_{\alpha\beta}(x, y) = \left\langle \psi_{\alpha}^{\dagger}(x) \psi_{\beta}^{\dagger}(y) \right\rangle$$

où  $\psi_{\alpha}^{\dagger}(x)$  est un opérateur qui crée un électron à la position  $x$  avec un spin  $\alpha$ . Le hamiltonien contient un terme de potentiel attractif simplifié justifié par le couplage électron-phonon. Il est traité par une approche champ moyen qui consiste à ne garder que le premier ordre des fluctuations de  $\Phi_{\alpha\beta}(x, y)$ . Une équation auto-cohérente est obtenue pour le paramètre d'ordre en minimisant l'énergie libre.

La théorie prévoit que les électrons se situant près du niveau de Fermi formeront des paires de Cooper. Les niveaux d'énergie dans cette région du spectre sont déplacés vers le haut s'ils sont vides ou vers le bas s'ils sont occupés, ouvrant ainsi un gap  $2\Delta$  dans la densité d'états. En bordure du gap, la densité d'états est divergente. Loin du gap, les états sont ceux du gaz d'électrons. Le gap lui-même est relié au paramètre d'ordre. Une prédiction importante de la théorie BCS est la relation entre  $T_c$  et  $\Delta_{T=0}$  :

$$\frac{\Delta_{T=0}}{k_B T_c} = 1,76.$$

Cette relation est approximativement satisfaite par beaucoup de supraconducteurs conventionnels (Al, In, etc.). C'est un succès important de la théorie BCS. Deux ans plus tard, Gor'kov démontre que la théorie de Ginzburg-Landau peut être obtenue à partir de la théorie BCS [31]. Le mystère de la supraconductivité semble alors avoir été percé.

## 1.3 Supraconducteurs à haute température critique

Pendant toutes ces années, les chercheurs s'emploient à trouver des alliages et des composés supraconducteurs. Jusqu'au milieu des années quatre-vingt, les composés de type A15 ( $\text{Nb}_3\text{Sn}$ ,  $\text{Nb}_3\text{Ga}$  et  $\text{Nb}_3\text{Ge}$ ) sont ceux dont la température de transition est la plus élevée avec des  $T_c$  se situant autour de 20K. Il semble alors difficile de faire beaucoup mieux.

En 1986, le cours de l'histoire de la supraconductivité est brutalement modifié par la découverte de Bednorz et Müller. Les deux chercheurs ont mesuré une transition supraconductrice dans un composé de Ba-La-Cu-O à une température se situant entre 30K et 35K [10]. La supraconductivité à haute température critique vient de naître. Dans les années qui suivent, les chercheurs découvrent d'autres composés du genre dont la température critique est nettement plus élevée : Y-Ba-Cu-O (95K), Bi-Sr-Ca-Cu-O (110K), Tl-Ba-Ca-Cu-O (125K) etc. Le record est actuellement détenu par les composés Hg-Ba-Ca-Cu-O qui peuvent devenir supraconducteurs à 164K lorsqu'ils sont soumis à une pression de 30GPa. La température de liquéfaction de l'azote étant de 77K, les applications techniques des supraconducteurs deviennent envisageables.

À ce jour, la compréhension du mécanisme microscopique de la supraconductivité à haute température échappe encore aux physiciens. Même l'état normal de ces matériaux reste incompris. Dans ce qui suit, nous allons faire un survol des différentes propriétés des SHT (supraconducteurs à haute température). Nous verrons en quoi ils diffèrent des supraconducteurs conventionnels.

### 1.3.1 Structure chimique et diagramme de phase des SHT

Les SHT sont caractérisés par une structure chimique constituée de plans d'oxyde de cuivre ( $\text{CuO}_2$ ) entre lesquels se trouvent des couches composées d'autres éléments chimiques et d'oxygène ( $\text{A}_m\text{O}_n$ ) (voir figures 1.1 et 1.2). Il semble que cette structure fortement anisotrope soit indispensable pour avoir une température critique supérieure à 40K.

Les porteurs, généralement des trous, sont essentiellement confinés aux plans  $\text{CuO}_2$ . Les couches  $\text{A}_m\text{O}_n$  jouent le rôle de réservoirs de charge et contrôlent la densité de porteurs dans les plans d'oxyde de cuivre. Prenons par exemple le cas du composé de lanthane  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Ce matériau est un isolant antiferromagnétique. Si des atomes de lanthane (trivalent) sont remplacés par des atomes de strontium (divalent) pour

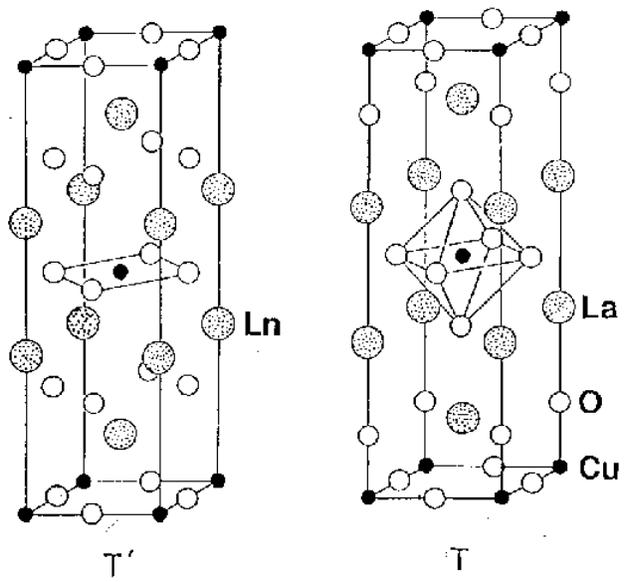


FIG. 1.1: Structure chimique du  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  et du  $\text{Ln}_2\text{CuO}_4$  ( $\text{Ln}=\text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$ ) [50].

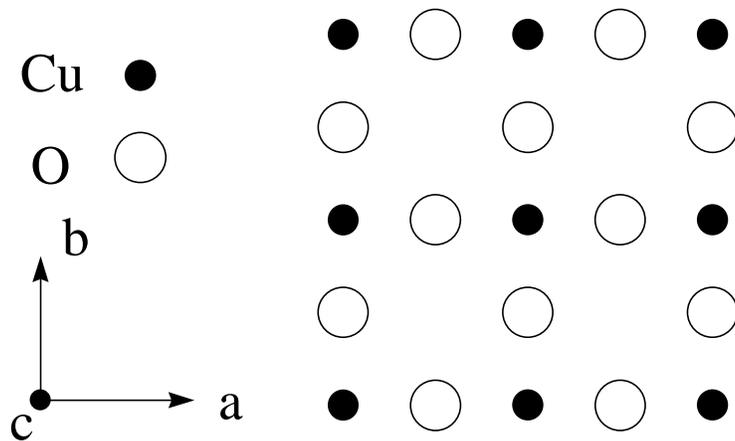


FIG. 1.2: Structure chimique des plans  $\text{CuO}_2$ .

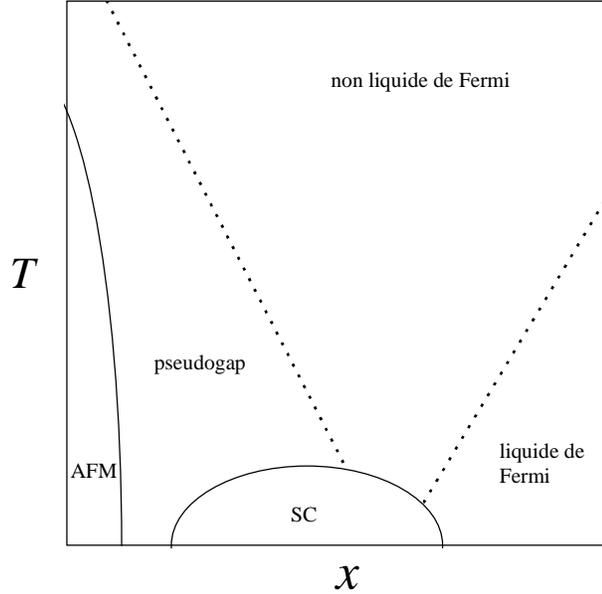


FIG. 1.3: Diagramme de phase schématique  $T$  vs  $x$  des SCHT. Les lignes continues marquent une transition de phase. Les lignes pointillées marquent un changement de régime.

obtenir du  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , la densité de trous dans les plans  $\text{CuO}_2$  augmente. Le matériau devient conducteur et a une phase supraconductrice dans un certain intervalle de dopage. À titre d'exemple, sa température critique est de 40K pour  $x = 0,17$  [16]. Ce dopage est optimal en ce sens qu'il maximise la température critique. Sous la valeur optimale de  $x$ , nous dirons que le matériau est sous-dopé.

La figure 1.3 nous montre un diagramme de phase schématique des SCHT. Nous avons le dopage  $x$  en abscisse et la température en ordonnée. En l'absence de dopage ( $x = 0$ ), il y a un électron de valence par  $\text{CuO}_2$ . La valeur de  $x$  est reliée au nombre de trous par  $\text{CuO}_2$  qui sont ajoutés en dopant le matériau. La physique de ce diagramme est très riche. Tout d'abord, il contient deux phases ordonnées en plus de l'état normal. À  $x = 0$ , le matériau est un isolant de Mott à haute température et devient antiferromagnétique sous la température de Néel. La théorie des bandes prévoit à tort que le matériau est un conducteur ce qui montre qu'il s'agit d'un système d'électrons fortement corrélés. La phase supraconductrice apparaît uniquement quand le matériau est suffisamment dopé avec une température critique maximale

dans la région  $x \approx 0,15$ . L'état normal est lui-même divisé en trois régimes différents. Quand le dopage est trop élevé pour qu'il y ait une phase supraconductrice, le matériau se comporte comme un liquide de Fermi. Dans la région du dopage optimal et au-dessus de la phase supraconductrice (régime du centre), nous avons un non liquide de Fermi. Enfin, à droite de la phase antiferromagnétique se trouve le régime pseudogap. Il ne s'agit pas de phases ordonnées et le passage d'un régime à l'autre se fait tout en douceur. Mentionnons également que ce diagramme de phase ne retient que les propriétés générales des SHT. Il reste muet sur les particularités de certains composés. Par exemple, les composés de lanthane passent d'une structure tétragonale à une structure orthorhombique quand on diminue la température à des dopages inférieurs à 0,2.

### 1.3.2 Effet isotopique et mécanisme d'appariement

Dans la théorie BCS, les électrons forment des paires de Cooper grâce aux phonons qui leur permettent de s'attirer. Cette attraction due aux phonons est le mécanisme microscopique de la supraconductivité conventionnelle. Historiquement, la mesure de l'effet isotopique i.e. de l'exposant  $\alpha$  dans la relation

$$T_c \propto M^{-\alpha} \quad (M : \text{masse de l'isotope})$$

a permis d'identifier la nature de ce mécanisme.

Un effet isotopique est également mesuré dans les SHT en changeant la masse des isotopes d'oxygène. Il est possible cependant que cet effet soit d'une toute autre nature. Le changement de masse peut influencer le transfert de charge des couches intermédiaires  $A_mO_n$  aux plans  $\text{CuO}_2$  [39] [67]. C'est le cas si les degrés de liberté des ions ne peuvent pas être traités séparément des degrés de liberté des électrons (situation de non adiabaticité). La valeur de  $T_c$  étant une fonction du dopage, il en résulte alors une contribution à l'exposant  $\alpha$  de la forme [39]

$$\alpha_2 = -\frac{M}{T_c} \frac{\partial T_c}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial M}.$$

À dopage optimal,  $T_c$  dépend faiblement de la densité de porteurs et cette contribution est petite. Or, l'effet isotopique mesuré à dopage optimal est faible [25] ce qui suggère que la valeur de  $\alpha$  n'est pas due au rôle des phonons dans le mécanisme d'appariement

mais plutôt à un transfert de porteurs. Il y a donc peu de chances que les phonons soient responsables de la formation des paires de Cooper.

Par ailleurs, la proximité de la phase antiferromagnétique permet de penser que les fluctuations magnétiques pourraient intervenir dans le mécanisme d'appariement. Cette question n'est cependant pas encore résolue.

### 1.3.3 Symétrie du paramètre d'ordre

Dans les supraconducteurs conventionnels, les paires de Cooper ont un moment cinétique nul. Le paramètre d'ordre est donc de symétrie  $s$ . Par voie de conséquence, le gap est constant sur toute la surface de Fermi ou, à tout le moins, a la même symétrie que le cristal. Ce n'est pas le cas pour les SCHT. Ceux-ci possèdent un gap de symétrie  $d$  que nous pouvons écrire [82] :

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0(\cos(k_x a) - \cos(k_y a))$$

où  $a$  est le paramètre du réseau cristallin. Le gap s'annule dans les directions  $k_x = \pm k_y$ . Cette caractéristique du gap a des conséquences sur la densité d'états  $N(\omega)$  dans la phase supraconductrice. Au lieu d'être nulle quand  $|\omega| < \Delta_0$  (symétrie  $s$ ),  $N(\omega)$  diminue linéairement avec la fréquence. Cette particularité du gap dans les SCHT indique qu'un rôle important est joué par de fortes interactions à courte portée entre les électrons [6].

## 1.4 État normal sous-dopé des SCHT

Contrairement aux supraconducteurs conventionnels, l'état normal au-dessus de la phase supraconductrice dans la région sous-dopée n'est pas un liquide de Fermi. Ses propriétés étranges ne sont pas bien expliquées et leur compréhension est incontournable pour en arriver à une théorie complète de la supraconductivité à haute température.

La théorie du liquide de Fermi a été proposée par Landau en 1956 [40]. Dans cette théorie, les excitations fondamentales du système sont des quasi-particules. Ces excitations ressemblent à beaucoup d'égards à des particules libres. Il existe une surface de Fermi bien définie marquant la frontière entre les quasi-trous et les quasi-électrons. Les quasi-particules ont un temps de vie fini en général mais infini

au niveau de Fermi à température nulle. Les interactions entre les quasi-particules sont faibles et c'est surtout pour étudier les propriétés de transport qu'elles doivent être prises en compte. Le concept de quasi-particule n'est pas applicable à tous les systèmes d'électrons en interaction. Lorsqu'il l'est, la justesse de la théorie est limitée aux basses températures et au voisinage de la surface de Fermi. Beaucoup de métaux sont de bons liquides de Fermi.

Une des raisons du succès de la théorie BCS pour expliquer la supraconductivité dans un métal est l'existence d'un liquide de Fermi au-dessus de la température de transition. Les excitations élémentaires qui forment des paires de Cooper sont des quasi-électrons. Leurs propriétés sont bien comprises et la théorie BCS leur ajoute le mécanisme microscopique d'appariement.

Il en va autrement de l'état normal des SHT quand ils sont sous-dopés. Dans ce qui suit, nous ferons un survol des propriétés physiques de ce régime.

### 1.4.1 Régime non liquide de Fermi

Les propriétés thermodynamiques de ce régime (voir figure 1.3) ont des comportements en température semblables à ceux d'un liquide de Fermi. Ce n'est cependant pas le cas pour les propriétés de transport. La résistivité électrique, la conductivité thermique, les différents taux de relaxation nucléaire et la conductivité de Hall en sont des exemples.

Au voisinage du dopage optimal, la résistivité électrique mesurée parallèlement aux plans  $\text{CuO}_2$  ( $\rho_{ab}$ ) est linéaire en température un peu au-dessus de  $T_c$  jusqu'à plusieurs centaines de degrés Kelvin (figure 1.5). L'ampleur de cette plage de température exclut l'explication voulant que les phonons soient responsables de ce comportement de  $\rho_{ab}(T)$  [19]. Le comportement de  $\rho_{ab}(T)$  est métallique en ce sens que la résistivité électrique diminue avec la température comme dans un métal.

Toujours dans cette région du diagramme de phase, la résistivité électrique perpendiculaire aux plans  $\text{CuO}_2$  ( $\rho_c$ ) est métallique ou isolante ( $d\rho_c/dT < 0$ ) selon le composé étudié. Elle est environ trois ordres de grandeur plus élevée que  $\rho_{ab}$ , conséquence de la forte anisotropie des SHT.

Varma *et al.* [75] ont proposé l'hypothèse du liquide de Fermi marginal pour décrire et unifier les propriétés de ce régime. Dans cette théorie, le comportement étrange des différentes propriétés de transport est obtenu à partir d'une forme de self-énergie phénoménologique. Nous reparlerons de cette théorie au chapitre 4.

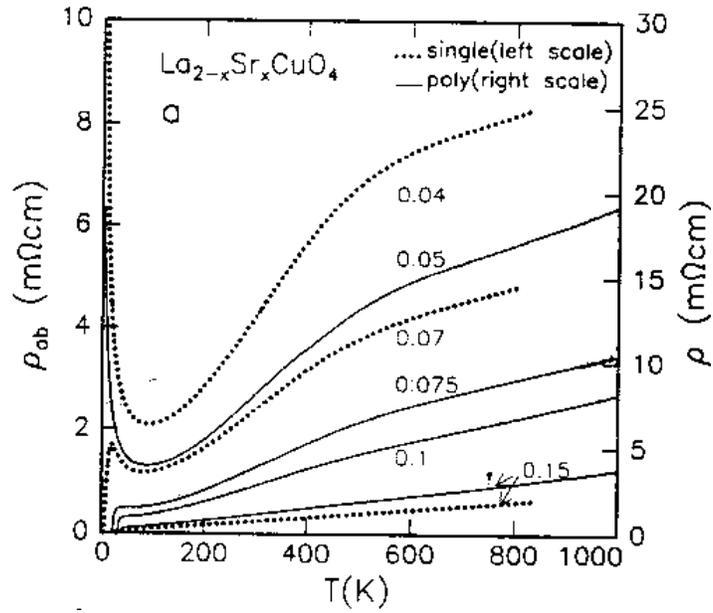


FIG. 1.4: Résistivité  $\rho_{ab}$  vs  $T$  pour différentes valeurs de dopage du  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (sous-dopé) [72].

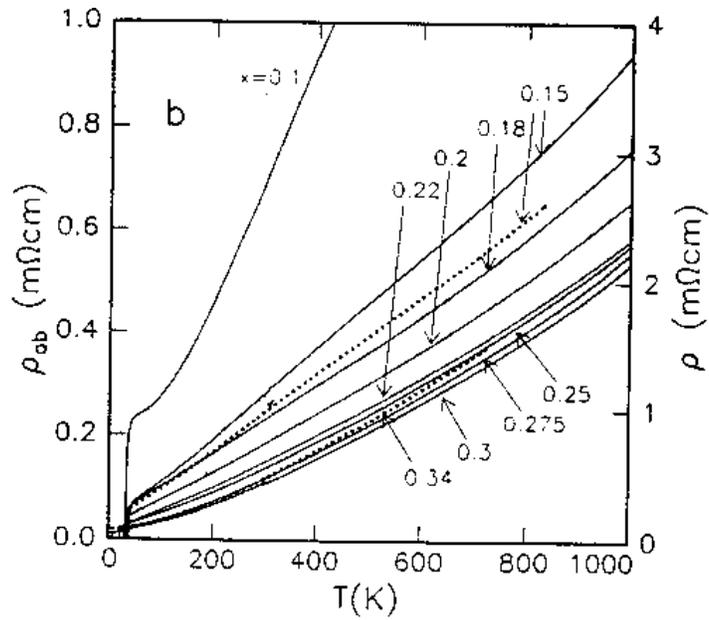


FIG. 1.5: Résistivité  $\rho_{ab}$  vs  $T$  pour différentes valeurs de dopage du  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (sur-dopé) [72].

## 1.4.2 Régime pseudogap

Dans la région sous-dopée du diagramme de phase, le régime pseudogap se situe sous le régime non liquide de Fermi. Il est absent du diagramme à dopage optimal ou plus élevé. Un pseudogap est un gap partiel i.e. que la densité d'états et le poids spectral sont partiellement supprimés au voisinage du niveau de Fermi. La grandeur du pseudogap varie selon la direction de la même manière que le gap supraconducteur.

Les propriétés physiques de ce régime sont affectées par l'apparition du pseudogap. La chaleur spécifique, la résistivité électrique, le poids spectral et la densité d'états en sont des exemples. Contrairement au régime non liquide de Fermi, il n'y pas que les propriétés de transport qui ont un comportement inhabituel.

À dopage optimal ou plus élevé, le coefficient de chaleur spécifique  $\gamma(T) \equiv C_V(T)/T$  est constant au-dessus de  $T_c$ , passe par un maximum à la transition supraconductrice pour finalement tendre vers zéro à basse température (figure 1.6a). Lorsque le matériau est sous-dopé,  $\gamma(T)$  se met à diminuer avant la transition supraconductrice (figure 1.6b). La température à laquelle cette diminution s'amorce est la température d'apparition du pseudogap. Toujours dans la région sous-dopée, le maximum à  $T_c$  est moins prononcé que dans les autres régimes [47]. La diminution de  $\gamma(T)$  sous  $T_c$  est linéaire en température ce qui est caractéristique de la présence d'un gap de symétrie  $d$  car le coefficient de chaleur spécifique est proportionnel à la densité d'états au niveau de Fermi. Dans un supraconducteur conventionnel où la symétrie du gap est de type  $s$ , la chaleur spécifique se comporte comme  $\sim \exp(-\Delta/k_B T)$  sous la température critique.

Dans le régime non liquide de Fermi, nous avons vu que la résistance électrique  $\rho_{ab}$  se comporte linéairement en température. À la température d'apparition du régime pseudogap, ce comportement reste linéaire mais sa pente est modifiée (figure 1.4). La résistivité se met à décroître plus rapidement avec le refroidissement [5]. Cette inflexion est une signature du changement de régime.

L'expérience ARPES (*angle resolved photo-emission spectroscopy*) permet de mesurer directement le pseudogap dans le poids spectral. Le principe de ce montage expérimental est le suivant : un photon est injecté dans le matériau avec suffisamment d'énergie pour en arracher un électron. L'énergie et l'angle d'éjection de cet électron est ensuite mesuré. Parce que l'électron dans le matériau a un comportement fortement bidimensionnel, nous pouvons calculer l'impulsion que celui-ci avait avant d'en sortir. L'intensité du spectre obtenu est proportionnelle à la partie électronique du

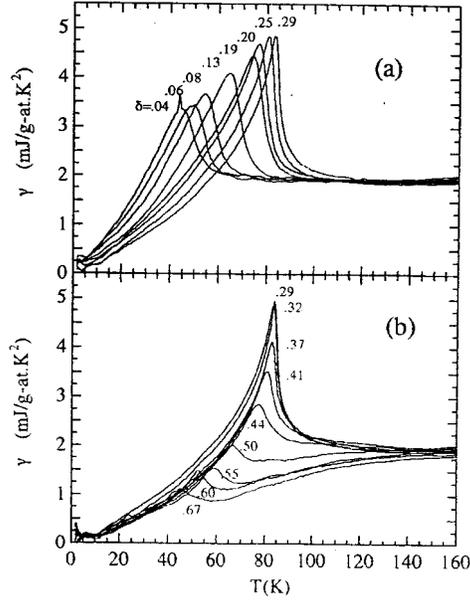


FIG. 1.6: Coefficient de chaleur spécifique  $\gamma$  vs  $T$  pour différentes valeurs de dopage du  $Y_{0,8}Ca_{0,2}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ . a) sur-dopé, b) sous-dopé [46].

poids spectral, i.e. :

$$I(\mathbf{k}, \omega) \propto f(\omega)A(\mathbf{k}, \omega)$$

où  $I$  est l'intensité du spectre,  $f$  la distribution de Fermi-Dirac et  $A$  le poids spectral. Cette expérience est une excellente sonde microscopique.

La figure 1.7 présente un spectre ARPES au niveau de Fermi pour une couche mince de Bi-2201 dans les cas sous-dopé et dopé optimalement. Dans le cas sous-dopé et à dopage optimal, la distance entre le maximum du spectre et le niveau de Fermi est plus grande que la température. C'est donc le poids spectral lui-même qui est supprimé à basse énergie. L'anisotropie du pseudogap est apparente. Le maximum du spectre est plus près des basses énergies au vecteur  $(0, 4\pi; 0, 4\pi)$  qu'au vecteur  $(\pi; 0, 25\pi)$ . La figure 1.8 montre des spectres pour un composé de  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ . Dans l'état normal sur-dopé (NO), le spectre croise le niveau de Fermi. Il n'y a donc pas de pseudogap dans ce régime.

Ces résultats expérimentaux confirment que l'état normal sous-dopé des SHT n'est pas décrit par la théorie du liquide de Fermi. Pour comprendre le comportement

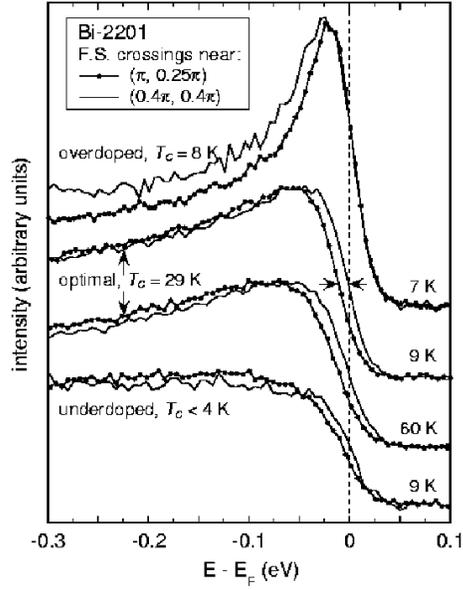


FIG. 1.7: Spectre ARPES au niveau de Fermi pour une couche mince de  $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-(x+y)}\text{La}_y\text{CuO}_{6-\delta}$  [33].

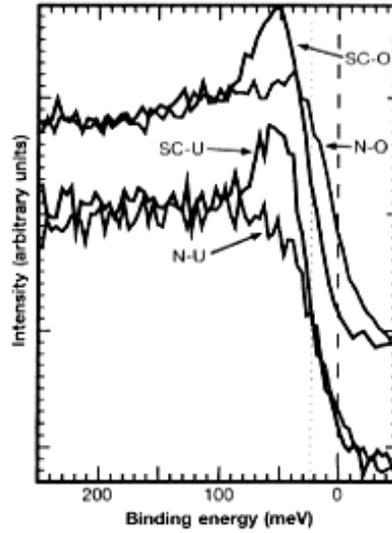


FIG. 1.8: Spectre ARPES au niveau de Fermi pour un composé de  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$  : état supraconducteur et état normal sur-dopé et sous-dopé (SC-O, SC-U, N-O et N-U respectivement) [44].

des électrons dans ces matériaux, il faut s'attaquer à des modèles microscopiques d'électrons fortement corrélés.

## 1.5 Théories phénoménologiques des SHT

Depuis la découverte de ces matériaux, des efforts ont été faits pour construire une théorie phénoménologique capable de reproduire les propriétés physiques étranges des SHT. Dans cette section, nous présentons un aperçu des différentes idées physiques qui ont été proposées dans ce but ces dernières années.

Une théorie phénoménologique importante pour expliquer les propriétés de l'état normal des SHT est sans aucun doute la théorie du liquide de Fermi marginal que nous avons déjà mentionnée plus haut. Cette théorie a été proposée par Varma *et al.* dès 1989 [75]. L'hypothèse de base est l'existence d'importantes fluctuations de la forme

$$\begin{aligned}\chi''(\mathbf{q}, \omega) &\sim \omega/T \text{ pour } |\omega| < T \\ &\sim \text{cste} \text{ pour } |\omega| > T.\end{aligned}$$

Les contributions à la self-énergie de ce type de fluctuations sont données par

$$\begin{aligned}\Sigma''(\mathbf{k}, \omega) &\sim -\frac{\pi}{2} \max(|\omega|, T) \\ \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) &\sim \omega \ln \max(|\omega|, T).\end{aligned}$$

Ce résultat est qualitativement très différent de celui d'un liquide de Fermi. La notion de quasi-particule n'est cependant pas complètement incompatible avec le liquide de Fermi marginal. À basse température, le poids de quasi-particule au niveau de Fermi se comporte comme

$$Z_{k_F} \sim -1/\ln T.$$

À température nulle, les quasi-particules disparaissent donc. Mais à température finie, leur poids est bien défini.

Cette forme de self-énergie est compatible avec la plupart des propriétés non-liquide de Fermi de l'état normal des SHT, notamment la linéarité du comportement

en température de la résistivité électrique. Varma *et al.* ont également montré dans leur article original l'existence d'une instabilité de paire dans le liquide de Fermi marginal. Cependant, leur théorie fait appel à une surface de Fermi bien définie et prévoit que le gap supraconducteur est de symétrie  $s$ . Or, l'existence d'une surface de Fermi même partielle est fortement mise en doute par les mesures ARPES et le gap dans les SCHT est généralement de symétrie  $d$ .

Virosztek et Ruvalds ont développé une théorie du liquide de Fermi emboîté [81] et ont montré que celle-ci s'apparente à l'hypothèse du liquide de Fermi marginal. Ces auteurs travaillent avec des quasi-particules dont la surface de Fermi est au moins approximativement emboîtée et par un argument d'espace de phase montrent que cette géométrie de la surface de Fermi mène à des fluctuations du type liquide de Fermi marginal. Un argument microscopique est donc proposé pour justifier à posteriori l'hypothèse phénoménologique de Varma *et al.*

Cette théorie ne repose essentiellement que sur l'emboîtement de la surface de Fermi. Virosztek et Ruvalds supposent l'existence d'une surface de Fermi d'une part et, d'autre part, négligent des corrélations spatiales importantes en utilisant une densité d'états constante au niveau de Fermi. Or, pour des électrons évoluant sur un réseau bidimensionnel, non seulement la densité d'états non-renormalisées est singulière, mais certaines intégrales sur les vecteurs d'onde ne peuvent être remplacées par une intégrale sur la fréquence sans négliger des corrélations spatiales déterminantes. Dans cet ouvrage, tous ces effets seront pris en compte.

Une autre théorie phénoménologique importante est celle du liquide de Fermi quasi-antiferromagnétique de Pines *et al.* [55] [56]. Cette description suppose aussi l'existence de quasi-particules. Celles-ci sont couplées à des fluctuations de nature antiferromagnétique. Ce couplage est faible le long de la diagonale de la zone de Brillouin (*cold spots*). Il est par contre plus élevé loin de cette dernière (*hot spots*) de sorte que l'effet de ces fluctuations sur le poids spectral des quasi-particules a une anisotropie cohérente avec les mesures ARPES. En effet, les quasi-particules sont détruites près de la direction  $(0,0) \rightarrow (\pi,0)$  de la zone de Brillouin. Cependant, elles survivent dans la direction  $(0,0) \rightarrow (\pi,\pi)$ . Or, bien qu'il ne semble pas y avoir de pseudogap dans cette direction selon les mesures ARPES, l'existence des quasi-particules même dans cette direction est loin d'être certaine pour autant dans l'état normal.

Emery et Kivelson ont proposé pour leur part que la physique des SCHT était

tributaire des fluctuations de phase du paramètre d'ordre supraconducteur (gap) [23]. Dans un supraconducteur conventionnel, les fluctuations de phase ne sont pas très importantes et la température critique supraconductrice est celle obtenue par traitement champ moyen (théorie BCS). Par contre, dans un SCHT, la densité de porteurs supraconducteurs ( $n_s$ ) est faible et les fluctuations de phase conséquemment beaucoup plus importantes. La valeur de  $T_c$  est donc influencée par la température à laquelle la phase s'ordonne dans le matériau ( $T_\theta$ ). Lorsque  $T_c$  est plus faible que la température de transition champ moyen ( $T_c^{MF}$ ), des paires incohérentes sont déjà formées au-dessus de la transition supraconductrice et ce sont ces paires qui, selon cette théorie, sont responsables de l'existence d'un pseudogap dans le poids spectral de l'état normal sous-dopé.

Une description de la physique des SCHT faisant appel à une modulation de charge en forme de rayure (“stripes”) a également été proposée [65]. Le scénario est le suivant : partant de l'isolant antiferromagnétique que sont les SCHT non-dopés, il semble que les trous ajoutés aux plans  $\text{CuO}_2$  ont tendance à s'organiser en rayure lorsque le matériau est dopé. Ces rayures ont quelques pas du réseau de largeur et sont séparées les unes des autres par une distance comparable. La physique de cet “antiferro-aimant dilué” implique notamment l'existence d'un point critique quantique ( $T = 0$ ) à une valeur précise du dopage ( $x \approx 12\%$  pour du  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ). Ce point critique serait responsable des propriétés étranges de l'état normal au-dessus de la phase supraconductrice.

Ioffe et Millis ont proposé pour leur part l'existence de ce qu'ils appellent un liquide de spins [37]. Ce liquide serait un état intermédiaire se situant entre l'antiferro-aimant (un électron par site, fortes interactions électroniques) et le liquide de Fermi (faible densité d'électrons, faibles interactions électroniques) et correspondrait donc à ce fameux régime étrange de la phase normale au-dessus de la phase supraconductrice. Leur modèle implique, en plus des électrons se déplaçant sur un réseau et d'une interaction à courte portée, un terme d'interaction de jauge qui est traité en théorie des perturbations. Cette interaction est singulière. Ce liquide de spins possède des excitations fermioniques de spin 1/2, une surface de Fermi, une densité d'états constante au niveau de Fermi et un continuum particule-trou. Il est aussi caractérisé par des lois de puissance anormale dans les différents taux de relaxation et dans la susceptibilité uniforme. La partie imaginaire de la self-énergie obtenue dans cette théorie a un comportement  $\Sigma'' \sim -|\omega|^{2/3}$ .

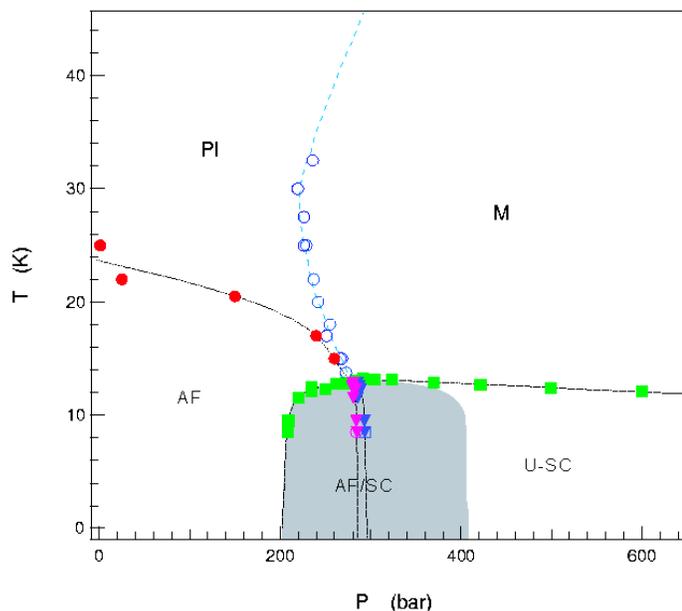


FIG. 1.9: Diagramme de phase température vs pression du  $\kappa$ -(BEDT-TTF) $_2$ Cu-[N(CN) $_2$ ]Cl [42].

Ces scénarios, tout aussi valables soient-ils, sont phénoménologiques. L'analyse que nous présentons dans cet ouvrage repose plutôt sur un hamiltonien microscopique.

## 1.6 Supraconducteurs organiques

Les supraconducteurs organiques ont des analogies frappantes avec les supraconducteurs à haute température critique. Bien qu'ils ne font pas vraiment partie des motivations de cet ouvrage, il serait difficile de terminer ce chapitre sans les mentionner brièvement.

Le diagramme de phase température vs pression du composé  $\kappa$ -(BEDT-TTF) $_2$ -Cu[N(CN) $_2$ ]Cl est présenté sur la figure 1.9 [42]. La pression joue ici un peu le même rôle que le dopage dans le cas des SHT. C'est aussi un paramètre plus facile à contrôler. Comme pour les SHT, une phase antiferromagnétique (AF) est voisine de la phase supraconductrice (U-SC). Cette phase apparaît quand la pression est suffisamment élevée de la même manière qu'elle apparaît dans les SHT quand ils sont suffisamment dopés. Chose remarquable, il existe une région du diagramme où la phase antiferromagnétique coexiste avec la phase supraconductrice. Par ailleurs,

la phase supraconductrice n'est pas conventionnelle dans ces matériaux. De même, l'état métallique (M) au-dessus de cette phase a des caractéristiques différentes de celles d'un métal ordinaire. Au-dessus de la phase antiferromagnétique se trouve un isolant paramagnétique (PI). Ces analogies avec les SCHAT suggèrent que ces deux familles de matériaux ont une physique qui est proche l'une de l'autre.

# Chapitre 2

## Modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard fut introduit presque simultanément au début des années soixante par Gutzwiller [32], Hubbard [36] et Kanamori [38]. Au départ, ce modèle était motivé par le problème de la physique microscopique des métaux de transition.

### 2.1 Hamiltonien du modèle

Le hamiltonien du modèle s'écrit comme suit :

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_{\mathbf{i}} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

où  $t_{i,j}$  est l'intégrale de saut entre les sites  $\mathbf{r}_i$  et  $\mathbf{r}_j$ ,  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) est un opérateur qui crée (détruit) un électron de spin  $\sigma$  sur le site  $\mathbf{r}_i$ ,  $U$  est l'interaction répulsive entre deux électrons sur un même site atomique et  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  est l'opérateur d'occupation. Les opérateurs fermioniques obéissent aux relations d'anticommutation habituelles :

$$\begin{aligned} \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{i,j} \delta_{\sigma\sigma'}, \\ \{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} &= 0. \end{aligned}$$

L'interaction  $U$  est de nature coulombienne et est définie par

$$U \equiv \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 |\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)|^2$$

où  $\phi(\mathbf{r})$  est un état de Wannier.

Ce hamiltonien est donc composé de deux termes qui correspondent à deux tendances très différentes du système. Le premier,

$$H^0 = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma},$$

constitue ce qu'il convient d'appeler le terme de bande. Dans la base des états de Wannier, c'est le terme qui permet aux électrons de sauter d'un site atomique à un autre. De ce terme vient la tendance du système à la délocalisation des électrons i.e. à un comportement métallique. Il est diagonal dans la base des états de Bloch. L'indice  $\mathbf{k}$  est un vecteur d'impulsion cristalline.

Le second terme du hamiltonien est le terme d'interaction entre les électrons :

$$H_U = U \sum_{\mathbf{i}} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

Ce terme a tendance à localiser les électrons sur leurs sites respectifs. Les deux termes du hamiltonien de Hubbard ont donc des effets opposés. Pour des fermions avec spin, c'est le modèle le plus simple réunissant ces deux tendances [24].

### 2.1.1 Limite de bande et limite atomique

Ce modèle en apparence simple tient toute sa complexité des deux tendances opposées venant des termes d'énergie cinétique et d'interaction. Pris isolément, la physique de ces deux termes est triviale. C'est leur conjonction qui donne au modèle toute sa richesse. Nous allons décrire brièvement ce qui se passe dans les limites  $U = 0$  et  $U \rightarrow \infty$  (ou  $t = 0$ ).

La limite de bande correspond au cas  $U = 0$ . Le hamiltonien devient

$$H_{U=0} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

La relation de dispersion  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  est déterminée par les  $t_{i,j}$ . Un cas important est celui du saut au premier voisin. Dans cette approximation, il n'y a des sauts qu'entre les voisins immédiats. Pour un réseau carré à deux dimensions, la relation de dispersion devient

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \cos(k_x a) - 2t \cos(k_y a)$$

où  $a$  est le pas du réseau. La densité d'états est nulle pour  $|\omega| > 4t$  et diverge logarithmiquement à  $\omega \rightarrow 0$ . Nous pouvons raffiner l'approximation en ajoutant un saut au second voisin ( $t'$ ) :

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \cos(k_x a) - 2t \cos(k_y a) - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a).$$

Le chapitre 3 est consacré aux propriétés non-triviales des fluctuations de spin et de charge dans cette limite.

L'autre limite du modèle est celle où  $t = 0$ . C'est la limite atomique car chaque site du réseau est complètement décorrélé des autres sites. En supposant qu'un électron sur un site a une énergie  $\epsilon_{at}$ , les états d'énergie pour chacun des sites sont  $0$ ,  $\epsilon_{at}$ ,  $2\epsilon_{at} + U$ .

Il est intéressant de mentionner que ni l'une ni l'autre des deux limites ne peut faire apparaître d'ordre dans le système. L'état fondamental du terme de bande est une mer de Fermi. Les états propres sont localisés dans l'espace des vecteurs d'onde. Celui de la limite atomique ne contient pas non plus d'ordre à longue portée car tous les sites sont décorrélés. Les états propres sont localisés dans l'espace réel. C'est donc la conjonction des deux termes qui rend possible l'apparition d'ordre dans le système d'électrons.

## 2.1.2 Propriétés exactes

Le modèle de Hubbard est invariant sous une transformation de rotation des spins. Cette propriété est évidente pour le terme de bande. Cette invariance est explicite pour le terme d'interaction s'il est écrit sous la forme [24]

$$H_U = \frac{U\hat{N}}{2} - \frac{2U}{3} \sum_i \mathbf{S}_i^2$$

où  $\hat{N}$  est l'opérateur nombre.

En général, le modèle ne possède pas la symétrie particule-trou. Cependant, cette symétrie est respectée pour un cas particulier important qui reviendra tout au long

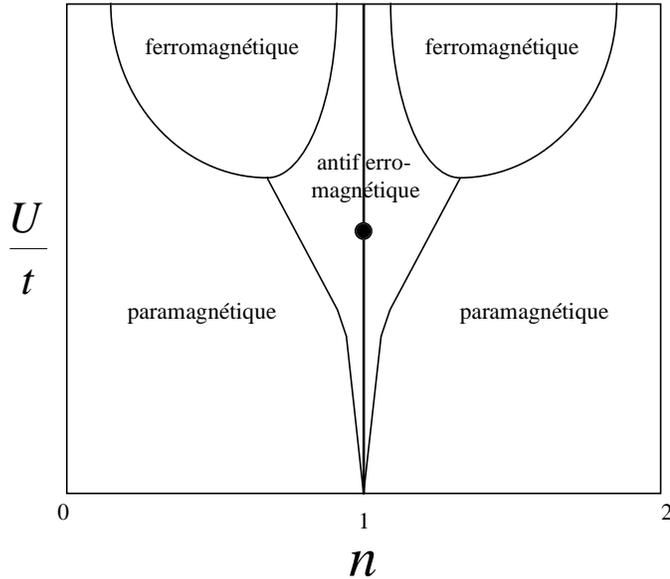


FIG. 2.1: Diagramme de phase schématique  $U/t$  vs  $n$  pour l'état fondamental ( $T = 0$ ) du modèle de Hubbard tel qu'obtenu par champ moyen ( $d \geq 2$ ). Le point noir marque la transition de Mott [34] [60].

de cet ouvrage : la bande à demi-remplie sans saut au second voisin. Le potentiel chimique est alors donnée par  $\mu = U/2$ . Pour cette valeur du potentiel chimique, le hamiltonien est invariant sous la transformation particule-trou.

### 2.1.3 État fondamental

La figure 2.1 montre un diagramme de phase schématique obtenu par champ moyen pour l'état fondamental du modèle sur un réseau carré ou cubique ( $d \geq 2$ ) sans saut au second voisin [34] [60]. Le nombre moyen d'électrons par site atomique (remplissage) est donné par  $n$ . À  $n = 1$ , le système développe un ordre antiferromagnétique même pour une interaction infinitésimale. Si le rapport  $U/t$  est suffisamment élevé et que l'ordre antiferromagnétique est frustré, c'est aussi un isolant de Mott. Hors demi-remplissage, ce diagramme champ moyen est controversé.

## 2.2 Un modèle pour les SCHT

Anderson proposa en 1987 que le modèle de Hubbard pouvait être un bon modèle pour comprendre la physique des SCHT [3]. Son approche était basée sur la notion de liaison de valence résonante [2]. Nous allons apporter ici quelques arguments justifiant l'étude de ce modèle dans le contexte de la supraconductivité à haute température.

Le modèle que nous avons présenté jusqu'ici ne contient qu'une seule bande. Ce n'est pas le cas pour la structure de bande des SCHT. Or, les processus qui nous intéressent sont ceux qui se déroulent au voisinage de l'énergie de Fermi. Pour ces processus de basse énergie, la structure de bande des SCHT est telle qu'il est possible de travailler avec une seule bande effective. En d'autres termes, il est permis de supposer que les électrons voyagent dans les plans d'oxyde de cuivre en passant d'un site  $\text{CuO}_2$  effectif à un autre. De cette façon, il n'y a qu'un seul état électronique par site du réseau et donc une seule bande à considérer.

Le modèle de Hubbard avec lequel nous allons travailler tout au long de cet ouvrage est bidimensionnel. Nous savons que les SCHT sont fortement anisotropes et que les phénomènes électroniques qui nous intéressent sont essentiellement confinés aux plans  $\text{CuO}_2$ . Ces considérations justifient l'emploi d'un modèle à deux dimensions [17]. Nous négligeons donc les couplages interplans. Cette approximation exclut l'apparition d'ordre à longue portée à température finie en vertu du théorème de Mermin-Wagner [54]. L'emploi d'un modèle bidimensionnel n'est donc justifié qu'au-dessus de la température de transition supraconductrice ou antiferromagnétique.

L'utilisation d'un tel modèle dans le contexte de la supraconductivité suppose que le magnétisme est un ingrédient incontournable dans notre quête de la compréhension des mécanismes microscopiques inhérents aux SCHT. Cette hypothèse vient tout naturellement du fait que les phonons ne semblent pas, contrairement à ce qui se passe dans la supraconductivité conventionnelle, y jouer un rôle déterminant. De plus, le modèle à demi-rempli représente bien un composé comme le  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . Il est donc légitime de croire qu'un composé comme le  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  sera bien décrit par le même modèle dont le remplissage de la bande aura été modifié en conséquence.

Parce qu'il ne contient qu'une interaction exclusivement locale, il est possible qu'il n'y ait pas de phase supraconductrice dans le modèle de Hubbard. Ceci peut sembler être une lacune importante si les SCHT font l'objet de notre travail. Or, ce modèle peut quand même être suffisant pour expliquer les propriétés électroniques de l'état normal sous-dopé des SCHT. De plus, c'est le modèle le plus simple et sa physique

n'est pas encore comprise. Il est donc impératif de le comprendre avant de s'attaquer à un modèle plus réaliste.

## 2.3 Solutions approximatives du modèle de Hubbard

Dans cette section, nous allons présenter brièvement quelques approches approximatives pour solutionner le modèle de Hubbard. Nous ne parlerons pas pour l'instant des méthodes que nous utiliserons dans cet ouvrage. Celles-ci sont expliquées en détails dans les chapitres qui suivent.

La version unidimensionnelle du modèle de Hubbard est intégrable [70] et admet une solution exacte par ansatz de Bethe [13] [43]. L'approche du champ moyen dynamique présentée plus bas fournit une solution exacte du modèle dans la limite  $d \rightarrow \infty$ . Pour le cas  $d = 2$ , nous sommes malheureusement limités à des méthodes approximatives.

### 2.3.1 Champ moyen dynamique ( $d \rightarrow \infty$ )

Dans cette approche, on introduit une action effective donnée par [28]

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_{0\sigma}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau) + U \int_0^\beta d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau).$$

Cette action ne décrit que la dynamique locale du modèle. La fonction  $\mathcal{G}_0(\tau)$  est l'équivalent d'un champ moyen de Weiss. L'idée de cette approche est de ne s'intéresser qu'à un seul site du réseau (ici  $i = 0$ ). Le reste du réseau est un réservoir externe à ce site ayant les mêmes propriétés locales. Ce réservoir influence la création et l'annihilation d'électrons sur le site  $i = 0$  et ces processus sont contrôlés par la fonction  $\mathcal{G}_0(\tau)$ . La dynamique quantique du problème n'est pas perdue car  $\mathcal{G}_0(\tau)$  est une fonction du temps. Par contre, aucune corrélation spatiale n'est réellement prise en compte.

Dans le cadre de cette approximation, le modèle de Hubbard devient un problème d'impureté en contact avec une bande électronique dont la structure est calculée de façon auto-cohérente. Il existe différentes méthodes pour résoudre ce problème d'impureté.

La solution du modèle obtenue par champ moyen dynamique devient exacte dans la limite où le nombre de coordination du site  $i = 0$  devient très grand. Autrement dit, quand la dimension du système devient infinie.

Cette méthode prévoit une transition métal-isolant de Mott à  $U$  suffisamment élevé et à demi-remplissage. Cette question a fait l’objet d’une abondante littérature [28] [66]. Si le réseau n’est pas trop frustré ( $t' \ll t$ ), la méthode prévoit également l’existence d’une phase antiferromagnétique.

Le fait de négliger la dépendance spatiale du problème est une lacune trop importante pour que le champ moyen dynamique soit applicable au cas  $d = 2$ . Les résultats ARPES montrent que la self-énergie dépend fortement du vecteur d’onde. Il reste malgré tout une bonne approximation du cas  $d = 3$  comme l’ont montré des comparaisons avec le composé de  $V_2O_3$  [52] [64].

### 2.3.2 Simulations Monte-Carlo quantique (SMCQ)

Les SMCQ ont été largement utilisées dans l’étude du modèle de Hubbard. Bien que limitées pour plusieurs raisons, elles sont utiles pour comprendre la physique du modèle et pour justifier d’autres approches théoriques. Il existe plusieurs méthodes de SMCQ. Mentionnons l’algorithme connu sous le nom de “méthode du déterminant”, développé par Blankenbecler, Scalapino et Sugar [15]. Cette approche a ensuite été appliquée au modèle de Hubbard par Hirsch [34] puis par White *et al.* [83].

Les méthodes de SMCQ sont limitées à l’étude de réseaux de petite taille ( $N \leq 16^2$ ). À basse température, les effets de taille finie sont souvent importants et affectent les résultats de la simulation. De plus, toutes les quantités physiques obtenues sont exprimées en temps imaginaire. Il faut donc effectuer un prolongement analytique si on s’intéresse à des quantités dynamiques. Ce prolongement peut être fait à l’aide de la méthode d’entropie maximum, mais les résultats sont souvent difficiles à justifier. Enfin, le problème du signe du déterminant limite les simulations à basse température dans de nombreuses circonstances, notamment hors demi-remplissage. Par contre, lorsqu’on s’intéresse à des quantités locales et statiques, les problèmes de taille finie sont moins encombrants et le prolongement analytique inutile. Les SMCQ peuvent alors nous fournir beaucoup de renseignements fiables sur la physique du modèle.

Une question importante abordée dans les études par SMCQ concerne l’existence d’un pseudogap dans le modèle de Hubbard à demi-rempli sans saut au second voisin. Vekić et White furent les premiers à se pencher sur cette question [76]. Ils trouvèrent

un pseudogap dans le poids spectral pour des réseaux de petites tailles mais concluent qu'il s'agissait d'un effet de taille finie. Le pseudogap semblait disparaître à taille plus élevée.

Une étude récente menée par Moukouri *et al.* [58] arrive cependant à des conclusions différentes. Selon ces travaux auxquels nous avons participé, le pseudogap n'est pas un effet de taille et survit à la limite thermodynamique. Toute la difficulté vient du fait que le poids spectral est une quantité dynamique qui nécessite un prolongement analytique à partir de la fonction de Green  $G(\mathbf{k}, \tau)$ . Ce prolongement, effectué par entropie maximum, est très sensible à la précision des données Monte-Carlo. Si la précision des données est insuffisante, le prolongement analytique a tendance à combler le pseudogap. C'est la raison pour laquelle Vekić et White seraient probablement arrivés à une conclusion erronée.

### 2.3.3 Méthode FLEX (*fluctuation exchange*)

La méthode FLEX a été proposée par Bickers et Scalapino [14]. C'est une approche basée sur le formalisme conservatif de Baym et Kadanoff [7] [8]. Cette méthode a été très utilisée pour étudier le modèle de Hubbard. Elle satisfait le théorème de Luttinger [48]. De plus, la thermodynamique obtenue par la fonction de Green est cohérente avec celle obtenue par l'énergie libre.

L'idée est de calculer une self-énergie à partir de trois classes de diagrammes dans les canaux particule-trou et particule-particule. Les diagrammes sont choisis pour inclure dans le calcul les effets des fluctuations de charge, de spin et de paire. L'équation à résoudre est la suivante :

$$\Sigma_{\sigma}(k) = \frac{1}{N} \sum_q [G(k-q)V^{(2)}(q) + G(k-q)V^{(ph)}(q) + G(-k+q)V^{(pp)}(q)]$$

avec

$$\begin{aligned}
V^{(2)}(q) &= U^2 \chi_{ph}(q), \\
V^{(ph)}(q) &= \frac{1}{2} U^2 \chi_{ph}(q) \left[ \frac{1}{1 + U \chi_{ph}(q)} - 1 \right] + \frac{3}{2} U^2 \chi_{ph}(q) \left[ \frac{1}{1 - U \chi_{ph}(q)} - 1 \right], \\
V^{(pp)}(q) &= -U^2 \chi_{pp}(q) \left[ \frac{1}{1 + U \chi_{pp}(q)} - 1 \right], \\
\chi_{ph}(q) &= -\frac{\beta}{N} \sum_k G(k+q)G(k) \\
\text{et } \chi_{pp}(q) &= \frac{\beta}{N} \sum_k G(k+q)G(-k)
\end{aligned}$$

où  $k = (\mathbf{k}, ik_n)$  et  $q = (\mathbf{q}, iq_n)$ . La fonction de Green  $G(k)$  est habillée i.e. qu'elle contient la self-énergie  $\Sigma_\sigma(k)$ . Le calcul nécessaire pour résoudre ce système d'équations est donc hautement auto-cohérent.

Bien que largement employée, cette approche soulève un certain nombre d'interrogations. D'abord, les diagrammes du développement de la self-énergie sont choisis de façon arbitraire et ce choix peut très bien ne pas s'avérer judicieux. Ensuite, le calcul auto-cohérent est presque impossible à faire autrement qu'en fréquences imaginaires. Un prolongement analytique doit donc être fait pour obtenir des quantités dynamiques. La méthode des approximants de Padé [77] est généralement utilisée à cette étape du calcul. Or, il a été démontré par Beach *et al.* [9] que les données en fréquences imaginaires doivent être d'une précision fabuleuse pour que les résultats du prolongement soient fiables.

Une autre faiblesse de la méthode FLEX est qu'elle suppose implicitement l'existence d'un théorème de Migdal pour les interactions électron-électron. Rien ne permet de croire que les corrections de vertex sont négligeables dans ce contexte [80]. Elles devraient donc être prises en compte, ce que FLEX ne fait pas.

Enfin, l'étude de SMCQ de Moukouri *et al.* [58] a démontré l'existence d'un pseudogap dans le modèle de Hubbard à demi-rempli ( $t' = 0$ ). L'approche FLEX est impuissante [22] à reproduire ce résultat des simulations.



# Chapitre 3

## Fluctuations dans les systèmes d'électrons libres sur réseau

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser aux fluctuations de spin et de charge dans les systèmes d'électrons sans interactions. Nous verrons comment la géométrie de la surface de Fermi, la structure de bande et la dimensionnalité influencent les fluctuations. Les termes “électrons libres” seront employés ici pour désigner un système d'électrons qui n'interagissent pas entre eux. Ceux-ci peuvent cependant évoluer sur un réseau. En négligeant les interactions, nous excluons d'emblée la possible apparition d'ordre dans le système. L'effet des interactions sur les fluctuations sera étudié au chapitre 5.

### 3.1 Considérations générales

En temps imaginaire, la composante longitudinale des fluctuations de spin est donnée par :

$$\chi_{sp}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = \langle T_\tau S_z(\mathbf{r}_i, \tau) S_z(\mathbf{r}_j, 0) \rangle - \langle S_z(\mathbf{r}_i, \tau) \rangle \langle S_z(\mathbf{r}_j, 0) \rangle \quad (3.1)$$

où  $S_z(\mathbf{r}_i, \tau) = n_{i\uparrow}(\tau) - n_{i\downarrow}(\tau)$  est proportionnel à la composante de spin selon  $z$  sur le site  $\mathbf{r}_i$ . Quand le système est paramagnétique, les deux états de spin sont équiprobables et le spin moyen sur un site est nul ( $\langle S_z(\mathbf{r}_i, \tau) \rangle = 0$ ). De la même manière, les fluctuations de charge sont données par

$$\chi_{ch}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = \langle \rho(\mathbf{r}_i, \tau) \rho(\mathbf{r}_j, 0) \rangle - \langle \rho(\mathbf{r}_i, \tau) \rangle \langle \rho(\mathbf{r}_j, 0) \rangle \quad (3.2)$$

où  $\rho(\mathbf{r}_i, \tau) = n_{i\uparrow}(\tau) + n_{i\downarrow}(\tau)$  est proportionnel à la charge totale sur un site.

Nous adoptons la convention suivante pour les transformées de Fourier :

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) = \sum_{\mathbf{r}} \int_0^\beta d\tau e^{iq_n\tau - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \chi(\mathbf{r}, \tau) \quad \text{avec } q_n = 2\pi nT, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Les fluctuations en fréquences réelles sont obtenues par le prolongement analytique  $iq_n \rightarrow \omega + i\eta$  avec  $\eta = 0^+$  :

$$\chi(\mathbf{q}, iq_n) \xrightarrow{iq_n \rightarrow \omega + i\eta} \chi(\mathbf{q}, \omega) = \chi'(\mathbf{q}, \omega) + i\chi''(\mathbf{q}, \omega).$$

Contrairement à  $\chi(\mathbf{q}, iq_n)$ , la fonction  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  se mesure expérimentalement. En théorie de la réponse linéaire, on montre que  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  est la réponse à un faible champ externe. Cette fonction est donc une susceptibilité.

Pour finir cette section, nous allons énumérer sans preuve quelques propriétés importantes de la susceptibilité. Les parties réelle et imaginaire sont respectivement paire et impaire en fréquence :

$$\chi'(\mathbf{q}, -\omega) = \chi'(\mathbf{q}, \omega), \quad \chi''(\mathbf{q}, -\omega) = -\chi''(\mathbf{q}, \omega).$$

Le signe de la dissipation est donné par le signe du produit  $\omega\chi''(\mathbf{q}, \omega)$ . Le système doit logiquement être dissipatif, d'où

$$\omega\chi''(\mathbf{q}, \omega) > 0,$$

ce qui implique que  $\chi''(\mathbf{q}, \omega) > 0$  pour toutes les fréquences positives. Enfin,  $\chi'(\mathbf{q}, \omega)$  et  $\chi''(\mathbf{q}, \omega)$  obéissent aux relations de causalité de Kramers-Kronig :

$$\chi'(\mathbf{q}, \omega) = P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega}, \quad \chi''(\mathbf{q}, \omega) = -P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi'(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - \omega}. \quad (3.3)$$

## 3.2 Cas sans interactions

À  $U = 0$ , nous pouvons utiliser le théorème de Wick pour simplifier les expressions 3.1 et 3.2 car le hamiltonien de Hubbard devient quadratique. Il appert que les fluctuations de spin sont alors identiques aux fluctuations de charge :

$$\begin{aligned}
\chi_{sp}^0(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) &= \chi_{ch}^0(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) \equiv \chi^0(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) \\
&= -\left\langle T_\tau c_{j\uparrow} c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) \right\rangle_0 \left\langle T_\tau c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger \right\rangle_0 - \left\langle T_\tau c_{j\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) \right\rangle_0 \left\langle T_\tau c_{i\downarrow}(\tau) c_{j\downarrow}^\dagger \right\rangle_0 \\
&= -2G^0(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i, -\tau)G^0(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau)
\end{aligned}$$

où  $G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = -\left\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(0) \right\rangle$  est la fonction de Green à une particule. Nous verrons au chapitre 5 que l'effet des interactions est très différent sur ces deux types de fluctuations. En fréquence de Matsubara et en vecteur d'onde,  $\chi^0$  est une convolution de fonctions de Green dont la somme sur les fréquences peut être évaluée exactement :

$$\chi^0(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{2T}{N} \sum_{\mathbf{k}, ik_m} G^0(\mathbf{k}, ik_m) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_m + iq_n) \quad (3.4)$$

$$\text{avec } G^0(\mathbf{k}, ik_m) = \frac{1}{ik_m - \xi_{\mathbf{k}}^0} \Rightarrow \chi^0(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}{iq_n + \xi_{\mathbf{k}}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0}$$

où  $f(\omega) = (e^{\beta\omega} + 1)^{-1}$  est la distribution de Fermi-Dirac,  $\xi_{\mathbf{k}}^0 = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^0$ ,  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  est la relation de dispersion des électrons libres et  $\mu^0$  le potentiel chimique calculé à  $U = 0$  pour un remplissage  $n$ . Cette expression pour la susceptibilité est la fonction de Lindhard. En fréquence de Matsubara,  $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$  est réel et paire. En fréquence réelle, le résultat 3.4 devient :

$$\chi^{0r}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{2}{N} P \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\xi_{\mathbf{k}}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}{\omega + \xi_{\mathbf{k}}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0} \quad (3.5)$$

$$\chi^{0i}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\pi}{N} \sum_{\mathbf{k}} [f(\xi_{\mathbf{k}}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)] \delta(\omega + \xi_{\mathbf{k}}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0).$$

La conservation de l'énergie  $\omega + \xi_{\mathbf{k}}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 = 0$  n'est imposée que dans la partie imaginaire. La réponse du système à un champ externe inclut à la fois des processus virtuels et réels de création de paires électron-trou. Les processus réels i.e. ceux qui conservent l'énergie sont associés à la dissipation.

Le diagramme de susceptibilité  $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$  est représenté sur la figure 3.1. La fluctuation est un processus impliquant la création puis l'annihilation d'une paire électron-trou. Aucun autre processus ne vient habiller la bulle car l'électron et le trou n'interagissent pas avec l'environnement.

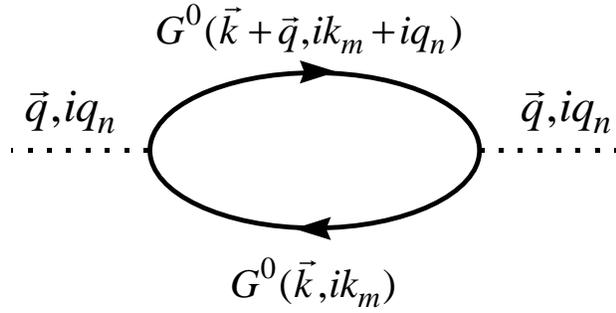


FIG. 3.1: Bulle de susceptibilité  $\chi^0(q, iq_n)$ .

### 3.3 Susceptibilité des électrons libres dans le continuum

Dans le continuum, les électrons obéissent à la relation de dispersion  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2$ . Pour des raisons de commodité, nous avons posé  $m = 1/2$  où  $m$  est la masse effective des électrons. À deux dimensions, la surface de Fermi est circulaire.

#### 3.3.1 Bande liaison forte faiblement remplie

Considérons le cas des électrons libres dans une bande liaison forte. Nous allons voir que la relation de dispersion devient quadratique quand le remplissage est faible. Pour un réseau carré bidimensionnel, la relation de dispersion s'écrit ( $t' = 0$ ) :

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)).$$

À partir d'ici et pour le reste de cet ouvrage, nous utiliserons la convention  $t, a, k_B, \hbar \equiv 1$ . Les quantités qui ont la dimension d'une énergie seront exprimées en unité de  $t$  et les longueurs en unité de  $a$ . La température et les fréquences auront la dimension d'une énergie et les vecteurs d'onde celle d'une impulsion.

Le remplissage de la bande est le nombre moyen d'électrons par site atomique  $n = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle$ . Contrairement au cas du continuum, la géométrie de la surface de Fermi dépend de la valeur de  $n$ . Elle est convexe pour  $n < 1$  et concave pour  $1 < n < 2$ . À faible remplissage, la surface de Fermi est circulaire (voir figure 3.2). En l'absence de saut au second voisin, les surfaces de Fermi pour  $n$  et  $2 - n$  sont reliées par la transformation particule-trou.

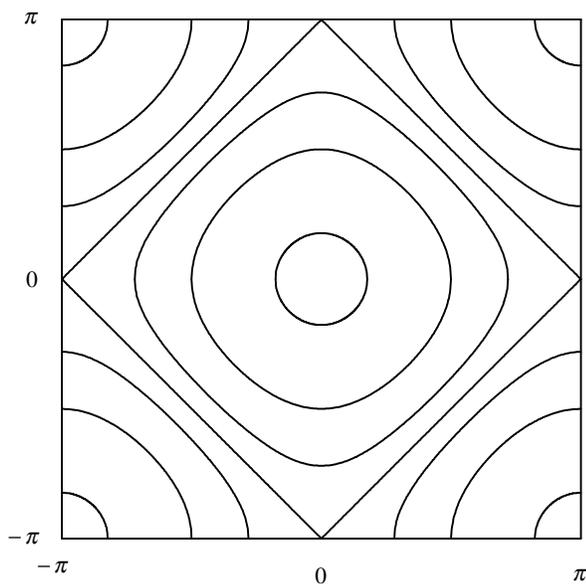


FIG. 3.2: Surfaces de Fermi d'une bande liaison forte pour différents remplissages (à partir du centre :  $n = 0,05, 0,37, 0,70, 1,00, 1,30, 1,63, 1,95$ ).

Une surface de Fermi quasi-circulaire n'est pas une condition suffisante pour que la limite du faible remplissage donne le continuum. Les processus qui se déroulent loin de la surface de Fermi subiront les effets de la bande. Pour que la relation de dispersion soit approximativement quadratique, il ne faut s'intéresser qu'aux petits vecteurs d'onde :

$$\xi_{\mathbf{k}} = -2(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - \mu^0 \overset{k \text{ petit}}{\approx} \mathbf{k}^2 - (\mu^0 + 4) = \mathbf{k}^2 - k_F^0{}^2.$$

Cette limite motive le choix  $m = 1/2$  pour la masse effective des électrons. Notons également le déplacement du potentiel chimique.<sup>1</sup>

---

<sup>1</sup>La limite du continuum peut aussi être obtenue en prenant  $t \rightarrow \infty$  et  $a \rightarrow 0$  en gardant le produit  $ta^2$  constant de telle sorte que  $ta^2 = 1/2m$ .

### 3.3.2 Calcul de $\chi^{0''}$ à température nulle

Calculons maintenant la partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres dans le continuum. En coordonnées polaires, l'équation 3.5 devient

$$\begin{aligned}\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &= 2\pi \int_0^\infty \frac{kdk}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0)] \delta(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty kdk \int_0^{2\pi} d\theta [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)] \delta(\omega - 2kq \cos(\theta))\end{aligned}$$

avec  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} \equiv kq \cos(\theta)$ . L'intégrale est effectuée sur l'angle  $\theta$  :

$$\begin{aligned}\chi^{0''}(q, \omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{|\omega|/2q}^\infty kdk \frac{f(\xi - \omega/2) - f(\xi + \omega/2)}{\sqrt{4k^2q^2 - \omega^2}} \\ \text{avec } \xi &\equiv k^2 + q^2/4 - k_F^0{}^2.\end{aligned}\tag{3.6}$$

$\chi^{0''}(q, \omega)$  ne dépend que de  $q = |\mathbf{q}|$ , conséquence de l'isotropie du système. Commençons par regarder les propriétés de  $\chi^{0''}(q, \omega)$  à température nulle. Pour  $\omega > 0$ , nous obtenons :

$$\begin{aligned}\chi^{0''}(q, \omega) &= \frac{1}{4\pi q^2} \left[ \sqrt{4k_2^2q^2 - \omega^2} - \sqrt{4k_1^2q^2 - \omega^2} \right] \\ \text{avec } k_1 &= \max \left\{ \frac{\omega}{2q}; \sqrt{-\frac{\omega}{2} + k_F^0{}^2 - \frac{q^2}{4}} \right\} \\ \text{et } k_2 &= \sqrt{\frac{\omega}{2} + k_F^0{}^2 - \frac{q^2}{4}}.\end{aligned}\tag{3.7}$$

La figure 3.3 montre  $\chi^{0''}(q, \omega)$  en fonction de la fréquence à température nulle pour différents vecteurs d'onde. Les deux premières courbes font partie du cas  $q < 2k_F^0$ . Leur comportement est linéaire à basse fréquence. Le développement au premier ordre en fréquence de l'équation 3.7 est donné par

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi^{0''}(q, \omega) = \frac{\omega}{2\pi q \sqrt{4k_F^0{}^2 - q^2}} + O(\omega^3), \quad q < 2k_F^0 \quad \text{et} \quad \omega < 2q^2.\tag{3.8}$$

Il y a une discontinuité très apparente dans  $d\chi^{0''}/d\omega$  à une certaine fréquence  $\tilde{\omega}$ . Cette anomalie se produit quand la borne inférieure  $k_1$  change de comportement en fréquence. La conservation de l'énergie devient alors une contrainte plus difficile à satisfaire que le principe d'exclusion de Pauli. Pour calculer  $\tilde{\omega}$ , il faut poser  $\tilde{\omega}/2q = \sqrt{-\tilde{\omega}/2 + k_F^0{}^2 - q^2/4}$ . Nous trouvons

$$\tilde{\omega} = q(2k_F^0 - q).$$

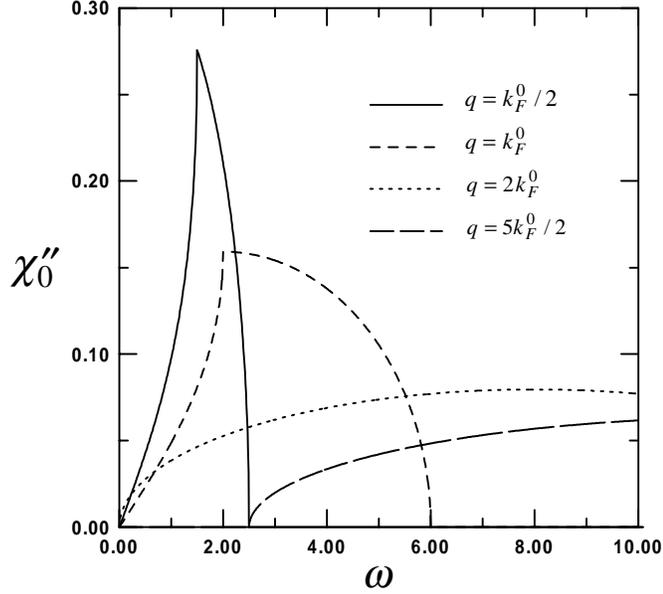


FIG. 3.3:  $\chi''_0$  dans le continuum vs  $\omega$  pour différents vecteurs d'onde .  $T = 0$ ,  $k_F^{0,2} = 2, 0$ .

La fonction  $\chi''_0(q, \omega)$  possède aussi une coupure à température nulle. En effet, à une certaine fréquence  $\omega_c$ , il n'est plus possible de satisfaire à la fois le principe de Pauli et la conservation de l'énergie. Les bornes  $k_1$  et  $k_2$  se rejoignent. Pour calculer  $\omega_c$ , il faut poser  $\omega_c/2q = \sqrt{\omega_c/2 + k_F^{0,2} - q^2/4}$ . Nous trouvons

$$\omega_c = q(2k_F^0 + q).$$

La figure 3.3 montre également deux courbes de susceptibilité pour des vecteurs d'onde  $q \geq 2k_F^0$ . Le développement 3.8 ne s'applique plus car le coefficient du terme linéaire en  $\omega$  devient imaginaire. Pour obtenir le comportement de  $\chi''_0(q = 2k_F^0, \omega)$ , il faut fixer la valeur de  $q = 2k_F^0$  avant de prendre la limite  $\omega \rightarrow 0$ . À partir de l'équation 3.7, nous obtenons :

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi''_0(q = 2k_F^0, \omega) = \frac{1}{2\pi q} \sqrt{\frac{\omega}{2}} + O(\omega).$$

Quand  $q > 2k_F^0$ , un gap de basse fréquence apparaît dans  $\chi''_0(q, \omega)$ . La nature de ce gap est facile à voir. Un vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  plus grand que le diamètre de la surface de Fermi ne peut pas relier un état occupé immédiatement sous la surface de Fermi à un état vacant tout juste au-dessus de la surface de Fermi. Mathématiquement,

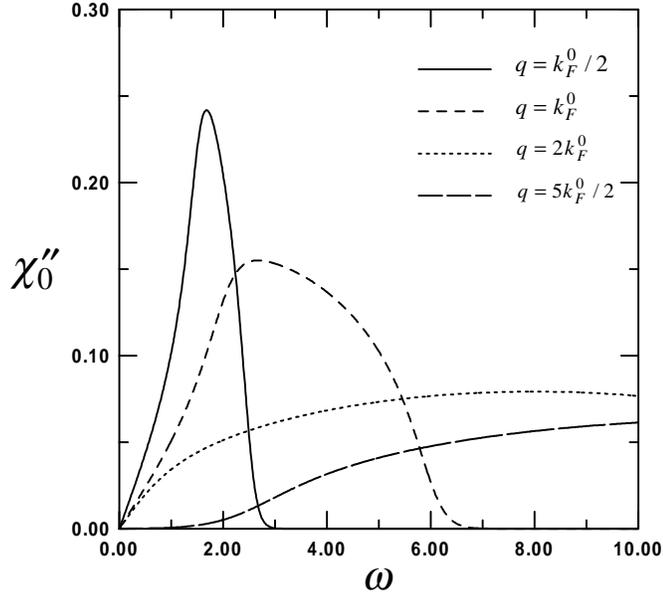


FIG. 3.4:  $\chi_0''$  dans le continuum vs  $\omega$  pour différents vecteurs d'onde.  $T = 0, 2$ ,  $k_F^0 = 2, 0$ .

$\chi_0''(q > 2k_F^0, \omega)$  prend une valeur non-nulle quand la borne supérieure  $k_2$  devient plus grande que la borne inférieure  $k_1$ . On montre facilement que

$$\chi_0''(q > 2k_F^0, \omega < \omega_g) = 0 \quad \text{avec } \omega_g = q(q - 2k_F^0).$$

La dernière courbe de la figure 3.3 possède un tel gap.

### 3.3.3 Effet de la température

Étudions maintenant l'effet de la température sur  $\chi_0''$ . Les mêmes courbes de susceptibilité sont tracées à une température finie sur la figure 3.4. La température a adouci les deux courbes  $q < 2k_F^0$ . La fréquence  $\tilde{\omega}$  correspond maintenant à la position d'un maximum. Les coupures, y compris  $\omega_g$ , sont étalées sur un intervalle de l'ordre de  $\pi T$ . Enfin, il appert que le développement linéaire en fréquence est justifié même pour le cas  $q = 2k_F^0$ . En effet, à l'aide de

$$f(\xi - \omega/2) - f(\xi + \omega/2) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\approx} \omega \frac{f(\xi)f(-\xi)}{T},$$

et de l'équation 3.6, on prouve que

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_0''(q, \omega) = \frac{\omega}{2\pi q} \int_0^\infty \frac{f(\xi)f(-\xi)}{T} dk + O(\omega^3)$$

où le coefficient du terme linéaire en  $\omega$  est bien défini si  $|\omega| \ll \pi T$  et  $|\omega|/2q \ll 1$ . Ce résultat n'est donc pas justifié dans la limite  $q \rightarrow 0$ .

### 3.4 Partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres dans une bande liaison forte

Étudions maintenant la susceptibilité du système d'électrons libres dans une bande liaison forte. Nous allons voir que la géométrie de la surface de Fermi et la structure de bande modifient substantiellement les propriétés à deux particules.

L'existence de singularités à  $q = 2k_F$  et leur effet sur le facteur de structure a déjà fait l'objet des travaux de Bénard *et al.* [11] [12]. Dans ce qui suit, nous allons montrer l'existence d'autres singularités en fréquence. Ces singularités existent pour tous les vecteurs d'onde. Bénard *et al.* se sont intéressés aussi au concept de pseudo-emboîtement i.e. à des surfaces de Fermi qui ont des segments de faible courbure (par opposition au parallélisme de segments différents de la même surface de Fermi, ce qui est l'emboîtement véritable). La courbure de la surface de Fermi ne nous intéressera qu'au chapitre 4 quand nous évaluerons l'effet des propriétés de  $\chi^{0''}$  sur le comportement des électrons.

Quand les électrons évoluent sur un réseau cristallin, l'invariance sous rotation est perdue. Toutefois, comme nous travaillons sur un réseau carré,  $\chi(\mathbf{q}, \omega)$  possède malgré tout les symétries suivantes :

$$\chi(q_x, q_y, \omega) = \chi(-q_x, q_y, \omega) = \chi(q_x, -q_y, \omega) = \chi(q_y, q_x, \omega).$$

Tout au long de cette section, nous poserons  $q_x, q_y > 0$  par commodité.

#### 3.4.1 Calcul de $\chi^{0''}$

Comme précédemment, nous utilisons l'équation 3.5 mais cette fois-ci, en coordonnées cartésiennes :

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_y}{2\pi} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0)] \delta(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0).$$

Nous allons intégrer le delta de Dirac sur  $k_y$ . Nous cherchons les valeurs de  $k_y = k_y^0$  qui satisfont la conservation de l'énergie, i.e.

$$[\omega + \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0]_{k_y=k_y^0} = \omega - 4 \sin(k_x) \sin(q_x/2) - 4 \sin(k_y^0) \sin(q_y/2) = 0 \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow \sin(k_y^0) = \frac{\omega/4 - \sin(k_x) \sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)} \quad (2 \text{ valeurs pour } k_y^0)$$

avec la condition suivante pour  $k_x$  :

$$\left| \frac{\omega/4 - \sin(k_x) \sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)} \right| \leq 1.$$

En utilisant

$$\begin{aligned} \delta(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0) &= \sum_{k_y^0} \frac{\delta(k_y - k_y^0)}{4 |\cos(k_y^0) \sin(q_y/2)|} \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k_y^0} \frac{\delta(k_y - k_y^0)}{\sqrt{\sin^2(q_y/2) - (\omega/4 - \sin(k_x) \sin(q_x/2))^2}}, \end{aligned}$$

nous trouvons :

$$\begin{aligned} \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} \frac{[f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0}}{\sqrt{\sin^2(q_y/2) - (\omega/4 - \sin(k_x) \sin(q_x/2))^2}} \quad (3.10) \\ &\times \theta(|\sin(q_y/2)| - |\omega/4 - \sin(k_x) \sin(q_x/2)|). \end{aligned}$$

Dans ce qui suit, nous laisserons tomber la fonction  $\theta$ . Par convention, nous couperons l'intervalle d'intégration quand le radical deviendra imaginaire. Notons que le calcul qui mène au résultat 3.10 n'est valable que si  $q_y \neq 0$ . Si  $q_y = 0$ , le delta de Dirac ne peut pas être intégré sur  $k_y$ . Nous pouvons contourner cette difficulté en utilisant la symétrie  $\chi^{0''}(q_x, q_y, \omega) = \chi^{0''}(q_y, q_x, \omega)$ . Dans le cas où  $q_x = q_y = 0$ ,  $\chi^{0''}(\mathbf{q} = 0, \omega) = 0 \forall \omega$ .

Il existe une coupure au-delà de laquelle  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$  est nul. Cette fréquence  $\omega_c$  est une fonction du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ . La valeur maximale que peut prendre la fréquence est donnée par le cas  $\sin(k_x) = \sin(k_y) = 1$  dans l'équation 3.9. Nous obtenons

$$\omega_c \equiv 4 [|\sin(q_x/2)| + |\sin(q_y/2)|].$$

La coupure maximale est  $\omega_c = 8$  pour le cas  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , ce qui correspond à la largeur de bande.

Le radical au dénominateur de l'équation 3.10 est une conséquence de la structure de bande. Ce dénominateur s'annule pour certaines valeurs de  $k_x = k_x^s$ . Ce sont également les coupures imposées par la fonction  $\theta$ . Des singularités doivent donc être intégrées pour obtenir la fonction  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$ . Une analyse détaillée de ces divergences est fournie dans l'annexe A. Il appert que ces singularités ne sont pas intégrables pour certaines fréquences. Les fréquences dites singulières sont données par

$$\omega_s = 4 |\sin(|q_x|/2) - \sin(|q_y|/2)|. \quad (3.11)$$

Quand  $q_x, q_y \neq 0$ , le comportement au voisinage d'une singularité est donné par

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \approx \omega_s) = -\ln \left| \frac{\omega_s - \omega}{\Delta^2} \right| \frac{[f(-\omega/2 - \mu^0) - f(\omega/2 - \mu^0)]}{16\pi \sqrt{\sin(q_x/2) \sin(q_y/2)}} + \dots \quad (3.12)$$

où  $\Delta \sim \min\{1, \pi T/W\}$ . Nous écrivons explicitement ce paramètre que dans les circonstances où sa dépendance en température pourra jouer un rôle physique important. La figure 3.5 montre quelques courbes de  $\chi^{0''}$  en fonction de la fréquence. Les singularités logarithmiques sont très visibles. Elles se déplacent vers les basses fréquences quand le vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  devient parallèle à une diagonale de la zone de Brillouin.

Le cas  $q_x = 0$  (ou  $q_y = 0$ ) donne un résultat différent. La coupure et la singularité sont alors au même endroit ( $\omega_c = \omega_s$ ). Le comportement singulier est donné par

$$\chi^{0''}(q_x = 0, q_y; \omega \lesssim \omega_s) = \frac{|\frac{1}{2}(\omega_s - \omega)|^{-1/2}}{8\pi \sqrt{\sin(q_y/2)}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0}. \quad (3.13)$$

La figure 3.6 nous montre quelques courbes de  $\chi^{0''}$  en fonction de la fréquence pour des cas où  $\omega_s = \omega_c$ .

La dérivation détaillée des résultats 3.12 et 3.13 est présentée dans l'annexe A.

### 3.4.2 Interprétation physique des fréquences singulières

Nous venons de voir que pour une bande liaison forte, la partie imaginaire de la susceptibilité contient des singularités. Nous savons exactement où se trouvent

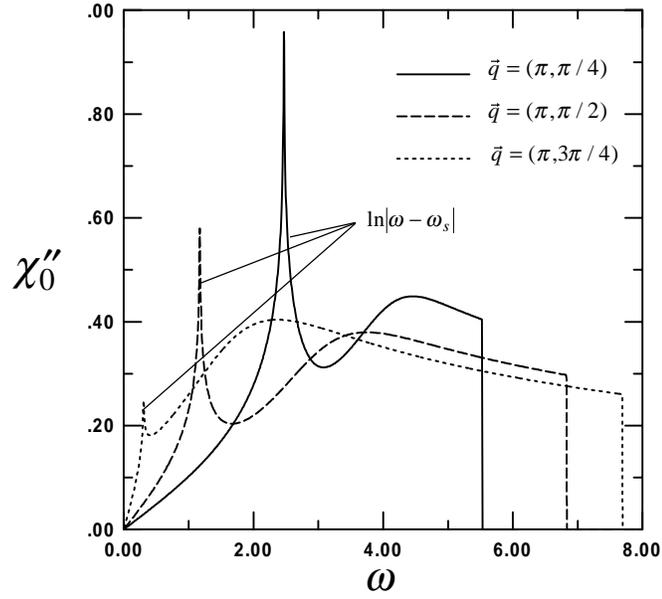


FIG. 3.5:  $\chi''_0$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  pour différents vecteurs d'onde.  $n = 1$ ,  $T = 0, 2$ ,  $\omega_s \neq 0$ ,  $\omega_s \neq \omega_c$ .

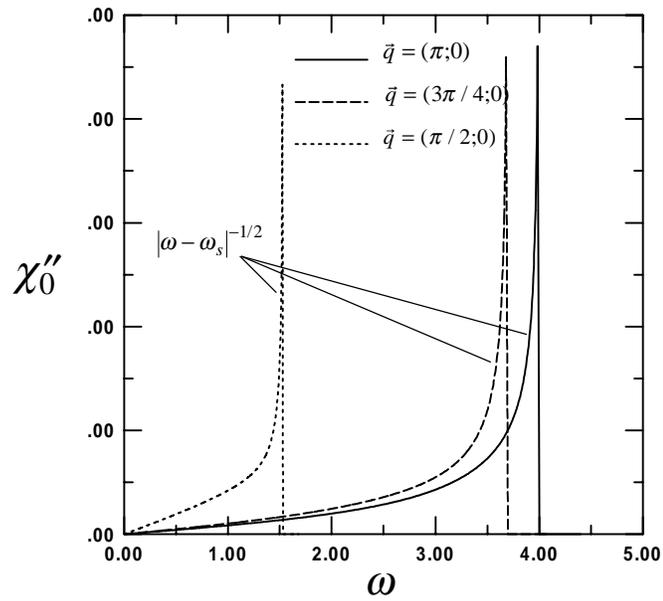


FIG. 3.6:  $\chi''_0$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  pour différents vecteurs d'onde.  $n = 1$ ,  $T = 0, 2$ ,  $\omega_s = \omega_c$ .

ces singularités et comment elles se comportent. Il s'agit d'un effet de la relation de dispersion liaison forte. Essayons d'y voir un peu plus clair.

Supposons qu'un électron sous la surface de Fermi au vecteur d'onde  $\mathbf{k} - \mathbf{q}/2$  est excité au-dessus de la surface de Fermi au vecteur d'onde  $\mathbf{k} + \mathbf{q}/2$  de telle sorte que  $\omega = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$ . Tous les vecteurs  $\mathbf{k}$  qui satisfont la relation doivent être considérés. Seuls la fréquence et le transfert d'impulsion  $\mathbf{q}$  sont imposés par le champ externe. Pour un  $\mathbf{k}$  donné, l'énergie de l'excitation particule-trou est  $E^{pt} = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$ . La vitesse de cette excitation est donnée par

$$\nabla_{\mathbf{k}} E^{pt} = (4 \cos(k_x) \sin(q_x/2); 4 \cos(k_y) \sin(q_y/2)).$$

Pour  $\mathbf{k} = (\pm \frac{\pi}{2}; \pm \frac{\pi}{2})$ , les deux composantes de la vitesse de l'excitation particule-trou s'annulent. Or, ce sont justement les vecteurs responsables des singularités de  $\chi^{0''}$ . Elles viennent donc des vecteurs  $\mathbf{k}$  pour lesquels la vitesse d'une excitation particule-trou s'annule et ce, quel que soit le vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ . Notons que la vitesse de l'excitation n'est rien d'autre que la différence des vitesses de l'électron et du trou  $v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} - v_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}$ .

D'un certain point de vue, ces vecteurs  $\mathbf{k}$  pour lesquels la vitesse de la paire électron-trou s'annule est analogue à une singularité de Van Hove. Les singularités de Van Hove sont des points de la zone de Brillouin où la vitesse de l'électron est nulle. Pour une bande liaison forte, elles sont aux vecteurs  $\mathbf{k} = (\pm\pi, 0)$  et  $(0, \pm\pi)$ . Ici, les points qui nous intéressent sont ceux où c'est la vitesse de l'excitation particule-trou qui s'annule et non pas celle d'un seul électron.

### 3.4.3 Effet du dopage à température nulle

Jusqu'ici, nous nous sommes contentés de considérer les effets de la relation de dispersion liaison forte. Ce sont ces effets qui sont responsables des singularités. Mais cela ne veut pas dire que le remplissage n'a pas un rôle à jouer. Le vecteur  $\mathbf{k} = (\pm \frac{\pi}{2}; \pm \frac{\pi}{2})$  doit conserver l'énergie pour provoquer une singularité. Il doit aussi participer à un processus qui relie un état occupé à un état vacant.

Afin de simplifier l'exposé, commençons par nous placer à température nulle. À la lumière de l'équation 3.12, il faut avoir  $(\omega/2 + \mu^0)(\omega/2 - \mu^0) > 0$  pour que le facteur contenant une différence de fonctions de Fermi-Dirac n'annule pas l'expression. Les

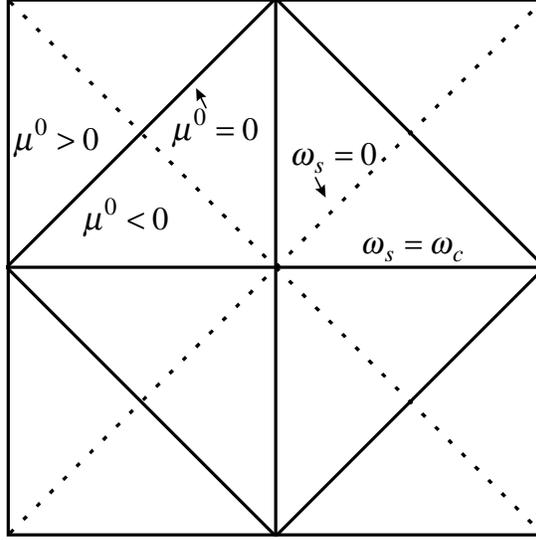


FIG. 3.7: Lignes  $\omega_s = 0$  dans la zone de Brillouin (pointillé).

arguments des fonctions de Fermi-Dirac doivent être de signes différents. En se plaçant sur la singularité ( $\omega = \omega_s$ ), nous trouvons

$$[\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow \omega_s)]_{T=0} \rightarrow \infty \text{ si } \omega_s > 2|\mu^0|. \quad (3.14)$$

Pour que  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega_s)$  soit singulier, il faut que cette condition soit satisfaite. Cet énoncé est justifié à température nulle et doit être assoupli à température finie. Ce résultat nous dit qu'à demi-remplissage ( $n = 1$  et  $\mu^0 = 0$ ), toutes les fréquences se qualifient sauf  $\omega_s = 0$ . Ce dernier cas se produit quand  $|q_x| = |q_y|$  i.e. quand le vecteur  $\mathbf{q}$  est une diagonale de la zone de Brillouin (voir figure 3.7).

#### 3.4.4 Comportement à basse fréquence pour $\omega_s = 0$

L'équation 3.12 nous permet de comprendre pourquoi les cas  $\omega_s = 0$  ne sont pas singuliers :

$$[\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0)]_{\omega_s=0} \sim -\ln |\omega| [f(-\omega/2) - f(\omega/2)].$$

Si la température est non-nulle, nous avons  $f(-\omega/2) - f(\omega/2) \sim \omega/T$  pour  $|\omega| \ll \pi T$  et donc

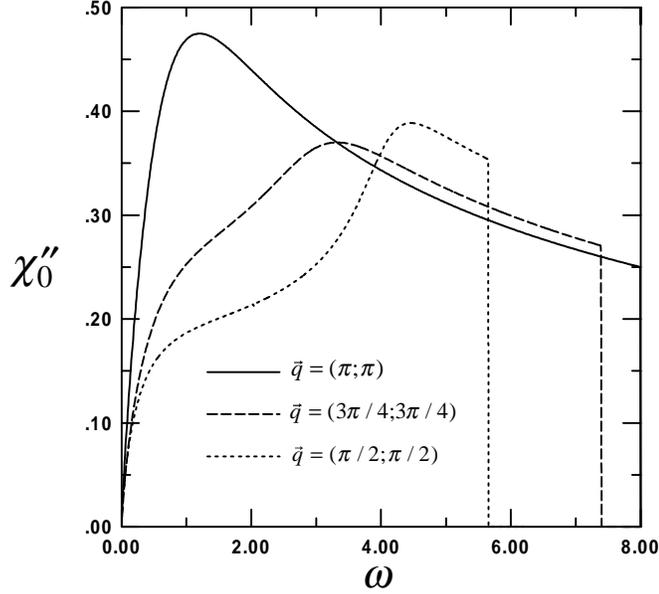


FIG. 3.8:  $\chi_0''$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  pour différents vecteurs d'onde.  $n = 1$ ,  $T = 0, 2$ ,  $\omega_s = 0$ .

$$[\chi_0''(\mathbf{q}, \omega)]_{\omega_s=0} \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} -\frac{\omega}{T} \ln |\omega|.$$

La singularité ne se manifeste pas car le comportement linéaire domine la divergence logarithmique. Nous devons nous rappeler néanmoins que le comportement basse fréquence n'est pas purement linéaire. La figure 3.8 montre bien qu'aucune divergence ne se manifeste à basse fréquence. Si  $\omega_s \neq 0$ , nous retrouvons le comportement linéaire mais seulement pour des fréquences beaucoup plus petites que  $\omega_s$ . Or, comme le comportement basse fréquence qui nous intéresse généralement est celui pour lequel  $|\omega| \ll \pi T$ , nous devons tenir compte de la présence d'une singularité quand  $\omega_s < \pi T$ , i.e. quand  $|q_x| \approx |q_y|$ .

À température nulle, les choses sont différentes. Nous devons reconsidérer l'analyse qui a été faite pour l'équation A.3 présentée en annexe. Le terme dominant en fréquence est celui d'ordre  $\sqrt{\omega}$ . À température finie, cette correction s'annule dans le développement de  $f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)$ . Or, à température nulle, ce développement n'est plus justifié. Selon que l'argument est positif ou négatif, la distribution de Fermi-Dirac est nulle ou égale à 1. Le terme dominant d'ordre  $\sqrt{\omega}$  nous assure que  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$  et  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega$  seront du même signe dans la limite  $\omega \rightarrow 0$ . La différence des

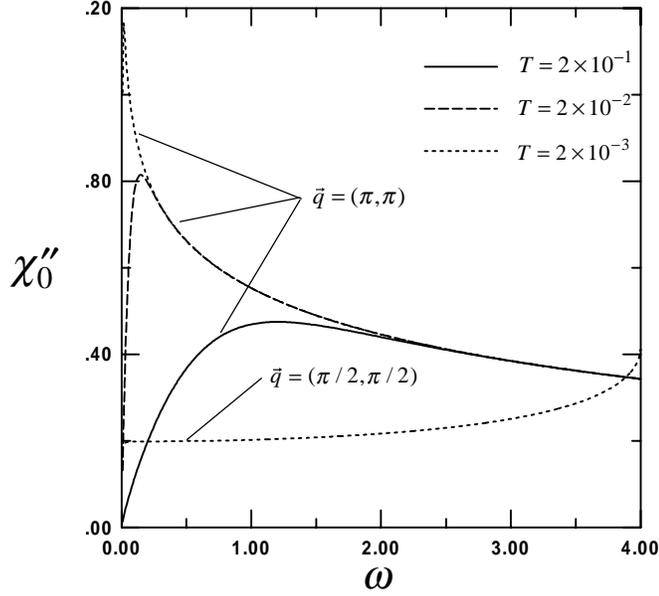


FIG. 3.9:  $\chi''_0$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  : effet de la température.  $n = 1$ ,  $\omega_s = 0$ .

fonctions de Fermi-Dirac s'annule donc et il n'y a pas de singularité.

Il y a cependant une exception importante à ces dernières considérations. Si  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , le coefficient du terme d'ordre  $\sqrt{\omega}$  s'annule dans l'équation A.3. Le terme linéaire en  $\omega$  est donc dominant. Comme ce terme est de signe différent dans  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$  et dans  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega$ , il nous assure que le facteur  $f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)$  sera non-nul dans la limite  $\omega \rightarrow 0$  sauf quand  $\omega$  est rigoureusement nulle. La susceptibilité dans cette limite aura donc tendance à diverger logarithmiquement à faible fréquence, mais tout en étant nulle à l'origine :

$$[\chi''_0(\mathbf{q} = (\pi, \pi); \omega)] \stackrel{T=0, \omega \rightarrow 0^+}{\sim} -\ln |\omega|, \quad [\chi''_0(\mathbf{q} = (\pi, \pi); \omega = 0)] \stackrel{T=0}{=} 0.$$

Ce résultat est en accord avec la référence [41]. La figure 3.9 montre comment la singularité logarithmique se développe en  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  quand on diminue la température. Elle montre aussi que ce phénomène ne se produit pas pour les autres vecteurs de la diagonale.

### 3.4.5 Effet du dopage à température finie

Le critère 3.14 nous indique quelles singularités seront affectées par le remplissage. À demi-rempli, nous avons vu que toutes les valeurs de  $\omega_s$  correspondaient à des

divergences à l'exception de  $\omega_s = 0$ . Hors demi-remplissage, la valeur absolue du potentiel chimique se met à augmenter. Les singularités de basse fréquence sont les premières à disparaître. La valeur maximale que peut prendre une fréquence singulière est  $\omega_s = 4$ . Quand  $|\mu^0| = 2$ , toutes les singularités ont disparu. À température nulle, ce potentiel chimique correspond à un remplissage de  $n = 0,37$ . La surface de Fermi pour ce remplissage est illustrée sur la figure 3.2.

À température finie, le critère 3.14 doit être assoupli. Mathématiquement, le facteur  $f(-\omega/2 - \mu^0) - f(\omega/2 - \mu^0)$  apparaissant dans l'équation 3.12 ne s'annule jamais. Toutes les singularités devraient donc survivre. Cependant, la contribution de ce facteur n'est significative que dans l'intervalle  $-\omega_s/2 - \mu^0 < \Lambda$  et  $\omega_s/2 - \mu^0 > -\Lambda$  avec  $\Lambda \sim \pi T$ . Hors de cet intervalle, le poids d'une singularité devient tellement faible que son effet physique est négligeable. À température finie,  $\omega_s$  est une fréquence singulière si la condition suivante est satisfaite :

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow \omega_s) \rightarrow \infty \text{ si } \omega_s > 2(|\mu^0| - \Lambda) \text{ avec } \Lambda \sim \pi T. \quad (3.15)$$

Nous voyons que les singularités ne deviennent négligeables que lorsque le potentiel chimique devient comparable à l'échelle de température.

Le comportement des singularités en fonction du remplissage de la bande est illustré sur les figures 3.10 et 3.11. Elles montrent toutes deux quatre courbes de  $\chi^{0''}$  pour des potentiels chimiques différents. Commençons par la figure 3.10. La température est  $T = 0,02$ . La fréquence singulière est  $\omega_s = 0,196$ . À demi-remplissage, la singularité est bien présente. La seconde courbe a été calculée avec un potentiel chimique  $\mu^0 = -0,0804$ . De toute évidence, la singularité n'a pas disparu. La condition 3.15 est d'ailleurs satisfaite. Le potentiel chimique de la troisième courbe a été choisi de telle sorte que  $\omega_s = 2(|\mu^0| - \pi T)$ . Il ne semble rester de la singularité qu'un petit maximum local. Enfin, aucune trace de la singularité n'est visible sur la quatrième et dernière courbe.

La figure 3.11 présente de nouveau les quatre courbes de la figure 3.10 mais cette fois, pour une température dix fois plus élevée et pour des remplissages différents. En plus de la courbe pour le cas à demi-rempli, nous avons choisi les potentiels chimiques pour avoir  $\omega_s > 2(|\mu^0| - \pi T)$ ,  $\omega_s = 2(|\mu^0| - \pi T)$  et  $\omega_s < 2(|\mu^0| - \pi T)$ . La température étant différente, le choix des valeurs pour  $\mu^0$  l'est aussi. Sur la troisième courbe i.e. celle pour laquelle  $\omega_s = 2(|\mu^0| - \pi T)$ , il ne reste qu'une toute petite singularité. La singularité a complètement disparu sur la dernière courbe. La singularité a donc

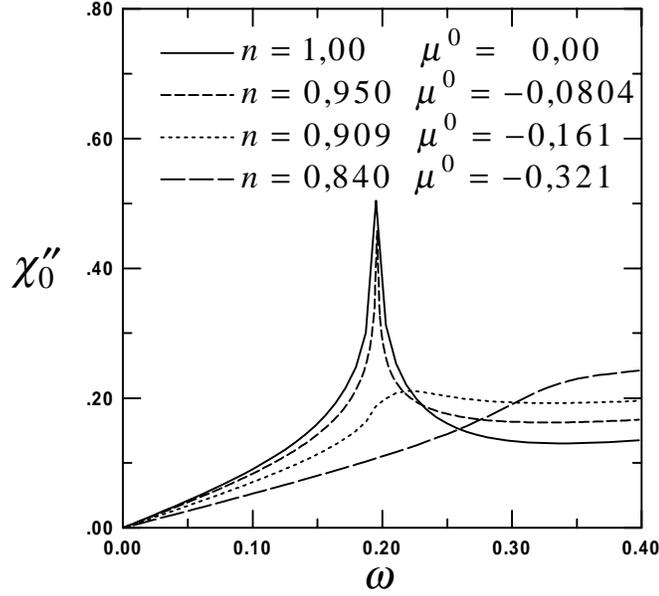


FIG. 3.10:  $\chi_0''$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  : effet du dopage sur les singularités.  $T = 0,02$ ,  $q = (\pi; 0, 8\pi)$ ,  $\omega_s = 0,196$ .

disparu à un remplissage moins élevé que dans le cas plus froid. Même à  $n = 0.709$ , il en reste encore une trace. Notons également que le cas  $n = 0.841$  ne satisfait pas le critère 3.14 mais satisfait le critère 3.15.

Il est tout à fait prévisible que les singularités, du moins celles de basse énergie, disparaissent quand nous diminuons le remplissage. À faible remplissage, la surface de Fermi devient quasi-circulaire. Dans cette limite, si la fréquence et la température sont suffisamment petites par rapport au potentiel chimique, tous les processus ont lieu au voisinage de la surface de Fermi et nous retrouvons le résultat du continuum. Celui-ci ne contient pas de divergences. La figure 3.12 compare la susceptibilité pour le continuum avec celle pour une bande liaison forte à très faible remplissage. Les courbes sont légèrement différentes car l'échelle d'énergie thermique  $\pi T \approx 0,3$  est de l'ordre du potentiel chimique.

### 3.4.6 Effet d'une amplitude de saut au second voisin

Les singularités dans  $\chi_0''(\mathbf{q}, \omega)$  sont dues à la structure de bande. Nous allons maintenant analyser les effets d'une relation de dispersion plus réaliste en considérant un saut au second voisin ( $t'$ ) :

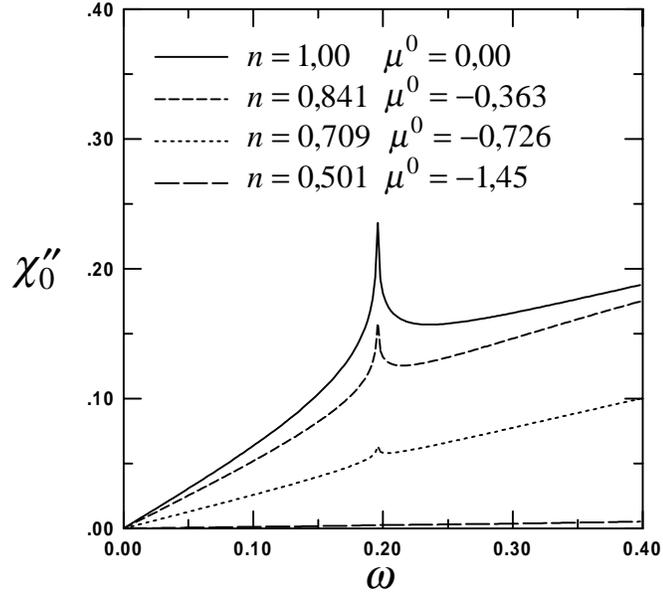


FIG. 3.11:  $\chi_0''$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  : effet du dopage sur les singularités.  $T = 0, 2$ ,  $q = (\pi; 0, 8\pi)$ ,  $\omega_s = 0, 196$ .

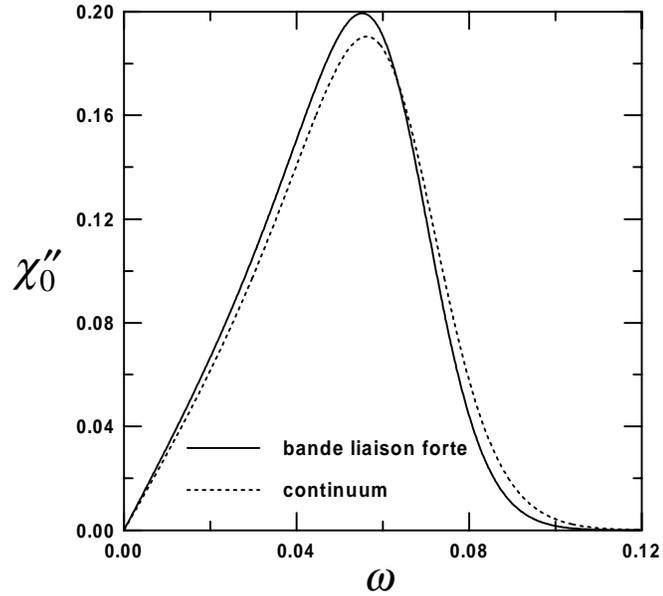


FIG. 3.12:  $\chi_0''$  vs  $\omega$  pour une bande liaison forte et pour le continuum.  $T = 0, 1$ ,  $n = 0, 05$ ,  $k_F^0 = 0, 3$ ,  $q = k_F^0/10$ .

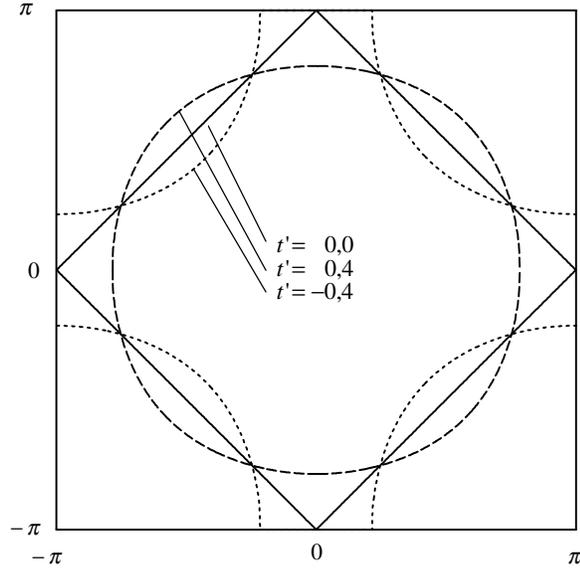


FIG. 3.13: Effet de saut au second voisin sur la surface de Fermi à demi-remplissage.

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2 \cos(k_x) - 2 \cos(k_y) - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y).$$

La présence de ce terme supplémentaire détruit l'emboîtement de la surface de Fermi et ce, même à demi-remplissage (figure 3.13).

La conservation de l'énergie imposée par le delta de Dirac dans l'expression 3.5 prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} & [\omega + \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0]_{k_y=k_y^0} & (3.16) \\ & = \omega - 4 \sin(k_x) \sin(q_x/2) \{1 + 2t' \cos(k_y^0) \cos(q_y/2)\} \\ & \quad - 4 \sin(k_y^0) \sin(q_y/2) \{1 + 2t' \cos(k_x) \cos(q_x/2)\} \\ & \equiv a(k_x, \mathbf{q}) \cos(k_y^0) + b(k_x, \mathbf{q}) \sin(k_y^0) + c(k_x, \mathbf{q}, \omega) = 0. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sin(k_y^0) = \frac{-bc + |a| \sqrt{a^2 + b^2 - c^2}}{a^2 + b^2} \quad (3.17)$$

avec

$$\begin{aligned}
a(k_x, \mathbf{q}) &\equiv 8t' \sin(k_x) \sin(q_x/2) \cos(q_y/2) \\
b(k_x, \mathbf{q}) &\equiv 4 \sin(q_y/2) \{1 + 2t' \cos(k_x) \cos(q_x/2)\} \\
c(k_x, \mathbf{q}, \omega) &\equiv 4 \sin(k_x) \sin(q_x/2) - \omega.
\end{aligned}$$

L'expression 3.10 devient :

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} \frac{[f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0}}{\sqrt{a^2(k_x, \mathbf{q}) + b^2(k_x, \mathbf{q}) - c^2(k_x, \mathbf{q})}}. \quad (3.18)$$

Notons que toutes les valeurs obtenues avec la formule 3.17 ne satisfont pas l'équation 3.16. Nous avons des valeurs superflues de  $k_y^0$  et seules celles qui satisfont la conservation de l'énergie sont à considérer dans le calcul.

Malgré la présence d'un saut au second voisin, certaines valeurs de  $k_x$  annulent le dénominateur de 3.18. Nous avons donc, une fois de plus, des divergences à intégrer. Nous montrons que certaines de ces divergences ne sont pas intégrables et que les singularités observées jusqu'ici survivent à cette généralisation. Les détails mathématiques de l'analyse des singularités font l'objet de l'annexe B.

La figure 3.14 montre l'effet d'un saut au second voisin sur  $\chi^{0''}$  au vecteur d'onde  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  à  $n = 1$ . Quand  $t' = 0$ , le comportement à basse fréquence est  $\chi^{0''} \sim -(\omega/T) \ln |\omega|$ . Le graphique b) montre comment la correction logarithmique perd de son importance quand  $t'$  acquiert des valeurs finies. L'effet du logarithme diminue quand  $t'$  devient de l'ordre de  $\pi T$ .

La figure 3.15 nous montre le cas  $\mathbf{q} = (\pi, \pi/2)$ . Avant de disparaître, la singularité se déplace vers les basses énergies. Cet effet ne dépend pas du signe de  $t'$  ni du vecteur d'onde considéré (figure 3.16a). Il appert aussi que  $\omega_s = 0$  pour les vecteurs de la diagonale de la zone de Brillouin comme c'est le cas quand  $t' = 0$ . L'effet est contraire pour la coupure. Le saut au second voisin augmente la valeur de  $\omega_c$  (figure 3.16b).

L'analyse détaillée des comportements singuliers de  $\chi^{0''}$  en présence d'un saut au second voisin est présentée dans l'annexe B.

### 3.4.7 Effet de la dimensionnalité

Pour terminer cette section, nous allons regarder si les singularités dans la partie imaginaire de la susceptibilité sont un effet de la faible dimension du système d'électrons. L'expression de  $\chi^{0''}$  pour un système tridimensionnel est

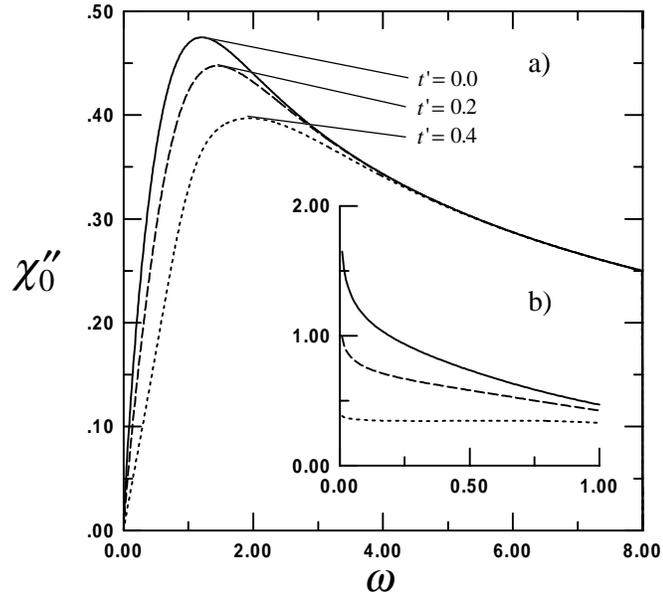


FIG. 3.14: a)  $\chi''_0$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  : effet de saut au second voisin.  $T = 0, 2, q = (\pi; \pi), n = 1$ . b)  $\chi''_0/\omega$  vs  $\omega$ .

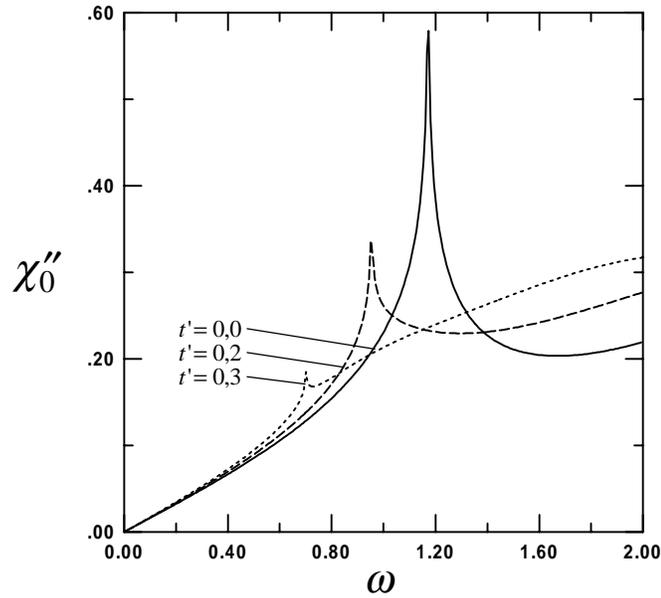


FIG. 3.15:  $\chi''_0$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$  : effet de saut au second voisin.  $T = 0, 2, q = (\pi; \pi/2), n = 1$ .

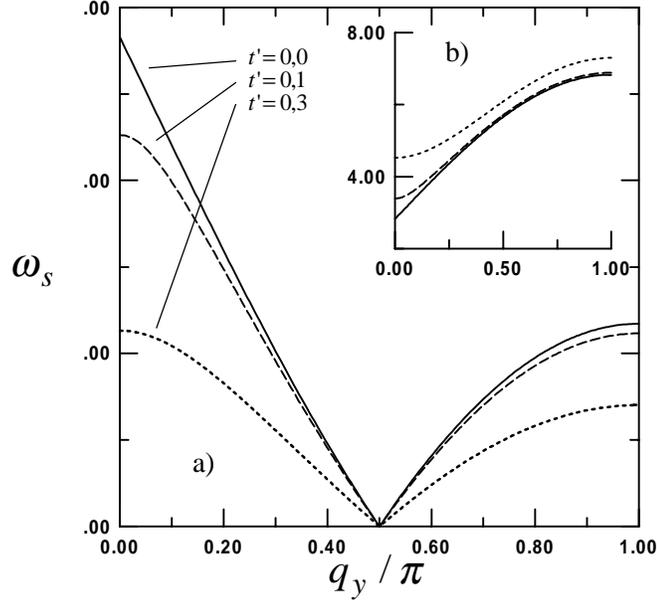


FIG. 3.16: a)  $\omega_s$  vs  $q_y/\pi$  pour  $q_x = \pi/2$  : effet de saut au second voisin. b)  $\omega_c$  vs  $q_y/\pi$  pour  $q_x = \pi/2$ .

$$\begin{aligned} \chi_{3D}^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &= 2\pi \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_z}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0)] \\ &\quad \times \delta(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}^0). \end{aligned}$$

Nous procédons de la même manière que dans le cas bidimensionnel. L'intégrale sur  $k_y$  donne ( $t' = 0$ ) :

$$\begin{aligned} \chi_{3D}^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0} \quad (3.19) \\ &\quad \times \left\{ \sin^2(q_y/2) - (\omega/4 - \sin(k_z) \sin(q_z/2) - \sin(k_x) \sin(q_x/2))^2 \right\}^{-1/2} \end{aligned}$$

$$\text{avec} \quad \sin(k_y^0) = \frac{\omega/4 - \sin(k_z) \sin(q_z/2) - \sin(k_x) \sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)}.$$

Intéressons-nous au résultat de l'intégrale sur  $k_x$ . Le dénominateur dans l'argument de l'intégrale s'annule à certains endroits. Une fois de plus, nous voulons savoir si ces

singularités sont intégrables. Posons  $\omega'/4 \equiv \omega/4 - \sin(k_z) \sin(q_z/2)$ . De cette façon, nous pouvons utiliser les résultats obtenus à deux dimensions. Si  $q_x, q_y \neq 0$ , nous avons

$$\begin{aligned}\chi_{3D}^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &\sim \sum_{k_z^s} \int_{k_z \approx k_z^s} dk_z \ln ||\omega' - \omega_s| \\ &= \sum_{k_z^s} \int_{k_z \approx k_z^s} dk_z \ln ||\omega - 4 \sin(k_z) \sin(q_z/2)| - \omega_s|\end{aligned}$$

où  $\omega_s$  est la fréquence singulière à deux dimensions (équation 3.11) et  $k_z^s$  est la valeur de  $k_z$  qui annule l'argument du logarithme, en l'occurrence

$$\sin(k_z^s) \equiv \frac{\omega \pm \omega_s}{4 \sin(q_z/2)}. \quad (3.20)$$

Choisissons  $k_z^s$  de telle sorte que  $\omega' > 0$  et gardons le signe moins dans l'expression ci-haut. En développant l'argument du logarithme autour de la singularité, nous trouvons

$$\chi_{3D}^{0''}(\mathbf{q}, \omega) \sim \int_{k_z \approx k_z^s} dk_z \ln |a(k_z - k_z^s) + b(k_z - k_z^s)^2|$$

avec  $a \equiv -4 \cos(k_z^s) \sin(q_z/2)$  et  $b \equiv 2 \sin(k_z^s) \sin(q_z/2)$ .

Le résultat de cette intégrale est fini. Il n'y a donc pas de divergence si  $q_x, q_y, q_z \neq 0$ .

Posons maintenant  $q_x = 0$ . Nous savons à la lumière des résultats obtenus à deux dimensions que le résultat de l'intégrale sur  $k_x$  dans l'équation 3.19 ne divergera pas de la même manière. Nous aurons plutôt

$$\begin{aligned}\chi_{3D}^{0''}(q_x = 0, q_y, q_z; \omega) &\sim \sum_{k_z^s} \int_{k_z \approx k_z^s} dk_z ||\omega' - \omega_s|^{-1/2} \\ &\sim \sum_{k_z^s} \int_{k_z \approx k_z^s} dk_z |a(k_z - k_z^s) + b(k_z - k_z^s)^2|^{-1/2}\end{aligned}$$

L'intégrale est divergente quand  $a = 0$  i.e. quand  $k_z^s = \pm \frac{\pi}{2}$  (nous supposons pour l'instant que  $q_y, q_z \neq 0$ ). Cette valeur est substituée dans l'équation 3.20 pour trouver la fréquence à laquelle apparaîtra une singularité dans  $\chi_{3D}^{0''}$  :

$$\omega = 4 [\sin(q_y/2) \pm \sin(q_z/2)].$$

Le choix des signes doit être fait pour avoir  $\omega' < \omega_s$ . Autrement, l'intégrale sur  $k_x$  s'annule dans l'équation 3.19. L'équation 3.20 implique donc le choix  $k_z^s = -\frac{\pi}{2}$  et, par voie de conséquence,

$$\omega_s^{3D} = 4 |\sin(|q_y|/2) - \sin(|q_z|/2)| \quad \text{avec } q_x = 0, \quad q_x \leftrightarrow q_y \leftrightarrow q_z$$

Ce choix de signe est cohérent avec l'hypothèse  $\omega' > 0$ . Nous pouvons évidemment permuer les vecteurs  $q_x, q_y$  et  $q_z$  sans affecter la justesse de ce résultat. Le comportement au voisinage de cette singularité sera de la forme  $\chi_{3D}^{0''} \sim \ln |\omega - \omega_s^{3D}|$ .

Posons maintenant  $q_x, q_z = 0$ . Le résultat 3.19 devient

$$\begin{aligned} \chi_{3D}^{0''}(q_x = 0, q_y, q_z = 0; \omega) &= \frac{1}{16\pi^2 \sqrt{\sin^2(q_y/2) - (\omega/4)^2}} \\ &\times \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0} \\ &\sim |\omega - \omega_s^{3D}|^{-1/2} + \dots \end{aligned}$$

Le cas tridimensionnel contient aussi des divergences. Mais tous les vecteurs  $\mathbf{q}$  ne déterminent pas une fréquence singulière. Seuls ceux qui sont situés dans les plans  $q_x, q_y$  ou  $q_z = 0$  sont associés à une singularité en  $\omega_s^{3D}$ . Ce résultat suggère que l'effet de ces singularités sur les propriétés à une particule est moins déterminant à trois dimensions. Il permet aussi d'affirmer que les singularités que nous avons identifiées jusqu'ici sont sensibles aux effets de la dimension, bien qu'elles ne disparaissent pas toutes à  $d = 3$ .

## 3.5 Partie réelle de la susceptibilité des électrons libres dans une bande liaison forte

Nous allons maintenant nous intéresser à la partie réelle de la susceptibilité des électrons libres, soit  $\chi^{0'}$ . Elle jouera un rôle très différent de la partie imaginaire quand nous étudierons l'effet des fluctuations sur les propriétés à une particule. Elle sera absente dans le cadre de la théorie des perturbations au second ordre (chapitre 4). En revanche, elle interviendra de façon déterminante quand nous incluerons l'effet des interactions dans les fluctuations elles-mêmes (chapitre 5). Ce sont les caractéristiques de  $\chi^{0'}$  qui déterminent le type d'instabilité qui apparaît dans le système à basse température.

### 3.5.1 Comportement en fréquence de $\chi^{0'}$

Commençons par nous intéresser au comportement en fréquence de  $\chi^{0'}$ . Pour ce faire, utilisons ce que nous savons déjà de la partie imaginaire  $\chi^{0''}$ . Nous avons vu qu'elles sont toutes les deux reliées par les relations de causalité de Kramers-Kronig (équation 3.3). La relation qui sera la plus utilisée dans cette section est la suivante :

$$\chi^{0'}(\omega) = P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi^{0''}(\omega')}{\omega' - \omega} \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \int_{-\omega_c}^{\omega - \eta} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi^{0''}(\omega')}{\omega' - \omega} + \int_{\omega + \eta}^{\omega_c} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi^{0''}(\omega')}{\omega' - \omega} \right] \quad (3.21)$$

où la partie principale permet d'avoir un résultat d'intégration bien défini dans l'intervalle  $\omega' \approx \omega$ .

Contrairement à  $\chi^{0''}$ , la partie réelle ne possède pas de fréquence de coupure. En effet, si  $\omega \gg \omega_c$ , nous avons

$$\begin{aligned} \chi^{0'}(\omega) &\stackrel{\omega \gg \omega_c}{\equiv} - \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi^{0''}(\omega')}{\omega} \left[ 1 + \frac{\omega'}{\omega} + \left( \frac{\omega'}{\omega} \right)^2 + \dots \right] \\ &\Rightarrow \chi^{0'}(\omega) \stackrel{\omega \gg \omega_c}{\equiv} - \frac{1}{\omega^2} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega'}{\pi} \omega' \chi^{0''}(\omega'). \end{aligned}$$

Le comportement à haute fréquence est en  $\omega^{-2}$ . Le coefficient du terme en  $\omega^{-2}$  est donné par le premier moment de  $\chi^{0''}$ . La coupure  $\omega_c$  n'en est donc pas une pour  $\chi^{0'}$ . Par contre, nous pouvons montrer que c'est une fréquence singulière pour la partie

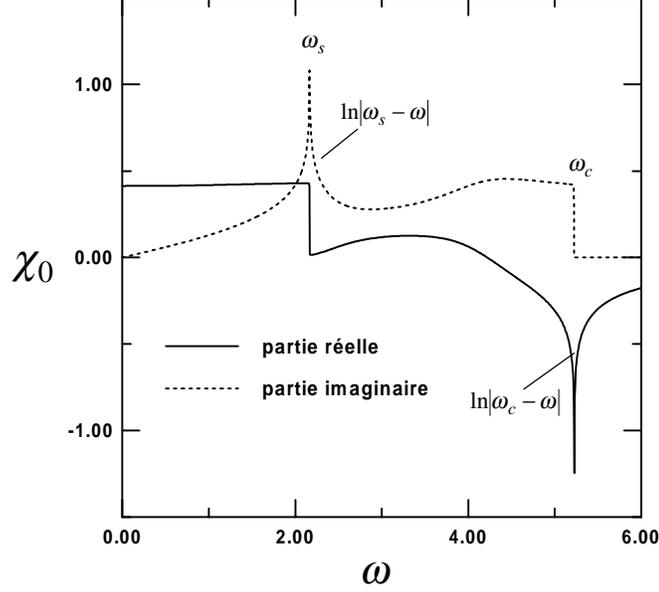


FIG. 3.17:  $\chi^{0'}$  et  $\chi^{0''}$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$ .  $T = 0, 2$ ,  $n = 1$ ,  $q = (3\pi/4, \pi/4)$ ,  $\omega_c = 5, 23$ ,  $\omega_s = 2, 16$ .

réelle. En effet, si  $\omega_c \neq \omega_s$ , nous savons que  $\chi^{0''}(\omega_c^-)$  est fini alors que  $\chi^{0''}(\omega_c^+) = 0$ . Posons  $\omega = \omega_c - \delta\omega$  avec  $\delta\omega > 0$ . À partir de l'équation 3.21, concentrons-nous sur un intervalle de fréquence de largeur  $\Delta\omega$  situé tout près de la coupure. Cette largeur est assez petite pour supposer que  $\chi^{0''}$  est à peu près constant sur l'intervalle  $\omega_c - \Delta\omega < \omega < \omega_c$ . Elle est également définie de telle sorte que  $\Delta\omega > \delta\omega$ . Nous trouvons

$$\begin{aligned} \chi^{0'}(\omega_c - \delta\omega) &\sim P \int_{\omega_c - \Delta\omega}^{\omega_c} d\omega' \frac{\chi^{0''}(\omega')}{\omega' - \omega_c + \delta\omega} \approx \chi^{0''}(\omega_c^-) P \int_{\omega_c - \Delta\omega}^{\omega_c} \frac{d\omega'}{\omega' - \omega_c + \delta\omega} \\ &= \chi^{0''}(\omega_c^-) [\ln(\delta\omega) - \ln(\Delta\omega - \delta\omega)] \sim \ln|\omega - \omega_c|. \end{aligned}$$

Ce résultat reste vrai si  $\omega = \omega_c + \delta\omega$ . La coupure  $\omega_c$  est donc une singularité logarithmique pour la partie réelle. La figure 3.17 montre bien la singularité logarithmique dans  $\chi^{0'}$  en  $\omega_c$ .

Quand  $\omega_c = \omega_s$ , les choses sont légèrement différentes. Si nous approchons de la fréquence  $\omega_c$  par la gauche, nous avons

$$\chi^{0'}(\omega_c - \delta\omega) \sim P \int_{\omega_c - \Delta\omega}^{\omega_c} d\omega' \frac{\chi^{0''}(\omega')}{\omega' - \omega_c + \delta\omega} \sim P \int_{\omega_c - \Delta\omega}^{\omega_c} d\omega' \frac{(\omega_c - \omega')^{-1/2}}{\omega' - \omega_c + \delta\omega}.$$

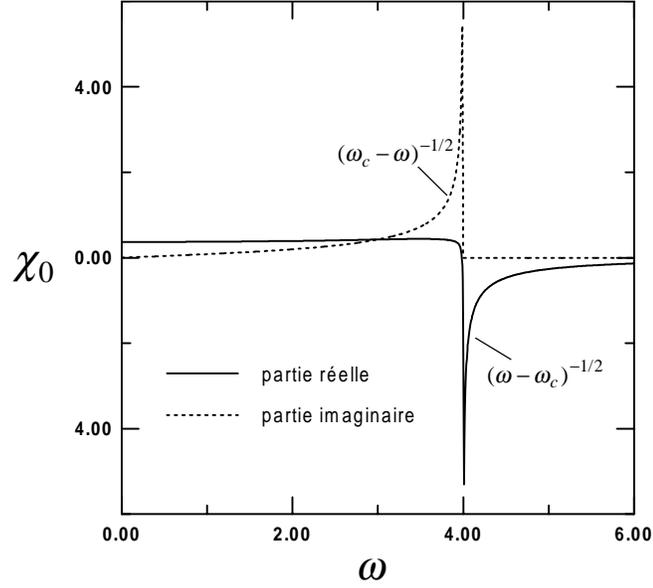


FIG. 3.18:  $\chi^{0r}$  et  $\chi^{0i}$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$ .  $T = 0, 2$ ,  $n = 1$ ,  $q = (\pi, 0)$ ,  $\omega_c = \omega_s = 4$ .

En utilisant

$$\int d\omega' \frac{(\omega_c - \omega')^{-1/2}}{\omega' - \omega_c + \delta\omega} = \frac{-1}{\sqrt{\delta\omega}} \ln \left| \frac{\delta\omega + \omega_c - \omega' + 2\sqrt{\delta\omega}\sqrt{\omega_c - \omega'}}{\omega' - \omega_c + \delta\omega} \right|,$$

nous trouvons  $\chi^{0r}(\omega_c - \delta\omega) \sim (\Delta\omega)^{-1/2}$  qui ne diverge pas quand  $\delta\omega \rightarrow 0$ . La partie réelle  $\chi^{0r}(\omega_c^-)$  reste finie quand  $\omega_c = \omega_s$ . Ce résultat n'est pas justifié si la limite est prise par la droite. Nous avons alors

$$\chi^{0r}(\omega_c + \delta\omega) \sim \int_{\omega_c - \Delta\omega}^{\omega_c} d\omega' \frac{(\omega_c - \omega')^{-1/2}}{\omega' - \omega_c - \delta\omega} = \frac{2}{\sqrt{\delta\omega}} \left[ \tan^{-1} \left( \sqrt{\frac{\omega_c - \omega'}{\delta\omega}} \right) \right]_{\omega_c - \Delta\omega}^{\omega_c}$$

qui devient  $\chi^{0r}(\omega_c + \delta\omega) \sim |\omega - \omega_c|^{-1/2}$  dans la limite  $\delta\omega \rightarrow 0$ . Par la droite, la coupure se traduit par une divergence dans la partie réelle. Ce cas est illustré sur la figure 3.18.

Si la partie imaginaire est singulière en  $\omega_s$  (critère 3.15), il est possible de montrer qu'il y a une discontinuité dans la partie réelle :

$$\begin{aligned}\chi^{0'}(\omega_s - \delta\omega) &\sim P \int_{\omega_s - \Delta\omega}^{\omega_s + \Delta\omega} d\omega' \frac{\ln |\omega' - \omega_s|}{\omega' - \omega_s + \delta\omega} \\ &\approx \ln^2 \left( \frac{\Delta\omega}{\delta\omega} \right) + 2\text{dilog} \left( \frac{\Delta\omega}{\delta\omega} \right) - \frac{\pi^2}{6} \approx -\frac{\pi^2}{2}\end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que  $\delta\omega \ll \Delta\omega$ . Les propriétés de la fonction  $\text{dilog}(x)$  sont énumérées dans l'annexe C. Si, par contre, nous nous approchons de cette fréquence par la droite, le résultat devient

$$\begin{aligned}\chi^{0'}(\omega_s + \delta\omega) &\sim P \int_{\omega_s - \Delta\omega}^{\omega_s + \Delta\omega} d\omega' \frac{\ln |\omega' - \omega_s|}{\omega' - \omega_s - \delta\omega} \\ &\approx -\ln^2 \left( \frac{\Delta\omega}{\delta\omega} \right) - 2\text{dilog} \left( \frac{\Delta\omega}{\delta\omega} \right) + \frac{\pi^2}{6} \approx \frac{\pi^2}{2}\end{aligned}$$

ce qui montre bien la présence d'un saut dans la partie réelle de la susceptibilité. Cette discontinuité en  $\omega_s$  est visible sur la figure 3.17. De la même manière qu'un saut dans  $\chi^{0''}$  provoque une singularité dans  $\chi^{0'}$ , une singularité dans  $\chi^{0''}$  provoque un saut dans  $\chi^{0'}$ . Cette réciprocity vient du fait que la partie imaginaire de la susceptibilité est elle aussi reliée à  $\chi^{0'}$  par une relation de Kramers-Kronig.

Il est important de bien connaître le comportement de la partie réelle à basse fréquence. Nous savons que  $\chi^{0'}$  est paire en fréquence. En général, nous devrions avoir  $\chi^{0'}(\omega \rightarrow 0) - \chi^{0'}(0) \propto \omega^2$ . Nous allons voir que ce n'est pas toujours vrai dans le cas qui nous concerne. Pour la plupart des vecteurs d'onde, la partie imaginaire est linéaire en fréquence dans la limite  $\omega \rightarrow 0$ . Dans ce cas, il est facile de montrer que la partie réelle est quadratique en fréquence autour de l'origine. Cependant, nous avons vu que le comportement linéaire de  $\chi^{0''}$  est parfois modifié par une correction logarithmique. Cette correction aura un effet sur la partie réelle. Nous pouvons le voir de la façon suivante :

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi^{0'}(\omega) \sim P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{\omega' \ln |\omega'|}{\omega' - \omega}.$$

En utilisant

$$\int d\omega' \frac{\omega' \ln(\omega')}{\omega' - \omega} = \omega' \ln(\omega') - \omega' + \omega \ln(\omega) \ln \left( \frac{\omega' - \omega}{\omega} \right) - \omega \text{dilog} \left( \frac{\omega'}{\omega} \right),$$

nous trouvons

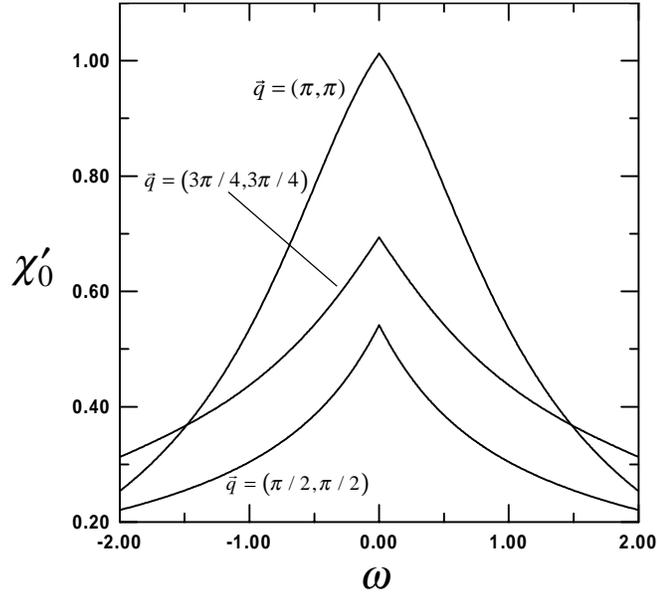


FIG. 3.19:  $\chi^{0'}$  d'une bande liaison forte vs  $\omega$ .  $T = 0, 2$ ,  $n = 1$ ,  $\omega_s = 0$ .

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi^{0'}(\omega) \sim \text{cste} - |\omega|.$$

Ce résultat est justifié pour tous les vecteurs de la diagonale lorsque le critère 3.15 est satisfait i.e. quand  $\pi T > 2|\mu^0|$ . La figure 3.19 nous montre quelques courbes pour lesquelles  $\omega_s = 0$ . Leur comportement à basse fréquence n'est pas quadratique.

À température nulle, quand  $\omega_s = 0$ ,  $\mu^0 = 0$  et  $\mathbf{q} \neq (\pi, \pi)$ , nous avons vu que  $\chi^{0''}(\omega \rightarrow 0^+) = \text{cste}$ . Nous en déduisons la conséquence suivante sur la partie réelle :

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi^{0'}(\omega) \sim -\ln |\omega|.$$

La partie réelle est donc divergente à basse fréquence pour tous les vecteurs de la diagonale. Le cas  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  donne un résultat légèrement différent. Toujours dans les mêmes circonstances, nous avons plutôt  $\chi^{0''}(\omega \rightarrow 0^+) \sim -\ln |\omega|$  et donc

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi^{0'}(\omega) \sim -P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{\ln |\omega'|}{\omega' - \omega}.$$

Sachant que

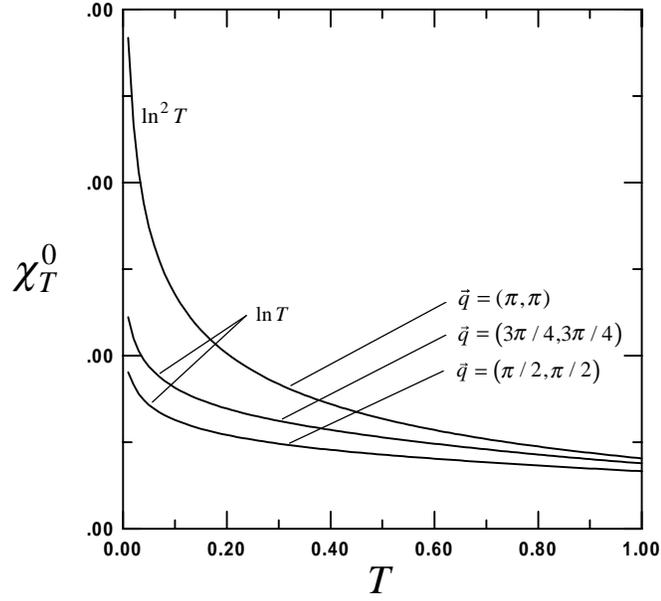


FIG. 3.20:  $\chi_T^0$  d'une bande liaison forte vs  $T$ .  $n = 1$ ,  $\omega_s = 0$ .

$$\int d\omega' \frac{\ln(\omega')}{\omega' - \omega} = \ln(\omega) \ln\left(\frac{\omega' - \omega}{\omega}\right) - \text{dilog}\left(\frac{\omega'}{\omega}\right),$$

nous obtenons

$$\lim_{\omega \rightarrow 0^+} \chi^{0'}(\omega) \sim \ln^2 |\omega|$$

en accord avec le résultat de la référence [41]. La partie réelle diverge donc davantage au vecteur  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ .

### 3.5.2 Comportement en température de la susceptibilité statique

Intéressons-nous maintenant au comportement en température de la susceptibilité statique  $\chi_T^0 \equiv \chi^{0'}(\omega = 0)$ . Cette dernière est donnée par la relation

$$\chi_T^0 = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi^{0''}(\omega)}{\omega}.$$

Le comportement de  $\chi_T^0$  est tributaire du comportement en température et en fréquence de  $\chi^{0''}$ . Quand  $\omega_s = 0$ ,  $n = 1$  et  $\mathbf{q} \neq (\pi, \pi)$ , nous avons (équation 3.12)

$$\chi^{0''}(\omega) \sim -\frac{\omega \ln |\omega|}{T}, \text{ avec } |\omega| < \pi T$$

$$\Rightarrow \chi_{T \rightarrow 0}^0 \sim -\lim_{T \rightarrow 0} \int_0^{\pi T} d\omega \frac{\ln |\omega|}{T} \sim -\ln T,$$

ce qui est cohérent avec le comportement en fréquence de  $\chi^{0'}(\omega)$  à température nulle. Finalement, quand  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , nous devons tenir compte du comportement purement logarithmique aux fréquences un peu supérieures à la température, i.e. :

$$\chi^{0''}(\omega) \sim \left\{ \begin{array}{l} -\frac{\omega}{T} \ln |\omega| \text{ si } |\omega| < \pi T \\ -\ln |\omega| \text{ si } |\omega| \gtrsim \pi T \end{array} \right\}.$$

$$\Rightarrow \chi_{T \rightarrow 0}^0 \sim \lim_{T \rightarrow 0} \left[ \int_0^{\pi T} d\omega \frac{\chi^{0''}(\omega)}{\omega} + \int_{\pi T}^{\Delta\omega} d\omega \frac{\chi^{0''}(\omega)}{\omega} \right]$$

Le premier terme est de l'ordre de  $\ln T$ . Le second terme de cette expression donne

$$\lim_{T \rightarrow 0} \int_{\pi T}^{\Delta\omega} d\omega \frac{\ln \omega}{\omega} \sim \ln^2 T \Rightarrow \chi_{T \rightarrow 0}^0 \sim \ln^2 T + O(\ln T). \quad (3.22)$$

Les résultats à température nulle pour les cas  $\omega_s = 0$  ne sont rigoureusement justifiés qu'à demi-remplissage. Dès que le potentiel chimique est non-nul, il existe une température en-dessous de laquelle  $\chi_T^0$  cesse d'augmenter. Cette température peut être déduite de l'équation 3.15. Les résultats à température finie sont par contre plus robustes. Ils restent justifiés hors du demi-remplissage tant que le potentiel chimique n'est pas au moins comparable à la température (critère 3.15). Enfin, là où il aurait été pertinent d'introduire explicitement la dépendance en température de la coupure  $\Delta$ , il est possible de vérifier que les résultats seraient les mêmes.

### 3.5.3 Position du maximum de la susceptibilité statique

La position du maximum de  $\chi_T^0(\mathbf{q})$  nous fournit une information sur la nature de l'instabilité qui peut apparaître dans le système à basse température. Cet aspect

du problème sera considéré quand nous introduirons l'effet des interactions sur les fluctuations. La position de ce maximum est notée  $\mathbf{Q}$ .

À demi-remplissage, pour toutes les températures, ce maximum est situé au vecteur d'onde antiferromagnétique  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ . C'est pour ce vecteur d'onde que  $\chi_T^0(\mathbf{q})$  croît le plus rapidement quand on diminue la température (équation 3.22).

Hors du demi-remplissage, ce maximum change de position dans la zone de Brillouin. À température nulle, il se déplace dès que le potentiel chimique prend une valeur non-nulle. Sa position évolue progressivement le long de la ligne  $(\pi, \pi) \rightarrow (\pi, 0)$  au fur et à mesure que le potentiel chimique augmente [68]. À température finie, le maximum  $\mathbf{Q}$  ne commence à se déplacer que lorsque  $|\mu^0| \sim \pi T$ .

### 3.6 Résumé des résultats importants

Pour un réseau carré bidimensionnel sans saut au second voisin, nous avons vu dans ce chapitre que  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$  diverge de façon logarithmique aux fréquences données par

$$\omega_s = 4 |\sin(|q_x|/2) - \sin(|q_y|/2)|$$

si la condition

$$\omega_s \gtrsim 2(|\mu^0| - \pi T)$$

est satisfaite. Quand les fréquences  $\omega$  et  $\omega_s$  sont petites ou comparables à l'échelle de température,  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$  prend la forme

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) \sim -\frac{\omega}{T} \ln \left| \frac{|\omega| - \omega_s(\mathbf{q})}{\Delta^2} \right| \quad \text{pour } |\omega|, \omega_s \lesssim \pi T \quad \text{avec } \Delta \sim \pi T/W.$$

À  $T = 0$  et à basse fréquence, cette expression est remplacée par

$$\begin{aligned} \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0^+) &\sim \text{cste} && \text{si } \mathbf{q} \neq (\pi, \pi) \\ \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0^+) &\sim -\ln |\omega| && \text{si } \mathbf{q} = (\pi, \pi) \end{aligned}$$

pour les vecteurs  $\mathbf{q}$  d'une diagonale de la zone de Brillouin.

L'effet d'un saut au second voisin ( $t' \neq 0$ ) est de déplacer vers les basses fréquences les valeurs de  $\omega_s$ . La fréquence  $\omega_s$  n'a pas d'expression simple mais elle s'annule toujours pour les vecteurs  $\mathbf{q}$  diagonaux.

La partie réelle  $\chi^{0r}(\mathbf{q}, \omega)$  a également un comportement inhabituel. Pour un vecteur  $\mathbf{q}$  diagonal, elle est de la forme

$$\chi^{0r}(\mathbf{q}, \omega) \sim \text{cste} - |\omega|$$

à demi-remplissage et à température finie. Ce comportement survit hors demi-remplissage si la condition

$$\pi T \gtrsim 2 |\mu^0|$$

est satisfaite. À  $T = 0$ , ce résultat devient

$$\begin{aligned} \chi^{0r}(\mathbf{q}, \omega) &\sim -\ln |\omega| \quad \text{si } \mathbf{q} \neq (\pi, \pi) \\ &\sim \ln^2 |\omega| \quad \text{si } \mathbf{q} = (\pi, \pi). \end{aligned}$$

Toujours pour un vecteur diagonal, la susceptibilité statique obéit quant à elle à

$$\begin{aligned} \chi_T^0(\mathbf{q}) &\sim -\ln T \quad \text{si } \mathbf{q} \neq (\pi, \pi) \\ &\sim \ln^2 T \quad \text{si } \mathbf{q} = (\pi, \pi). \end{aligned}$$

# Chapitre 4

## Self-énergie des électrons : théorie des perturbations au second ordre

Dans ce chapitre, nous allons étudier l'effet des fluctuations de spin et de charge sur les propriétés à une particule dans un système d'électrons. Les fluctuations seront celles du chapitre 3. Nous continuerons donc de négliger les interactions dans les fluctuations elles-mêmes pour ne garder que les effets du réseau. Les interactions interviendront pour coupler ces fluctuations au propagateur de l'électron libre. La self-énergie obtenue est celle qui est donnée par la théorie des perturbations au second ordre. En principe, cette approche est valable dans la mesure où l'interaction est suffisamment plus petite que la largeur de bande et que la température est plus grande qu'une éventuelle température d'apparition d'ordre à courte portée.

### 4.1 Définition de la self-énergie

La fonction de Green des électrons est définie dans le formalisme de Matsubara par

$$G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j; \tau - \tau') \equiv - \left\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau') \right\rangle. \quad (4.1)$$

Cette fonction représente le processus de destruction d'une particule dans l'état  $(\mathbf{r}_i, \sigma)$  au temps  $\tau$  suivi de la création d'une particule dans l'état  $(\mathbf{r}_j, \sigma)$  au temps  $\tau'$ . Parce que les opérateurs de création et d'annihilation ( $c^\dagger$  et  $c$ ) anticommulent, cette définition est ambiguë quand  $\tau = \tau'$ . Il faut donc éviter de se placer à des temps

rigoureusement égaux. À titre d'exemple :

$$G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j; \eta = 0^-) = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle.$$

La transformée de Fourier de la définition 4.1 est donnée par

$$G(\mathbf{k}, ik_n) = \sum_{\mathbf{r}_i} \int_0^\beta d\tau e^{ik_n\tau - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} G(\mathbf{r}_i; \tau) \quad \text{avec } k_n = (2n+1)\pi T, \quad n \in Z.$$

Cette fonction de Green est simplement reliée à la fonction de Green retardée par un prolongement analytique :

$$G(\mathbf{k}, ik_n) \xrightarrow{ik_n \rightarrow \omega + i\eta} \Re e [G(\mathbf{k}, \omega)] + i\Im m [G(\mathbf{k}, \omega)].$$

Le poids spectral est proportionnel à la partie imaginaire de la fonction de Green retardée. Nous utiliserons la définition suivante :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -2\Im m [G(\mathbf{k}, \omega)].$$

Cette quantité a un sens physique important. Supposons que nous avons un système de  $N$  particules. Ajoutons à ce système un électron (ou un trou) dans un état  $(\mathbf{k}, \sigma)$ . Le système a maintenant  $N+1$  (ou  $N-1$ ) particules. La probabilité que la différence d'énergie entre l'état final et l'état initial soit  $\omega$  est donnée par  $A(\mathbf{k}, \omega)/2\pi$ . Ce résultat peut être formellement démontré en ayant recours à la représentation de Lehman [73]. En l'absence d'interactions, nous savons avec certitude que la différence d'énergie sera donnée par  $(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu^0)$ . Le poids spectral des particules libres est donc un delta de Dirac :

$$A^0(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu^0).$$

Introduisons maintenant le concept de self-énergie irréductible. La fonction de Green peut s'écrire de la manière suivante :

$$G(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, ik_n)}$$

où  $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ ,  $\mu$  est le potentiel chimique en présence d'interactions et  $\Sigma(\mathbf{k}, ik_n)$  est la self-énergie irréductible. Cette relation est connue sous le nom d'équation de Dyson. En utilisant le propagateur des particules libres  $(G^0)^{-1} = ik_n - \xi_{\mathbf{k}}$ , nous pouvons écrire symboliquement :

$$G = [(G^0)^{-1} - \Sigma]^{-1} = G^0 + G^0 \Sigma G^0 + G^0 \Sigma G^0 \Sigma G^0 + \dots$$

D'un point de vue diagrammatique, les contributions qui peuvent être séparées en deux simplement en coupant un propagateur d'électron libre sont incluses dans ce développement et ne doivent pas être contenues dans la self-énergie elle-même. C'est la raison pour laquelle cette self-énergie est dite irréductible.

La version retardée s'obtient par prolongement analytique dans le plan complexe. La self-énergie contient alors une partie réelle et une partie imaginaire :

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + i\eta - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) - i\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)}.$$

Quand le système est bien décrit par des quasi-particules, les interactions modifient la relation de dispersion par la partie réelle de la self-énergie alors que la partie imaginaire contrôle le temps de vie des états. Nous reviendrons plus loin sur cette notion de quasi-particule. Le poids spectral devient quant à lui

$$A(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-2\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)}{(\omega - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma'(\mathbf{k}, \omega))^2 + (\Sigma''(\mathbf{k}, \omega))^2}. \quad (4.2)$$

Pouvant être interprété comme une distribution de probabilité, ce dernier doit obligatoirement être positif pour toutes les fréquences ce qui implique  $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega) < 0 \forall (\mathbf{k}, \omega)$ . De plus, les parties imaginaire et réelle de la self-énergie obéissent à des relations de causalité de Kramers-Kronig :

$$\Sigma'(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma'(\mathbf{k}, \infty) = P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\Sigma''(\mathbf{k}, \omega')}{\omega' - \omega} \quad (4.3)$$

$$\Sigma''(\mathbf{k}, \omega) = P \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\Sigma'(\mathbf{k}, \omega') - \Sigma'(\mathbf{k}, \infty)}{\omega' - \omega}.$$

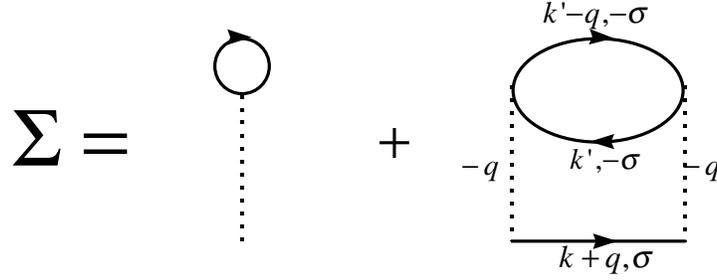


FIG. 4.1: Représentation diagrammatique de la self-énergie au second ordre en  $U$ . Les lignes pointillées représentent l'interaction et les lignes continues sont des propagateurs de particules libres.

La self-énergie tient son nom du fait qu'elle est la manifestation de l'interaction d'une particule avec elle-même par l'intermédiaire de son environnement. Elle représente la partie de l'énergie d'une particule qui est attribuable aux interactions avec les autres particules.

## 4.2 Théorie des perturbations au second ordre

Nous allons maintenant calculer la self-énergie à l'ordre d'interaction non-trivial le plus bas. Pour une interaction de Hubbard, il s'agit de la contribution en  $U^2$ . Le développement diagrammatique jusqu'à cet ordre est donné par la figure 4.1. Le diagramme d'ordre un donne une contribution  $Un/2$ . C'est le terme de Hartree. Ce terme n'est qu'un déplacement du potentiel chimique. Nous n'avons donc pas besoin d'en tenir compte. Le terme du second ordre n'est pas trivial par contre. C'est ce dernier que nous allons étudier dans ce chapitre.

La contribution d'ordre  $U^2$  s'écrit

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = -U^2 \frac{T^2}{N^2} \sum_{\mathbf{q}, iq_m} \sum_{\mathbf{k}', ik'_l} G^0(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, ik'_l - iq_m) G^0(\mathbf{k}', ik'_l) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_m)$$

où le signe devant l'expression est obtenu par la règle diagrammatique voulant qu'il y ait toujours un facteur  $(-1)^{n+F}$  où  $n$  est l'ordre du diagramme (ici  $n = 2$ ) et  $F$  le nombre de boucles de fermions dans le diagramme (ici  $F = 1$ ) [73]. Par ailleurs, tous les états de spin sont déterminés par le spin de la particule initiale. En effet,

l'interaction de Hubbard ne couple que les particules de spins opposés. Nous n'avons donc pas de facteur venant de la somme sur les états de spin.

La boucle fermionique apparaissant dans la figure 4.1 n'est rien d'autre que le diagramme de susceptibilité  $\chi^0$  (voir figure 3.1). À partir de l'équation 3.4, nous voyons que

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}', ik'_l} G^0(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, ik'_l - iq_m) G^0(\mathbf{k}', ik'_l) = -\frac{1}{2} \chi^0(-\mathbf{q}, -iq_m) = -\frac{1}{2} \chi^0(\mathbf{q}, iq_m).$$

La self-énergie devient donc

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U^2 T}{2 N} \sum_{\mathbf{q}, iq_m} \chi^0(\mathbf{q}, iq_m) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_m). \quad (4.4)$$

La somme sur les fréquences de Matsubara peut être effectuée exactement en utilisant la représentation spectrale de  $\chi^0$

$$\chi^0(\mathbf{q}, iq_m) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega')}{\omega' - iq_m}$$

et  $G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_m) = [ik_n + iq_m - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0]^{-1}$  :

$$\Rightarrow \Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U^2}{2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega'}{\pi} \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega') T \sum_{iq_m} \frac{1}{\omega' - iq_m} \frac{1}{ik_n + iq_m - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0}.$$

Sachant que [49]

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi T - \omega} + \frac{1}{2}$$

$$n_B(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega - 2ni\pi T} - \frac{1}{2},$$

nous trouvons en procédant par décomposition en fractions partielles que

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U^2}{2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega'}{\pi} \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega') \frac{n_B(\omega') + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}{ik_n + \omega' - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0}.$$

Nous pouvons passer à la limite thermodynamique et remplacer la somme sur les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  par une intégrale. Après prolongement analytique, la self-énergie devient

$$\begin{aligned}\Sigma'(\mathbf{k},\omega) &= \frac{U^2}{8\pi^3}P \int d^2q \int d\omega' \chi^{0''}(\mathbf{q},\omega') \frac{n_B(\omega') + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}{\omega + \omega' - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0} \\ \Sigma''(\mathbf{k},\omega) &= -\frac{U^2}{8\pi^2} \int d^2q \int d\omega' \chi^{0''}(\mathbf{q},\omega') [n_B(\omega') + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)] \delta(\omega + \omega' - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0).\end{aligned}\tag{4.5}$$

### 4.3 Surface de Fermi circulaire

Dans cette section, nous allons appliquer la théorie des perturbations au second ordre au cas d'une surface de Fermi circulaire. Nous avons déjà étudié le comportement des fluctuations dans un tel contexte au chapitre précédent. Ces résultats seront utiles ici.

Nous partons bien entendu de l'équation 4.5 dans laquelle nous allons substituer l'expression de la susceptibilité pour le gaz d'électrons libres. À température nulle et au niveau de Fermi, nous avons

$$\Sigma''(k_F^0,\omega) \stackrel{T=0}{=} \frac{U^2}{8\pi^2} \int d^2q \int_{-\omega}^0 d\omega' \chi^{0''}(q,\omega') \delta(\omega + \omega' - \xi_{\mathbf{k}_F^0+\mathbf{q}}^0).$$

Il est évidemment plus commode de travailler en coordonnées polaires. Posons  $\theta$  tel que  $\xi_{\mathbf{k}_F^0+\mathbf{q}}^0 = q^2 + 2k_F^0 q \cos \theta$ . Le delta de Dirac devient

$$\delta(\omega + \omega' - q^2 - 2k_F^0 q \cos \theta) = \frac{\delta\left(\theta \pm \cos^{-1}\left(\frac{\omega+\omega'-q^2}{2k_F^0 q}\right)\right)}{2k_F^0 q |\sin \theta|}.$$

L'angle  $\theta$  est intégré dans l'expression pour  $\Sigma''$ . Nous trouvons

$$\Sigma''(k_F^0,\omega) = \frac{U^2}{4\pi^2} \int_0^\infty q dq \int_{-\omega}^0 d\omega' \frac{\chi^{0''}(q,\omega')}{\sqrt{4k_F^0{}^2 q^2 - (\omega + \omega' - q^2)^2}}.$$

Nous utilisons la convention habituelle i.e. que l'intervalle d'intégration est coupé quand l'argument du radical devient négatif.

Nous allons maintenant faire quelques approximations. Seuls les processus physiques qui se déroulent très près de la surface de Fermi nous intéressent. Ces processus sont caractérisés par  $|\omega| \ll k_F^{02}$  et  $q \ll k_F^0$ . Nous remplaçons donc  $\chi^{0''}$  par l'approximation 3.8 :

$$\begin{aligned}\Sigma''(k_F^0, \omega) &\sim U^2 \int_0^\infty q dq \int_{-\omega}^0 d\omega' \frac{\omega'}{2\pi q \sqrt{4k_F^{02} - q^2}} \frac{1}{\sqrt{4k_F^{02} q^2 - (\omega + \omega' - q^2)^2}} \\ &\sim \frac{U^2}{k_F^{02}} \int_{-\omega}^0 \omega' d\omega' \int_{\sqrt{\omega'/2}}^{\Delta q \ll k_F^0} \frac{dq}{q} + \dots\end{aligned}$$

où nous avons tenu compte du fait que l'approximation utilisée pour  $\chi^{0''}$  n'est justifiée que pour  $\sqrt{\omega'/2} < q$ . Le comportement dominant à basse fréquence est donc de la forme

$$\Sigma''(k_F^0, \omega) \sim \frac{U^2}{k_F^{02}} \omega^2 \ln |\omega| + \dots \quad (4.6)$$

en accord avec le résultat de la référence [35].

Ce comportement en fréquence à température nulle est caractéristique d'un liquide de Fermi à deux dimensions. Plus précisément, le comportement en  $\omega^2$  est celui d'un système de quasi-particules alors que la correction logarithmique  $\ln |\omega|$  vient de la bidimensionnalité du problème. En effet, à trois dimensions, le comportement est purement quadratique en fréquence. Cette différence vient simplement du fait qu'à trois dimensions, l'élément d'intégration sur  $q$  est  $q^2 dq$  et non pas  $q dq$ .

De l'équation 4.6 nous pouvons déduire le comportement à basse fréquence de la partie réelle de la self-énergie. Il faut utiliser une des relations de causalité de Kramers-Kronig (équation 4.3) :

$$\Sigma'(k_F^0, \omega) \sim \frac{U^2}{k_F^{02}} P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\omega'^2 \ln |\omega'|}{\omega' - \omega} + \dots$$

Sachant que

$$\begin{aligned}\int d\omega' \frac{\omega'^2 \ln \omega'}{\omega' - \omega} &= \omega\omega' \ln \omega' - \omega\omega' + \frac{1}{2}\omega'^2 \ln \omega' - \frac{1}{4}\omega'^2 \\ &\quad + \omega^2 \ln \omega \ln \frac{\omega' - \omega}{\omega} - \omega^2 \operatorname{dilog} \frac{\omega'}{\omega},\end{aligned}$$

nous trouvons

$$\begin{aligned} P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} \frac{d\omega' \omega'^2 \ln |\omega'|}{\pi \omega' - \omega} &= - \int_{\eta}^{\Delta\omega} \frac{d\omega' \omega'^2 \ln |\omega'|}{\pi \omega' + \omega} + \int_{\eta}^{\Delta\omega} \frac{d\omega' \omega'^2 \ln |\omega'|}{\pi \omega' - \omega} \\ &= 2\omega\Delta\omega \ln \Delta\omega - \omega\Delta\omega \sim -\omega \quad \text{car } \ln \Delta\omega < 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Sigma'(k_F^0, \omega) = -\alpha\omega + \dots \quad \text{avec } \alpha > 0.$$

Selon la théorie du liquide de Fermi, l'existence de quasi-particules implique que le poids spectral contient une partie cohérente. Cette partie cohérente est un pic dont la largeur est suffisamment petite par rapport à l'échelle d'énergie thermique. Partant de l'équation 4.2 pour le poids spectral, nous introduisons l'énergie  $E_{\mathbf{k}} - \mu$  des quasi-particules i.e. la solution de l'équation  $[\omega - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma'(\mathbf{k}, \omega)]_{\omega=E_{\mathbf{k}}-\mu} = 0$  [73]. Cette valeur de la fréquence correspond à la position d'un pic de quasi-particule. Un développement en fréquence autour de cette énergie nous donne :

$$\omega - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) \approx \left( 1 - \left[ \frac{\partial \Sigma'(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right]_{\omega=E_{\mathbf{k}}-\mu} \right) (\omega - E_{\mathbf{k}} + \mu).$$

Le poids des quasi-particules est défini par

$$Z_{\mathbf{k}} \equiv \left( 1 - \left[ \frac{\partial \Sigma'(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \right]_{\omega=E_{\mathbf{k}}-\mu} \right)^{-1}$$

et leur taux de diffusion s'écrit

$$\Gamma_{\mathbf{k}}(\omega) \equiv -Z_{\mathbf{k}} \Sigma''(\mathbf{k}, \omega)$$

de sorte que le poids spectral a la forme suivante :

$$A(\mathbf{k}, \omega) = 2Z_{\mathbf{k}} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}(\omega)}{(\omega - E_{\mathbf{k}} + \mu)^2 + (\Gamma_{\mathbf{k}}(\omega))^2} + \text{partie incohérente.}$$

Cette dernière expression justifie en soi les définitions de  $Z_{\mathbf{k}}$  et  $\Gamma_{\mathbf{k}}(\omega)$ . La partie cohérente est une lorentzienne lorsque que  $\Gamma_{\mathbf{k}}$  est indépendant de la fréquence. Le

taux de diffusion joue le rôle de la largeur du pic. Le temps de vie des quasi-particules est donc d'autant plus long que le pic est étroit. D'autre part, sachant que  $A(\mathbf{k}, \omega)$  est normalisé, nous voyons que  $Z_{\mathbf{k}}$  donne la proportion de poids spectral qui se trouve dans la partie cohérente.

Pour pouvoir affirmer qu'un système est bien décrit par des quasi-particules, cette décomposition du poids spectral doit avoir un sens physique. Considérons notre système à surface de Fermi circulaire. En vertu du théorème de Luttinger [48], le volume sous-tendu par la surface de Fermi doit rester le même quand les interactions sont introduites. Le niveau de Fermi ne change donc pas ( $k_F = k_F^0$ ). Le poids des quasi-particules au niveau de Fermi est

$$Z_{k_F^0} = \frac{1}{1 + \alpha} \Rightarrow 0 < Z_{k_F^0} \leq 1.$$

Notre poids de quasi-particule a un sens. Un poids négatif ou supérieur à un aurait automatiquement voulu dire que le système décrit n'est pas un liquide de Fermi. D'autre part :

$$\Gamma_{k_F^0}(\omega) \sim -Z_{k_F^0} \frac{U^2}{k_F^{02}} \omega^2 \ln |\omega|.$$

La largeur s'annule à température nulle au niveau de Fermi ( $k = k_F^0$  et  $\omega = 0$ ) ce qui veut dire que le temps de vie des quasi-particules devient infini. C'est une caractéristique fondamentale du liquide de Fermi.

En résumé, il appert que la théorie des perturbations au second ordre prévoit que notre système à surface de Fermi circulaire est bien décrit par un liquide de Fermi bidimensionnel i.e. avec une correction logarithmique au temps de vie des quasi-particules.

## 4.4 Surface de Fermi parfaitement emboîtée

Nous allons maintenant étudier la self-énergie obtenue par la théorie des perturbations pour une surface de Fermi parfaitement emboîtée. Nous utiliserons la relation de dispersion d'une bande liaison forte sans saut au second voisin. Dans ce cas, nous savons que la surface de Fermi est emboîtée à demi-remplissage ( $n = 1$ ,  $\mu^0 = 0$ ,

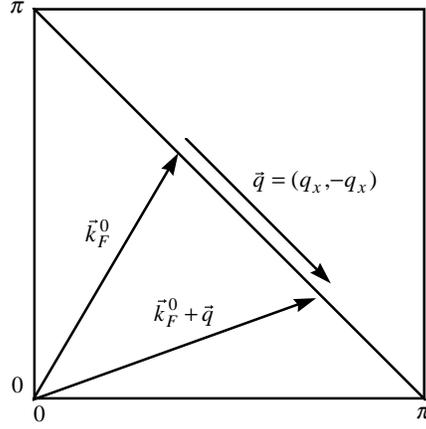


FIG. 4.2: Surface de Fermi emboîtée : importance des fluctuations dont le vecteur d'onde  $q$  est diagonal.

$t' = 0$ ). Nous présenterons d'abord les résultats obtenus à partir de calculs numériques pour ensuite prendre le temps d'analyser différents cas limites. Les détails du calcul numérique sont présentés dans l'annexe D.

Nous connaissons déjà, pour en avoir parlé au chapitre précédent, les propriétés des fluctuations dans un tel système. Une différence importante avec le cas d'une surface de Fermi circulaire est la présence de singularités logarithmiques dans la susceptibilité. Pour des vecteurs d'onde à peu près parallèles à une diagonale de la zone de Brillouin, la susceptibilité prend la forme suivante :

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) \sim -\frac{\omega}{T} \ln \left| \frac{|\omega| - \omega_s(\mathbf{q})}{\Delta^2} \right| \quad \text{pour } |\omega|, \omega_s \lesssim \pi T \quad \text{avec } \Delta \sim \pi T/W. \quad (4.7)$$

avec  $\omega_s(\mathbf{q}) = 4 |\sin(|q_x|/2) - \sin(|q_y|/2)|$ . Nous voulons savoir quel est l'effet de ces singularités sur la self-énergie. En vertu de l'équation 4.5, nous avons

$$\Sigma''(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{U^2}{8\pi^2} \int d^2q \chi^{0''}(\mathbf{q}, \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - \omega) [n_B(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 - \omega) + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)] \quad (4.8)$$

où le delta de Dirac a été intégré sur la fréquence. L'expression qui nous reste peut être évaluée numériquement.

Les singularités contenues dans  $\chi^{0''}$  sont à basse fréquence quand le vecteur d'onde  $\mathbf{q}$  est à peu près parallèle à une diagonale de la zone de Brillouin, i.e. quand  $|q_x| \approx |q_y|$ . Or, ce sont justement des vecteurs qui relient des points de la surface de Fermi

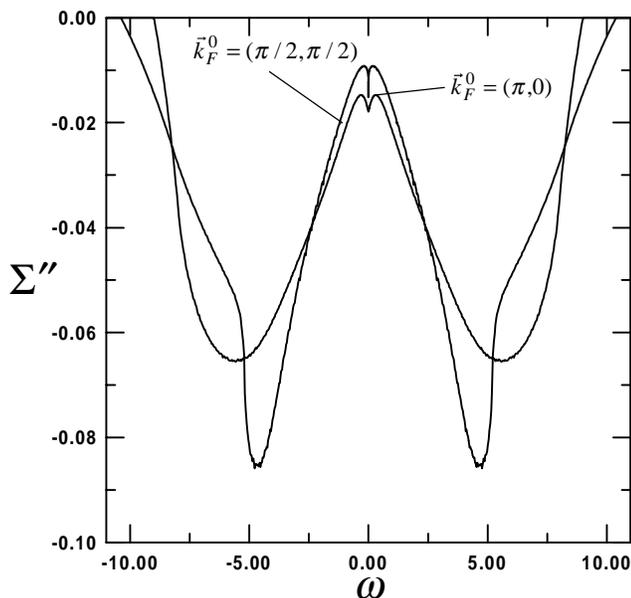


FIG. 4.3:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour une surface de Fermi emboîtée.  $T = 0, 2$ ,  $n = 1$ ,  $t' = 0$ ,  $U = 1$ .

quand cette dernière est emboîtée. Si le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  est choisi dans le premier quadrant et sur la surface de Fermi, tous les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  de la forme  $(q_x, -q_x)$  nous ramènent à un autre point d'énergie nulle. Cette situation est illustrée sur la figure 4.2. Les propriétés de la self-énergie à basse fréquence sont donc probablement influencées par ces contributions singulières au voisinage de la surface de Fermi.

La figure 4.3 montre la partie imaginaire de la self-énergie pour deux vecteurs d'onde situés sur la surface de Fermi. Leur allure générale s'explique assez bien. À très haute fréquence, i.e. quand  $|\omega| \gtrsim 8$ , le taux de diffusion des particules s'annule car elles sont contraintes de rester dans la bande. Pour des fréquences plus petites ( $|\omega| \lesssim 8$ ), le taux de diffusion est au contraire très élevé car le principe de Pauli limite peu la diffusion entre les particules et leur énergie n'est pas assez élevée pour être limitée par la largeur de bande. Enfin, à basse fréquence ( $|\omega| \ll 8$ ), le taux de diffusion est moins élevé car le principe de Pauli limite davantage la diffusion au voisinage de la surface de Fermi.

La région qui nous intéresse est celle de basse fréquence. Notons la présence d'une anomalie dans la région  $|\omega| \lesssim \pi T$ . Dans cet intervalle, le taux de diffusion se met à augmenter légèrement près de  $\omega = 0$ . Cette région est agrandie sur la figure 4.4. Ce comportement est très différent de celui d'un liquide de Fermi et est une conséquence

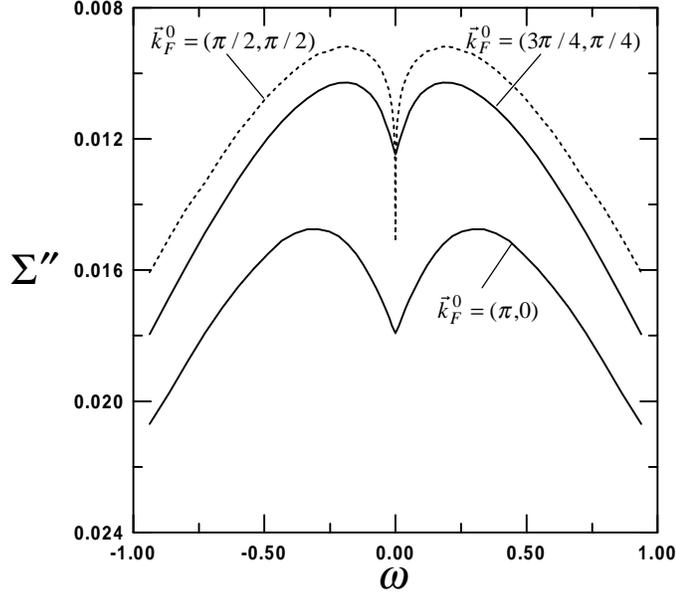


FIG. 4.4:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour une surface de Fermi emboîtée : largeur de l'anomalie de basse fréquence.  $T = 0, 2$ ,  $n = 1$ ,  $t' = 0$ ,  $U = 1$ .

des singularités dans les fluctuations. Alors que la pente de  $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)$  devient infinie quand  $\omega \rightarrow 0$  en  $(\pi/2, \pi/2)$ , elle reste constante pour les deux autres vecteurs de la surface de Fermi.

Cette anomalie de basse fréquence est absente pour les vecteurs d'onde qui sont loin de la surface de Fermi (figure 4.5). Les fluctuations diagonales ont moins d'importance pour ces vecteurs. L'effet des singularités sur les propriétés à une particule n'est donc pas aussi déterminant dans ces cas-là.

Intéressons-nous maintenant aux effets de la température sur  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  (figure 4.6). D'une part, la quantité  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)$  diminue avec la température. Ce n'est pas surprenant. En l'absence d'ordre à courte portée, le taux de diffusion est moins grand s'il y a moins d'agitation thermique. D'autre part, l'intervalle de fréquence caractéristique de l'anomalie observée plus haut devient plus étroit quand nous diminuons la température. Cet intervalle a une largeur de l'ordre de  $2\pi T$ .

La figure 4.7 montre le comportement de  $\Sigma''(\mathbf{k}, 0)$  en fonction de la température pour différents vecteurs d'onde. Sur la surface de Fermi, le taux de diffusion a un comportement très linéaire en  $T$  quand  $T \rightarrow 0$ . Loin de la surface de Fermi, les courbes semblent avoir un comportement en  $T^2$ . Ici encore, il appert que le scénario

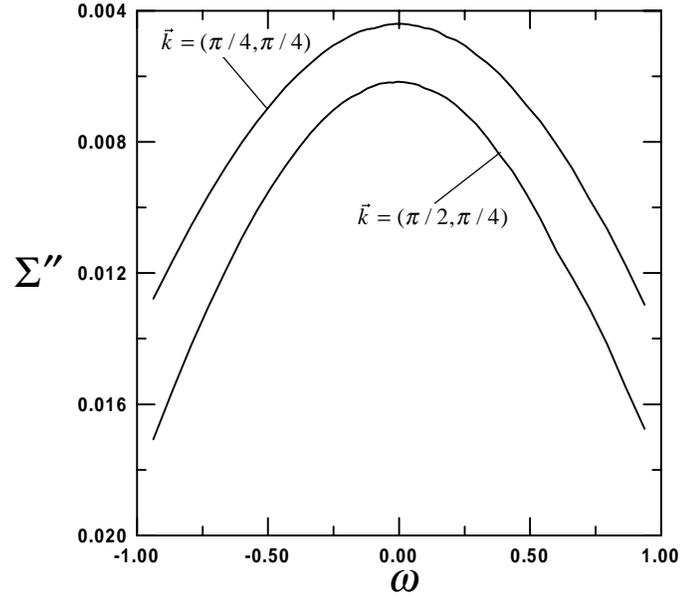


FIG. 4.5:  $\Sigma''(k, \omega)$  vs  $\omega$  pour une surface de Fermi emboîtée : vecteurs d'onde loin de la surface de Fermi.  $T = 0, 2$ ,  $n = 1$ ,  $t' = 0$ ,  $U = 1$ .

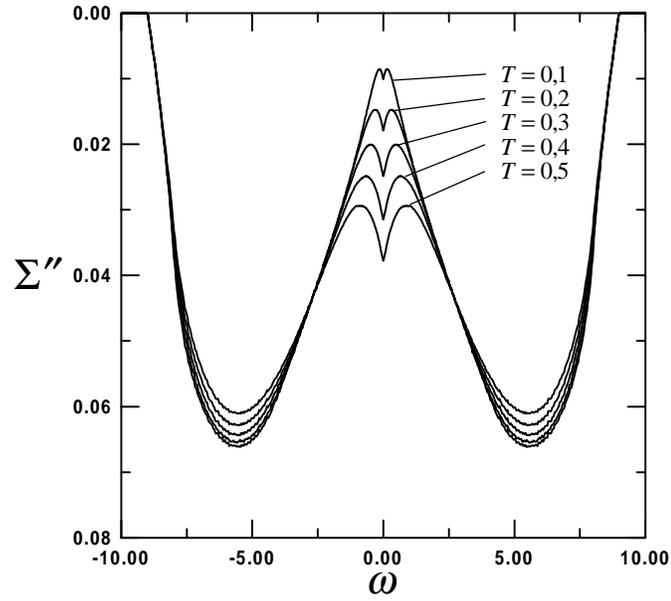


FIG. 4.6:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour une surface de Fermi emboîtée : effet de la température.  $k_F^0 = (\pi, 0)$ ,  $n = 1$ ,  $t' = 0$ ,  $U = 1$ .

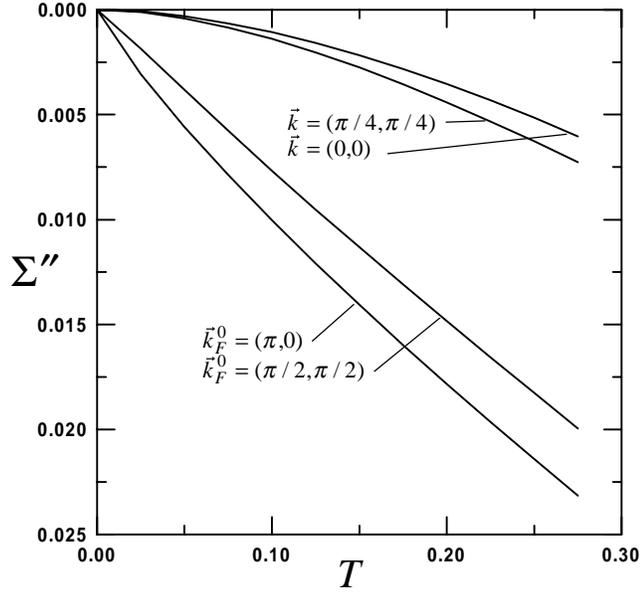


FIG. 4.7:  $\Sigma''(k, 0)$  vs  $T$  pour une surface de Fermi emboîtée.  $n = 1$ ,  $t' = 0$ ,  $U = 1$ .

diffère selon que le vecteur  $\mathbf{k}$  se trouve ou pas sur la surface de Fermi.

#### 4.4.1 Analyse du comportement de $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ à basse énergie

Les résultats numériques présentés à la sous-section précédente montrent que la self-énergie à demi-remplissage a des caractéristiques inhabituelles. Dans cette sous-section, nous allons analyser le comportement de la partie imaginaire de la self-énergie à basse fréquence et à basse température.

Un comportement quadratique en fréquence et en température est caractéristique d'un liquide de Fermi à trois dimensions :  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim (\omega^2 + \pi^2 T^2)$ . Pour un liquide de Fermi à deux dimensions, les termes quadratiques sont flanqués d'une correction logarithmique venant de la faible dimensionnalité [35]. Cette correction étant dominée par le facteur quadratique, nous avons qualitativement le même comportement à basse énergie dans les deux cas. Les résultats numériques obtenus à demi-remplissage (figures 4.3 à 4.7) montrent que  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  n'est pas un liquide de Fermi lorsque la surface de Fermi est parfaitement emboîtée.

À fréquence nulle, l'expression 4.8 prend la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\Sigma''(\mathbf{k},0) &= -\frac{U^2}{8\pi^2} \int d^2q \chi^{0''}(\mathbf{q}, \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) [n_B(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)] \\
&= -\frac{U^2}{4\pi^2} \int d^2q \frac{\chi^{0''}(\mathbf{q}, \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}{\sinh(\beta\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Le facteur  $[\sinh(\beta\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)]^{-1}$  contrôle le volume de l'espace de phase où les processus de diffusions peuvent avoir lieu. Il tient compte du principe de Pauli. À température nulle, ce facteur tend vers zéro pour toutes les valeurs de  $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0$ .  $\Sigma''(\mathbf{k},0)$  s'annule donc dans la limite  $T \rightarrow 0$  sauf si  $\chi^{0''}$  est trop divergent. Les singularités contenues dans  $\chi^{0''}$  étant toutes intégrables, nous avons

$$\Sigma''(\mathbf{k},0) \stackrel{T \rightarrow 0}{\equiv} 0 \quad \forall \mathbf{k}.$$

Essayons maintenant d'établir le comportement à faible température de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  pour  $|\omega| \ll \pi T$ . Les contributions significatives obéissent à la contrainte  $|\xi_{\mathbf{k}_F^0+\mathbf{q}}^0| \lesssim \pi T$ . Quand la température est faible, cette contrainte restreint sévèrement le domaine des vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$ . Choisissons  $\mathbf{k}_F^0$  dans le premier quadrant de la zone de Brillouin. Les contributions singulières viendront des vecteurs  $\mathbf{q}$  de la forme  $(q_x, -q_x + \delta q_y)$  (voir figure 4.2). La fréquence singulière devient

$$\omega_s(\mathbf{q}) \approx 2|\delta q_y| \cos(q_x/2).$$

Pour les vecteurs  $\mathbf{q}$  raisonnablement parallèles à la surface de Fermi, la relation de dispersion prend la forme approximative

$$\xi_{\mathbf{k}_F^0+\mathbf{q}}^0 \approx 2 \sin(k_y - q_x) \delta q_y \equiv v \delta q_y. \tag{4.10}$$

Nous cherchons à déterminer l'effet des singularités logarithmiques de  $\chi^{0''}$  sur la self-énergie. Il faut donc utiliser l'expression 4.7. Il est possible de modifier cette forme approchée dans le but de faciliter le calcul :

$$\begin{aligned}
\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &\sim -\frac{\omega}{T} \ln \left| \frac{|\omega| - \omega_s(\mathbf{q})}{\Delta^2} \right| \\
&\rightarrow -\frac{\omega}{T} \left\{ \ln \left| \frac{\omega - 2\delta q_y \cos(q_x/2)}{\Delta^2} \right| + \ln \left| \frac{\omega + 2\delta q_y \cos(q_x/2)}{\Delta^2} \right| \right\}.
\end{aligned}$$

Cette expression contient des singularités aux mêmes endroits que l'expression 4.7 et est impaire en fréquence. Il est commode de travailler avec cette dernière car elle contient moins de valeurs absolues. L'expression 4.8 devient

$$\begin{aligned} \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) &\sim \frac{U^2}{T} \int dq_x \int_{-\Delta q_y}^{\Delta q_y} d(\delta q_y) (v\delta q_y - \omega) [n_B(v\delta q_y - \omega) + f(v\delta q_y)] \\ &\times \left\{ \ln \left| \frac{v\delta q_y - \omega - 2\delta q_y \cos(q_x/2)}{\Delta^2} \right| + \ln \left| \frac{v\delta q_y - \omega + 2\delta q_y \cos(q_x/2)}{\Delta^2} \right| \right\} \end{aligned}$$

où  $\Delta q_y$  est déterminé avec la contrainte  $|\xi_{\mathbf{k}_F^0 + \mathbf{q}}^0| \lesssim \pi T$ . Nous ne pouvons pas en déduire directement  $\Delta q_y \sim \pi T/v$  car  $v$  s'annule pour certaines valeurs de  $q_x$  ce qui fait diverger le résultat de l'intégration. Typiquement, la vitesse  $v$  est de l'ordre de l'unité. Nous poserons donc  $\Delta q_y \sim \pi T$ .

Nous cherchons le comportement dominant en fréquence dans la limite  $\omega \rightarrow 0$ . Le facteur  $(v\delta q_y - \omega) [n_B(v\delta q_y - \omega) + f(v\delta q_y)]$  est analytique et admet un développement en puissance de  $\omega$ . Une contribution non-analytique ne peut venir que de la somme des logarithmes. Nous allons donc négliger la fréquence partout sauf dans ces derniers :

$$\begin{aligned} \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) &\sim \frac{U^2}{T} \int dq_x \int_{-\pi T}^{\pi T} d(\delta q_y) \frac{v\delta q_y}{\sinh(v\delta q_y/T)} \\ &\times \left\{ \ln \left| \frac{v\delta q_y - \omega - 2\delta q_y \cos(q_x/2)}{\Delta^2} \right| + \ln \left| \frac{v\delta q_y - \omega + 2\delta q_y \cos(q_x/2)}{\Delta^2} \right| \right\}. \end{aligned}$$

En utilisant

$$\frac{v\delta q_y}{\sinh(v\delta q_y/T)} \Big|_{|v\delta q_y| \ll \pi T} \approx T,$$

l'expression à évaluer devient

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int dq_x \int_{-\pi T}^{\pi T} d(\delta q_y) \ln \left| \frac{\alpha \delta q_y - \omega}{\Delta^2} \right|$$

où  $\alpha \equiv v \pm 2 \cos(q_x/2) = 2 \sin(k_y - q_x) \pm 2 \cos(q_x/2)$ . Une fois l'intégrale sur  $\delta q_y$  effectuée, nous obtenons

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int dq_x \left\{ \pi T \ln \left| \frac{(\alpha \pi T)^2 - \omega^2}{\Delta^4} \right| + \frac{\omega}{\alpha} \ln \left| \frac{\alpha \pi T + \omega}{\alpha \pi T - \omega} \right| - 2\pi T \right\}. \quad (4.11)$$

À ce stade-ci de notre analyse, nous pouvons déjà déduire le comportement en température de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)$ . À fréquence nulle, l'expression 4.11 devient

$$\begin{aligned}\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) &\sim U^2 \pi T \int dq_x \left\{ \ln \left| \frac{\pi T}{\Delta^2} \right| + \ln \left| \frac{\alpha}{\Delta^2} \right| - 1 \right\} \\ &\Rightarrow \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{T \rightarrow 0}{\sim} T \ln T.\end{aligned}\tag{4.12}$$

À basse température, le taux de diffusion se comporte donc comme  $T \ln T$ . La correction logarithmique étant dominée par le facteur linéaire en  $T$ , elle est difficile à voir numériquement. Ce résultat est en accord avec les calculs numériques présentés à la sous-section précédente.

Revenons maintenant à la dépendance en fréquence de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ . L'expression 4.11 admet un développement en puissance de la fréquence lorsque  $\alpha \neq 0$ . L'intégrale sur  $q_x$  couvre tout l'intervalle de sorte que le cas  $\alpha \approx 0$  doit être considéré dans notre analyse. S'il existe une contribution non-analytique en fréquence, elle doit venir des valeurs de  $q_x$  pour lesquelles le coefficient  $\alpha$  est très petit. Posons  $\alpha(q_x^0) \equiv 0$  et effectuons un développement autour de  $q_x \approx q_x^0$  :

$$\begin{aligned}\alpha(q_x^0 + \delta q_x) &= 2 \sin(k_y - q_x^0 - \delta q_x) \pm 2 \cos(q_x^0/2 + \delta q_x/2) \\ &\approx 2 \sin(k_y - q_x^0) - 2 \cos(k_y - q_x^0) \delta q_x - \sin(k_y - q_x^0) (\delta q_x)^2 \\ &\quad \pm 2 \cos(q_x^0/2) \mp \sin(q_x^0/2) \delta q_x \mp \frac{1}{4} \cos(q_x^0/2) (\delta q_x)^2 \\ &= a_1 \delta q_x + a_2 (\delta q_x)^2\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}a_1 &\equiv -2 \cos(k_y - q_x^0) \mp \sin(q_x^0/2) \\ \text{et } a_2 &\equiv -\sin(k_y - q_x^0) \mp \frac{1}{4} \cos(q_x^0/2).\end{aligned}$$

Après substitution dans l'équation 4.11, nous avons

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int_{-\Delta q_x}^{\Delta q_x} d(\delta q_x) \left\{ \pi T \ln \left| \frac{(a_1 \pi T)^2 (\delta q_x)^2 - \omega^2}{\Delta^4} \right| + \frac{\omega}{a_1 \delta q_x} \ln \left| \frac{a_1 \delta q_x \pi T + \omega}{a_1 \delta q_x \pi T - \omega} \right| \right\}.$$

Nous n'avons gardé que l'ordre linéaire en  $\delta q_x$ . Nous verrons plus loin dans quelle circonstance le deuxième ordre en  $\delta q_x$  est important. À l'ordre le plus bas en fréquence, le premier terme sous l'intégrale donne un comportement quadratique. Le second terme par contre donne une contribution non-analytique. C'est donc celui que nous retiendrons. Sachant que

$$\omega \ln \left| \frac{a_1 \delta q_x \pi T + \omega}{a_1 \delta q_x \pi T - \omega} \right| \xrightarrow{\omega \rightarrow -\omega} -\omega \ln \left| \frac{a_1 \delta q_x \pi T - \omega}{a_1 \delta q_x \pi T + \omega} \right| = \omega \ln \left| \frac{a_1 \delta q_x \pi T + \omega}{a_1 \delta q_x \pi T - \omega} \right|,$$

écrivons

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int_{-\Delta q_x}^{\Delta q_x} d(\delta q_x) \frac{|\omega|}{a_1 \delta q_x} \ln \left| \frac{a_1 \delta q_x \pi T + |\omega|}{a_1 \delta q_x \pi T - |\omega|} \right|.$$

Effectuons le changement de variable  $x = a_1 \delta q_x \pi T / |\omega|$  :

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 |\omega| \int_{-\Delta x}^{\Delta x} \frac{dx}{x} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right|.$$

Les bornes de l'intégrale sur  $x$  deviennent infinies quand  $\omega \rightarrow 0$ . Le résultat de cette intégrale est fini et positif. Nous pouvons donc en déduire :

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) - \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} |\omega| \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 \neq (\pi/2, \pi/2).$$

Ce résultat n'est pas justifié à  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$  car le coefficient  $a_1$  est nul à ce point de la surface de Fermi. En effet, si  $k_y = \pi/2$ , nous avons :

$$\alpha = [2 \cos(q_x) - 2 \cos(q_x/2)]_{q_x=0} = 0$$

$$\Rightarrow a_1 = [2 \sin(q_x^0) + \sin(q_x^0/2)]_{q_x^0=0} = 0.$$

Nous devons refaire le même raisonnement pour ce point de la surface de Fermi mais cette fois en utilisant  $\alpha(q_x^0 + \delta q_x) \approx a_2 (\delta q_x)^2$ . Les étapes du calcul sont les mêmes et mènent au résultat

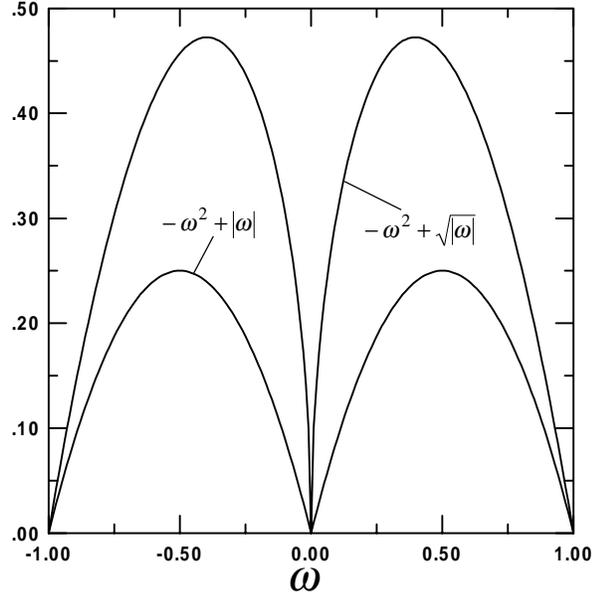


FIG. 4.8: Fonctions  $-\omega^2 + |\omega|$  et  $-\omega^2 + \sqrt{|\omega|}$  vs  $\omega$ .

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int_{-\Delta q_x}^{\Delta q_x} d(\delta q_x) \frac{|\omega|}{a_2(\delta q_x)^2} \ln \left| \frac{a_2(\delta q_x)^2 \pi T + |\omega|}{a_2(\delta q_x)^2 \pi T - |\omega|} \right|.$$

Posons  $x = a_2(\delta q_x)^2 \pi T / |\omega|$  :

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \sqrt{\frac{|\omega| \pi T}{a_2}} \int_{-\Delta x}^{\Delta x} \frac{dx}{x^{3/2}} \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right|,$$

d'où

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) - \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} \sqrt{|\omega|} \text{ pour } \mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$$

en accord avec les résultats numériques de la sous-section précédente.

Le comportement à basse fréquence de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  est une superposition d'une forme quadratique et d'une forme non-analytique. La figure 4.8 montre les fonctions  $-\omega^2 + |\omega|$  et  $-\omega^2 + \sqrt{|\omega|}$ . L'allure des courbes est similaire à ce que nous avons obtenu numériquement (voir figure 4.4).

Un comportement en  $|\omega|$  a déjà été observé dans les mêmes circonstances par Galan *et al.* [27]. Malheureusement, seul le traitement numérique a été effectué par

ces auteurs. C'est la raison pour laquelle ils n'ont pas identifié la cause de ce comportement non-analytique i.e. les singularités logarithmiques de la partie imaginaire de la susceptibilité.

Par ailleurs, notre résultat diffère du comportement  $|\omega|^{4/3}$  obtenu par M.H. Sharifzadeh Amin pour un liquide de Fermi près d'un point d'inflexion de la surface de Fermi à température nulle [69]. La courbure de notre surface de Fermi étant nulle partout (emboîtement parfait), ce résultat pourrait s'appliquer à notre problème. Or, dans les travaux de Sharifzadeh Amin, la structure de la susceptibilité et conséquemment, son effet sur les propriétés de la self-énergie sont complètement négligés.

#### 4.4.2 Dépendance en vecteur d'onde de $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$

La dépendance en vecteur d'onde de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  à basse fréquence est reliée à la valeur de  $q_x = q_x^0$  qui annule le coefficient  $\alpha = 2 \sin(k_y - q_x) \pm 2 \cos(q_x/2)$ . Le choix d'un point précis de la surface de Fermi détermine une valeur de  $q_x^0$ . Les fluctuations  $\chi^{0m}(\mathbf{q} \approx (q_x^0, -q_x^0), \omega \ll \pi T)$  sont responsables du comportement non-analytique à basse fréquence. Étant donné que celles-ci dépendent fortement du vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ , l'anomalie de la self-énergie sera plus ou moins prononcée selon la valeur de  $q_x^0$ .

Nous avons vu qu'au vecteur  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$ , la dépendance en fréquence de la self-énergie est différente des autres points de la surface de Fermi. Les vecteurs  $\mathbf{q}$  responsables de l'anomalie dans ce cas particulier sont petits :  $|\mathbf{q}| \approx 0$ . À  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0)$ , nous avons

$$\alpha(q_x^0) = [-2 \sin(q_x^0) \pm 2 \cos(q_x^0/2)]_{q_x^0 = \pm\pi} = 0.$$

Il faut donc retenir la valeur  $q_x^0 = \pm\pi$  dans ce dernier cas. Sachant que les fluctuations sont maximales à  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , il n'est pas étonnant que l'anomalie soit plus prononcée à  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0)$  (voir figure 4.4).

La fonction  $v = 2 \sin(k_y - q_x)$  est la composante selon  $y$  de la vitesse de l'électron au point d'arrivée sur la surface de Fermi. Dans un même ordre d'idée, la relation  $\omega_s = 2 |\delta q_y| \cos(q_x/2)$  suggère que la composante de vitesse selon  $y$  pour l'excitation particule-trou est donnée par  $v_{pt} = 2 \cos(q_x/2)$ . Le point de non-analyticité est donc attribuable aux processus pour lesquels l'électron a la même vitesse que l'excitation particule-trou avec laquelle il se couple.

### 4.4.3 Calcul de $\Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega)$

Connaissant le comportement à basse fréquence de la partie imaginaire de la self-énergie, nous sommes maintenant en mesure de calculer le comportement en fréquence de la partie réelle. Pour ce faire, nous allons utiliser la relation de causalité de Kramers-Kronig (équation 4.3).

Commençons par calculer la contribution du terme d'ordre zéro en fréquence. Nous savons qu'elle est de la forme  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \sim T \ln T + O(T)$ . Nous avons

$$P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{1}{\omega' - \omega} = \ln \left| \frac{\Delta\omega - \omega}{\Delta\omega + \omega} \right| \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\sim} -\omega.$$

Si la contribution dominante était de cette forme, la pente à l'origine de  $\Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  aurait le bon signe pour que la notion de quasi-particule ait un sens.

La contribution dominante à la partie imaginaire de la self-énergie est de la forme  $|\omega|$ . Effectuons la transformation de Kramers-Kronig :

$$\begin{aligned} P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{|\omega'|}{\omega' - \omega} &= \int_{-\Delta\omega}^0 d\omega' \frac{-\omega'}{\omega' - \omega} + \int_0^{\omega-\eta} d\omega' \frac{\omega'}{\omega' - \omega} + \int_{\omega+\eta}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{\omega'}{\omega' - \omega} \\ &\sim -\omega \ln |\omega| \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} -\omega \ln |\omega| \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 \neq (\pi/2, \pi/2).$$

Nous avons vu qu'au vecteur d'onde  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$ , le comportement de la partie imaginaire est de la forme  $\sim \sqrt{|\omega|}$ . Nous avons donc :

$$\begin{aligned} P \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{\sqrt{|\omega'|}}{\omega' - \omega} &= - \int_0^{\Delta\omega} d\omega' \frac{\sqrt{\omega'}}{\omega' + \omega} + \int_0^{\omega-\eta} d\omega' \frac{\sqrt{\omega'}}{\omega' - \omega} + \int_{\omega+\eta}^{\Delta\omega} d\omega' \frac{\sqrt{\omega'}}{\omega' - \omega} \\ &\sim \text{sgn}(\omega) \sqrt{|\omega|}. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} \text{sgn}(\omega) \sqrt{|\omega|} \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2).$$

À basse fréquence, la partie réelle de la self-énergie est une superposition des comportements  $-\omega$  et  $-\omega \ln |\omega|$  ou  $\text{sgn}(\omega) \sqrt{|\omega|}$  selon le vecteur d'onde considéré.

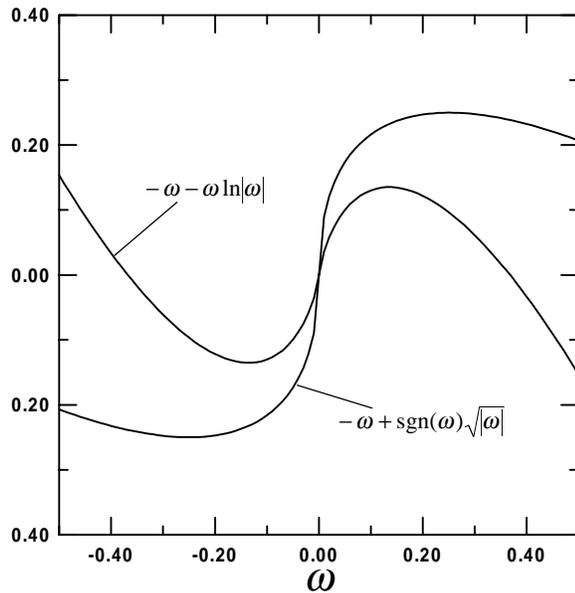


FIG. 4.9: Fonctions  $-\omega - \omega \ln |\omega|$  et  $-\omega + \text{sgn}(\omega)\sqrt{|\omega|}$  vs  $\omega$ .

Les fonctions  $-\omega - \omega \ln |\omega|$  et  $-\omega + \text{sgn}(\omega)\sqrt{|\omega|}$  sont illustrées sur la figure 4.9. Nous reparlerons plus loin des implications de cette forme pour la partie réelle de la self-énergie.

Le calcul numérique complet a été effectué pour la partie réelle de la self-énergie. La figure 4.10 montre le résultat obtenu pour le vecteur d’onde  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$ . Le comportement basse fréquence de  $\Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  a la forme que nous venons de dériver.

#### 4.4.4 Robustesse du liquide emboîté

Avant de poursuivre notre analyse du liquide emboîté, il serait pertinent de commenter ce qu’il convient d’appeler la “robustesse” de cette description. Mais commençons par expliquer ce que nous entendons par robustesse.

Les méthodes de calcul employées jusqu’ici sont perturbatives. À l’ordre zéro, nous avons des particules libres. Les interactions sont ensuite introduites et nous regardons en quoi ces dernières modifient les excitations fondamentales du système. Dans le cas d’un liquide de Fermi, les particules libres deviennent des quasi-particules i.e. des excitations qui ressemblent beaucoup à des particules libres mais avec un poids et un temps de vie fini. Il n’en reste pas moins qu’il existe une correspondance entre les particules libres et les quasi-particules. L’approche perturbative est donc cohérente

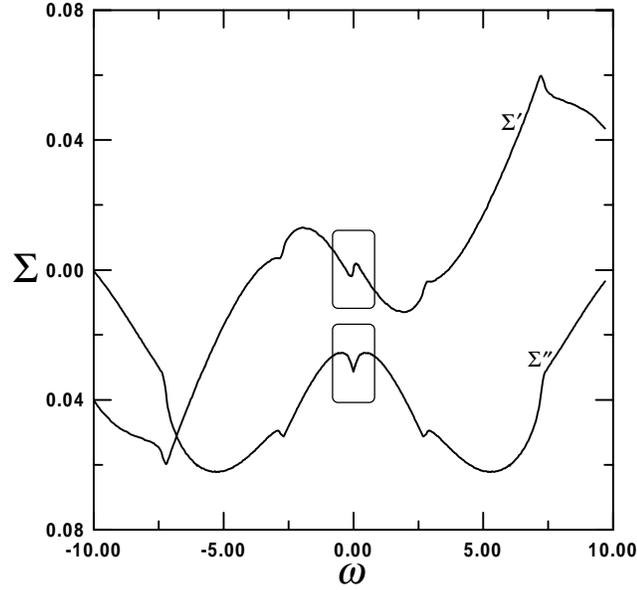


FIG. 4.10:  $\Sigma'(k_F^0, \omega)$  et  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour une surface de Fermi emboîtée.  $T = 0, 5$ ,  $n = 1$ ,  $U = 1$ ,  $k_F^0 = (3\pi/4, \pi/4)$ .

en ce sens que les excitations n'ont pas été radicalement modifiées par les interactions. Nous pouvons dire que le liquide de Fermi est une description robuste.

Ce n'est plus tout à fait le cas pour notre liquide emboîté. Nous allons le voir plus loin de façon détaillée, mais il devient clair à ce stade-ci de la discussion que le liquide emboîté ne ressemble en rien à un système de particules libres. Pour prouver que notre description est aussi robuste que celle du liquide de Fermi, il faudrait appliquer l'approche perturbative non pas aux particules libres elles-mêmes mais aux excitations du liquide emboîté et trouver un résultat qui serait cohérent avec le point de départ. Cette tâche ambitieuse permettrait d'établir hors de tout doute la validité de la théorie des perturbations dans notre contexte. Malheureusement, elle dépasse le cadre de cet ouvrage.

## 4.5 Comparaison du liquide emboîté avec le liquide de Fermi marginal

La théorie phénoménologique du liquide de Fermi marginal [75] fournit une forme de self-énergie pour décrire l'état normal des supraconducteurs à haute température

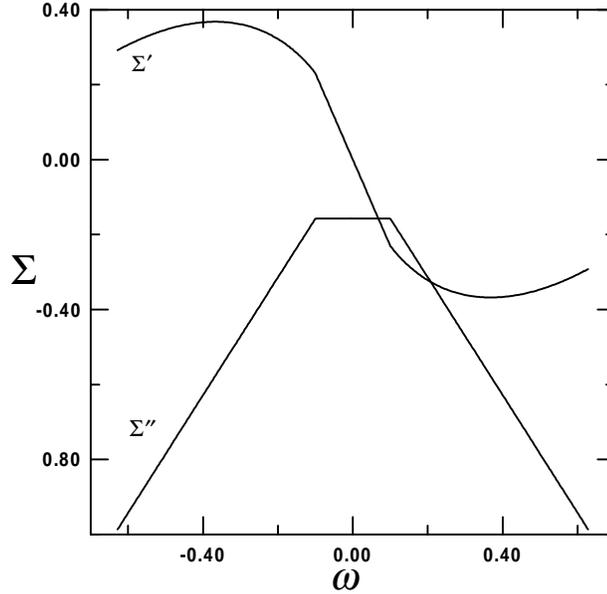


FIG. 4.11:  $\Sigma'(k, \omega)$  et  $\Sigma''(k, \omega)$  vs  $\omega$  pour un liquide de Fermi marginal.  $T = 0, 1$ .

critique. Dans cette sous section, nous allons comparer cette forme avec les résultats obtenus jusqu'ici dans ce chapitre.

Dans cette théorie, on fait l'hypothèse que les susceptibilités de spin et de charge des électrons contiennent d'importantes contributions de la forme

$$\begin{aligned} \chi''(\mathbf{q}, \omega) &\sim \omega/T \text{ si } |\omega| < T, \\ &\sim \text{cste si } |\omega| > T. \end{aligned}$$

De cette hypothèse découle l'expression suivante pour la self-énergie des électrons :

$$\begin{aligned} \Sigma''(\mathbf{k}, \omega) &\sim -\frac{\pi}{2} \max(|\omega|, T) \\ \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) &\sim \omega \ln \max(|\omega|, T). \end{aligned}$$

La self-énergie du liquide de Fermi marginal est illustrée sur la figure 4.11. À température finie, la pente de  $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega)$  est négative et finie à l'origine de sorte qu'il est possible de définir un poids de quasi-particule :

$$Z_{k_F} = \frac{1}{1 - \alpha \ln T}$$

où nous avons posé  $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega) = \alpha\omega \ln \max(|\omega|, T)$ . Contrairement au liquide de Fermi, le poids de quasi-particule du liquide de Fermi Marginal s'annule comme  $Z_{k_F} \sim 1/\ln T$  quand  $T \rightarrow 0$ . Il s'agit là d'une différence très importante entre les deux descriptions car la théorie du liquide de Fermi est d'autant plus précise que la température est basse.

La self-énergie que nous avons dérivée pour une surface de Fermi parfaitement emboîtée se distingue davantage de la théorie du liquide de Fermi car  $Z_{k_F}$  est nul au niveau de Fermi et ce, même à température finie. Partant de  $\Sigma'(\mathbf{k}, \omega) = -\alpha\omega \ln |\omega|$ , nous avons

$$Z_{k_F} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{1 + \alpha \ln |\omega| + \alpha} \rightarrow 0^-.$$

En plus d'être nul, le poids de quasi-particule approche zéro avec le mauvais signe. La notion de quasi-particule est donc totalement dénuée de sens dans ce contexte.

## 4.6 Effet du dopage

Jusqu'ici, nous n'avons travaillé qu'avec une surface de Fermi parfaitement emboîtée. Cette géométrie n'est pas celle de la surface de Fermi des SCHT. Pour décrire les propriétés électroniques de ces matériaux, il faut non seulement varier le remplissage de la bande mais aussi introduire un saut au second voisin dans la relation de dispersion. Dans cette section, nous allons analyser les effets du dopage sur les résultats obtenus jusqu'ici.

Dans la limite du faible remplissage, le système est un liquide de Fermi à deux dimensions. Le dopage fera donc tôt où tard disparaître les anomalies observées jusqu'ici. Il y a deux mécanismes responsables de cette disparition :

- 1) D'une part, nous savons que la fréquence  $\omega_s$  doit satisfaire le critère

$$\omega_s > 2(|\mu^0| - \Lambda) \quad \text{avec} \quad \Lambda \sim \pi T$$

pour que  $\chi'''(\mathbf{q}, \omega_s)$  soit singulier. Sachant que ce sont ces singularités qui sont responsables des anomalies de basse fréquence de la self-énergie, leur disparition doit nécessairement entraîner celle de l'anomalie contenue dans  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ .

- 2) Par ailleurs, le dopage fait également disparaître la propriété d'emboîtement de la surface de Fermi. Conséquemment, les contributions diagonales des fluctuations

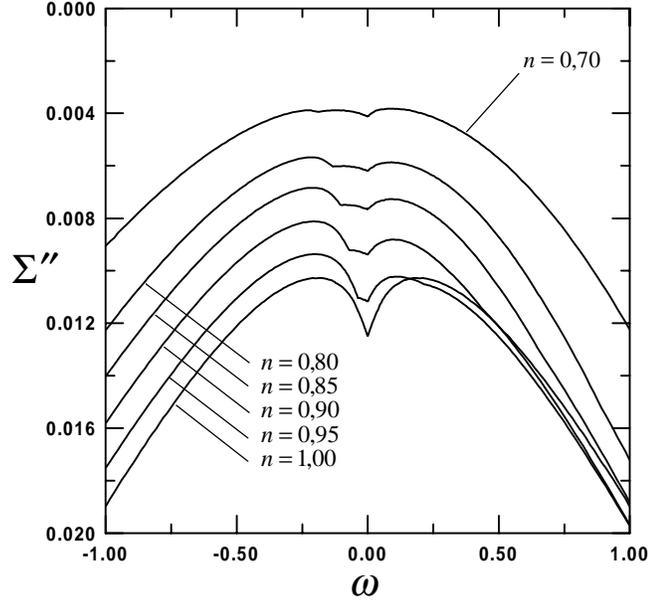


FIG. 4.12:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages.  $T = 0, 2$ ,  $U = 1, 0$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ .

seront moins déterminantes car les vecteurs  $\mathbf{q}$  diagonaux ne relieront pas tous des points d'énergie nulle. Cet effet est plus important pour les vecteurs  $\mathbf{k}_F^0$  qui se trouvent le long de la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, 0)$  car la surface de Fermi s'arrondit très rapidement avec le dopage dans cette région. De plus, les vecteurs diagonaux responsables de l'anomalie en ce point de la surface de Fermi sont ceux autour de  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . Ces contributions sont très sensibles à la courbure de la surface de Fermi. Par contre, la surface de Fermi reste relativement plate même pour des dopages importants dans la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . De surcroît, les fluctuations responsables de l'anomalie dans cette direction sont à de petits vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$ . Ces contributions sont beaucoup moins sensibles à la courbure de la surface de Fermi.

La figure 4.12 montre comment l'anomalie de la self-énergie disparaît avec la diminution du remplissage de la bande dans la direction  $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ . Elle est encore présente à  $n = 0, 8$ . À  $n = 0, 7$ , l'anomalie a presque complètement disparu. À  $n = 1$ , le point de non-analyticité se trouve à  $\omega = 0$ . Ce point se sépare en deux points de non-analyticité avec le dopage. L'anomalie se comble à partir du bas.

La figure 4.13 montre que cette disparition de l'anomalie se fait différemment dans la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . Celle-ci disparaît progressivement avec le dopage

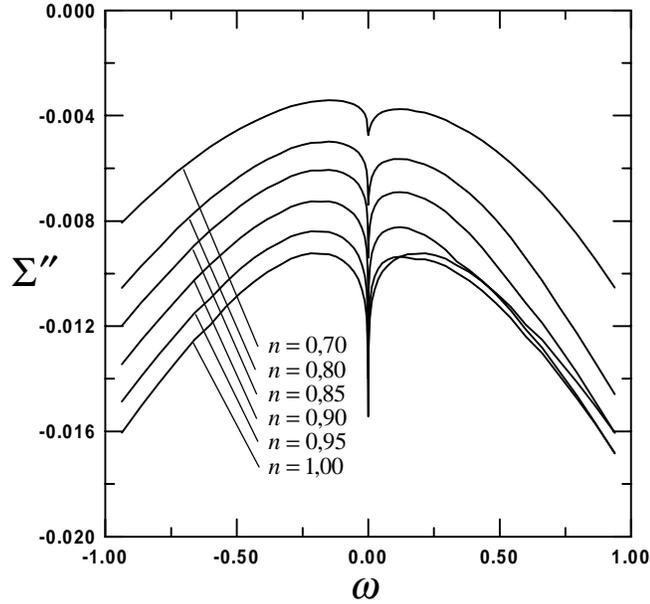


FIG. 4.13:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages.  $T = 0, 2$ ,  $U = 1, 0$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ .

sans que le point de non-analyticité ne se sépare en deux. L'anomalie est encore très visible même à  $n = 0, 7$  ce qui confirme sa robustesse dans cette direction.

La figure 4.14 nous montre les mêmes courbes que la figure 4.12 mais pour une température plus élevée. L'anomalie est encore très visible même à  $n = 0, 7$ . Elle est donc bien d'autant plus robuste que la température est plus élevée. Enfin, la figure 4.15 montre des courbes de self-énergie évaluée à  $(\pi, 0)$ . Comme prévu, l'anomalie est beaucoup plus sensible au dopage à cet endroit de la surface de Fermi. À  $n = 0, 95$ , elle est déjà presque complètement comblée.

La figure 4.16 montre des courbes de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)$  en fonction de la température pour différents remplissages. Ici encore, l'allure de la courbe change qualitativement avec le dopage. Le comportement en  $T \ln T$  change progressivement pour un comportement quadratique à basse température. À demi-remplissage, la courbe est très linéaire sur tout l'intervalle de température. Quand le remplissage diminue, la température à laquelle le comportement de la courbe devient quadratique augmente.

L'effet de l'emboîtement de la surface de Fermi sur le comportement de la self-énergie disparaît quand le potentiel chimique est de l'ordre de l'échelle d'énergie thermique. Sur la figure 4.17, nous avons tracé la courbe  $|\mu^0| = \pi T$  dans un dia-

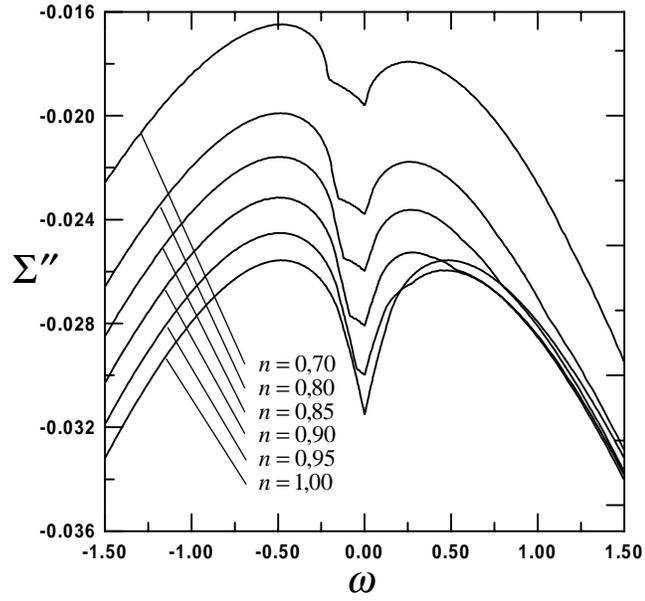


FIG. 4.14:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages.  $T = 0, 5$ ,  $U = 1, 0$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ .

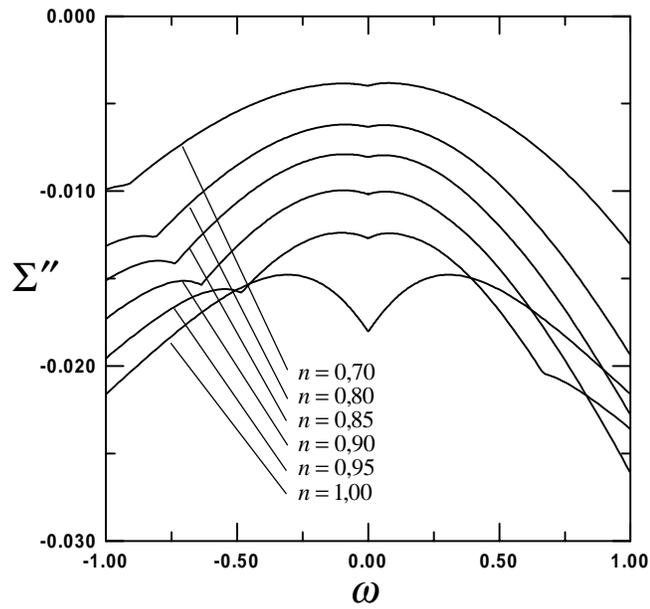


FIG. 4.15:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages.  $T = 0, 2$ ,  $U = 1, 0$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, 0)$ .

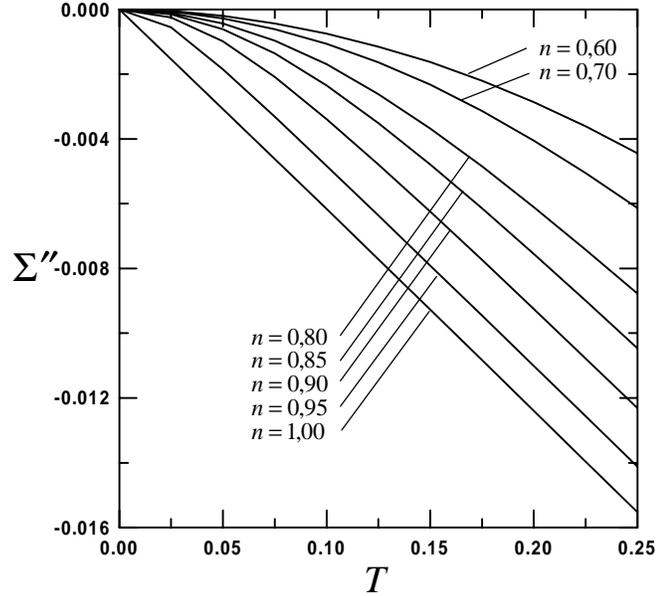


FIG. 4.16:  $\Sigma''(k_F^0, 0)$  vs  $T$  pour différents remplissages.  $U = 1, 0$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (3\pi/4, \pi/4)$ .

gramme  $T$  vs  $n$ . Ce diagramme permet d'interpréter les effets du dopage. Concernant le comportement en fréquence, l'anomalie survit à des dopages élevés si la température est elle-même élevée. De même, le comportement  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \sim T \ln T$  disparaît à température élevée si le remplissage est faible.

## 4.7 Surface de Fermi des SHT : effet d'un saut au second voisin

Dans cette section, nous allons calculer la self-énergie pour le cas d'une surface de Fermi semblable à celle des SHT. La relation de dispersion des électrons libres doit tenir compte d'un saut au second voisin ( $t' \neq 0$ ). Dans ces matériaux, le rapport  $t'/t$  se situe entre  $-0,1$  et  $-0,45$  selon le composé étudié. Parce que ces matériaux sont dopés, les calculs doivent être faits hors demi-remplissage. La figure 4.18 nous montre deux exemples de surface de Fermi hors demi-remplissage avec saut au second voisin.

En général, il n'est permis de parler de surface de Fermi pour décrire les propriétés électroniques d'un matériau que si celui-ci est bien décrit par des quasi-particules. Or, nous savons que ce n'est pas le cas des SHT. La surface de Fermi à laquelle

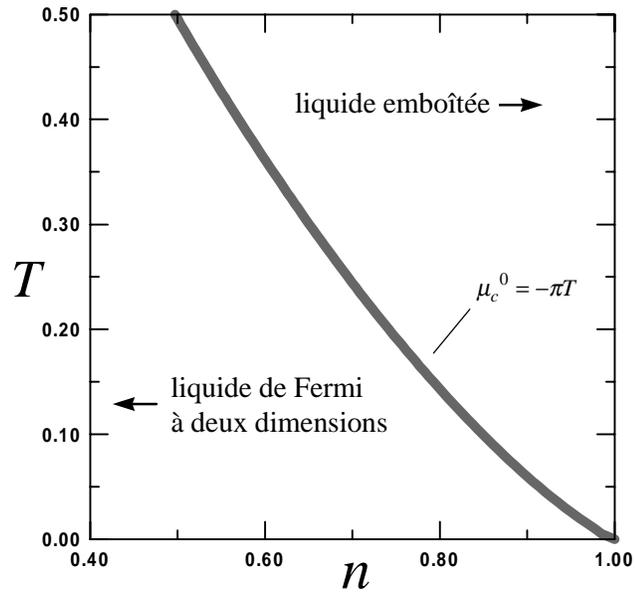


FIG. 4.17:  $T$  vs  $n$  : disparition de l'anomalie de la self-énergie par le dopage.

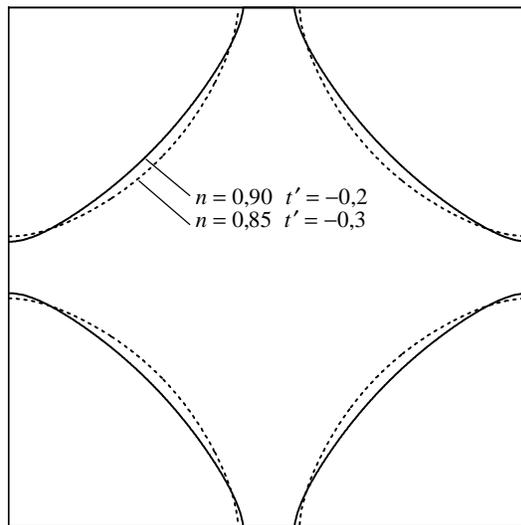


FIG. 4.18: Surface de Fermi hors-demi remplissage avec saut au second voisin.

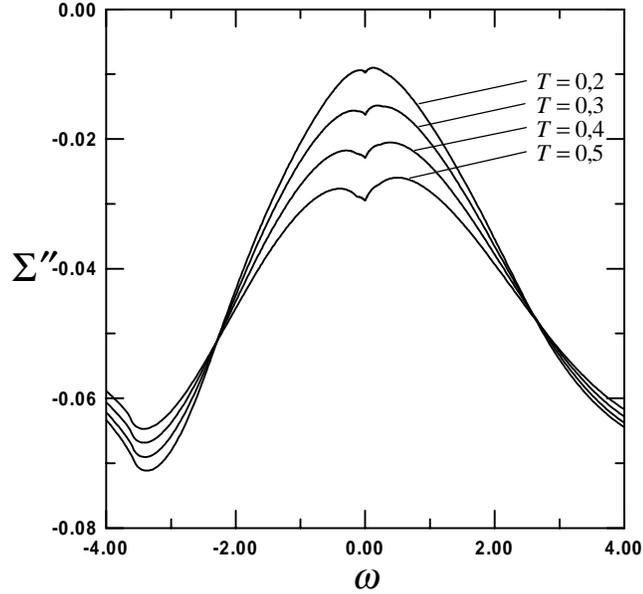


FIG. 4.19:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures.  $U = 1, 0$ ,  $n = 0, 90$ ,  $t' = -0, 2$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ .

nous faisons référence est celle obtenue par un calcul de bande. Elle nous permet de fixer les paramètres de la relation de dispersion des électrons libres de la façon la plus réaliste possible.

La figure 4.19 montre le comportement en fréquence de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  à  $n = 0, 90$  et  $t' = -0, 2$ . Le vecteur d'onde choisi est le long de la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . L'anomalie de basse fréquence est bien visible malgré le peu d'emboîtement de la surface de Fermi. Elle est d'autant plus marquée que la température est élevée. La figure 4.20 nous montre les mêmes courbes pour le cas  $n = 0, 85$  et  $t' = -0, 3$ . L'anomalie est moins apparente que sur le graphique précédent car la surface de Fermi y est moins emboîtée. Elle reste néanmoins bien visible. Enfin, la figure 4.21 nous montre comment l'anomalie évolue avec la direction. Elle devient relativement moins prononcée quand nous nous éloignons de la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ . Par contre, la valeur absolue de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)$  va en augmentant.

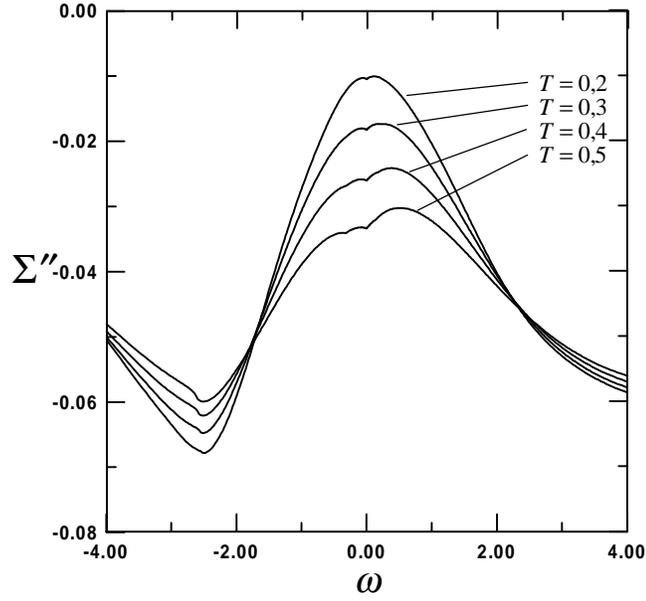


FIG. 4.20:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures.  $U = 1, 0$ ,  $n = 0, 85$ ,  $t' = -0, 3$ ,  $k_F^0$  selon la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ .

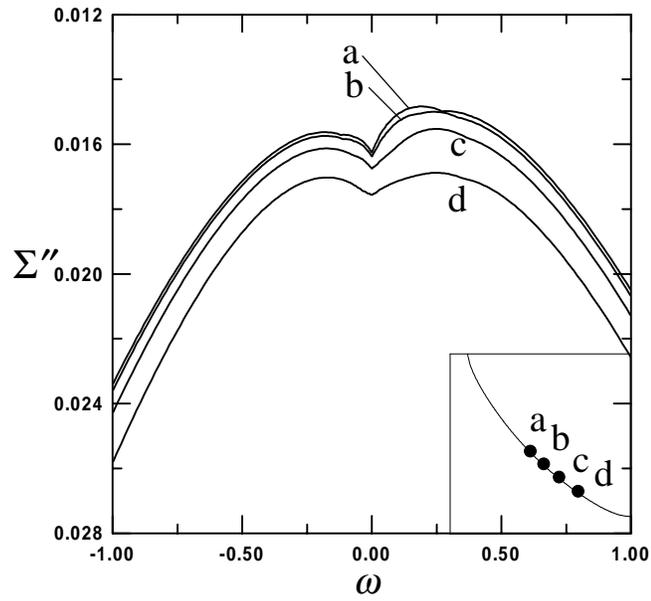


FIG. 4.21:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents vecteurs d'onde sur la surface de Fermi.  $T = 0, 3$ ,  $U = 1, 0$ ,  $n = 0, 90$ ,  $t' = -0, 2$ .

## 4.8 Résumé des résultats importants

La partie imaginaire de la self-énergie pour une surface de Fermi parfaitement emboîtée se comporte comme

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) - \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} |\omega| \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 \neq (\pi/2, \pi/2)$$

et

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) - \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} \sqrt{|\omega|} \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2).$$

La partie réelle est de la forme

$$\Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} -\omega \ln |\omega| \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 \neq (\pi/2, \pi/2)$$

et

$$\Sigma'(\mathbf{k}_F^0, \omega) \stackrel{|\omega| \ll \pi T}{\sim} \text{sgn}(\omega) \sqrt{|\omega|} \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2).$$

La notion de quasi-particule n'est pas bien définie dans ce contexte car  $Z_{k_F^0} = 0^-$  à toutes les températures.

L'effet du dopage et d'une amplitude de saut au second voisin est de faire disparaître progressivement l'anomalie de basse fréquence observée dans la self-énergie. L'anomalie disparaît quand  $|\mu^0| \gtrsim \pi T$ . Elle est plus robuste le long de la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$  i.e. là où la courbure de la surface de Fermi est la plus faible malgré le dopage et le saut au second voisin.



# Chapitre 5

## Effet des interactions sur les fluctuations électroniques

Jusqu'à maintenant dans cet ouvrage, nous avons négligé l'effet des interactions sur les fluctuations de spin et de charge. Les interactions n'ont été prises en compte que pour coupler les fluctuations aux propriétés à une particule au second ordre en  $U/t$ . Dans ce chapitre, nous allons remédier à cette situation en analysant l'effet des interactions sur les fluctuations elles-mêmes.

La solution de ce problème ne peut pas être obtenue exactement. Nous aurons donc à choisir une approche approximative appropriée. Nous verrons que les interactions sont responsables de l'apparition à température finie d'ordre à courte portée. Ce phénomène, visible dans le comportement des propriétés à deux particules, a également des répercussions sur les propriétés à une particule. Ce sujet sera abordé au chapitre 6.

### 5.1 Équation de Bethe-Salpeter

Le problème qui consiste à calculer les différents canaux de susceptibilité dans le cadre d'un modèle se résume à trouver la solution de l'équation de Bethe-Salpeter. Cette équation est l'équivalent pour les susceptibilités de l'équation de Dyson pour le propagateur à une particule. Elle est représentée de façon diagrammatique sur la figure 5.1. Dans le canal particule-trou, l'équation de Bethe-Salpeter est donnée par

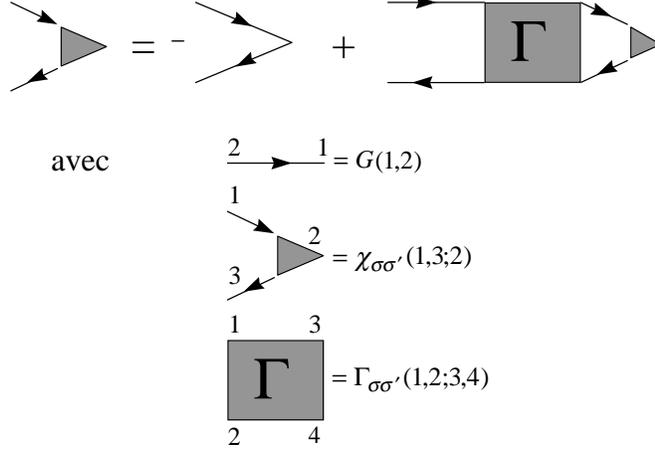


FIG. 5.1: Représentation diagrammatique de l'équation de Bethe-Salpeter.

$$\chi_{\sigma\sigma'}(1, 3; 2) = -G_{\sigma}(1, 2)G_{\sigma'}(2, 3)\delta_{\sigma\sigma'} + G_{\sigma}(1, \bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}(\bar{2}, \bar{3}; \bar{4}, \bar{5})\chi_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}'}(\bar{4}, \bar{5}; 2)G_{\sigma}(\bar{3}, 3). \quad (5.1)$$

La notation employée est celle de Baym et Kadanoff. Sa signification est la suivante :  $(\mathbf{r}_1, \tau_1) \rightarrow 1$ ,  $(\mathbf{r}_2, \tau_2) \rightarrow 2$ , etc. Les barres au-dessus des indices indiquent qu'une coordonnée est intégrée. Nous avons introduit les notions de susceptibilité à trois points  $\chi_{\sigma\sigma'}(1, 3; 2)$  et de vertex irréductible  $\Gamma_{\sigma\sigma'}(1, 2; 3, 4)$ . La susceptibilité à trois points est une susceptibilité pour laquelle les propagateurs  $G$  ne sont pas attachés à une extrémité (voir figure 5.1). Le vertex irréductible est obtenu par la dérivée fonctionnelle de la self-énergie par rapport à  $G$  :

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}(1, 2; 3, 4) \equiv \frac{\delta\Sigma_{\sigma}(1, 2; [G])}{\delta G_{\sigma'}(3, 4)}. \quad (5.2)$$

La figure 5.2 montre le développement diagrammatique du vertex irréductible jusqu'au deuxième ordre en interaction. La self-énergie qui est dérivée est celle qui doit habiller les propagateurs autant dans l'expression du vertex irréductible qu'ailleurs dans l'équation de Bethe-Salpeter elle-même.

Il est hors de question de tenter de résoudre ces équations exactement. D'une part, il faudrait pouvoir obtenir la fonction de Green et la self-énergie de façon exacte. Et même si c'était possible, la solution de l'équation de Bethe-Salpeter serait au moins aussi difficile à calculer. Nous aurons donc recours à une méthode approximative.

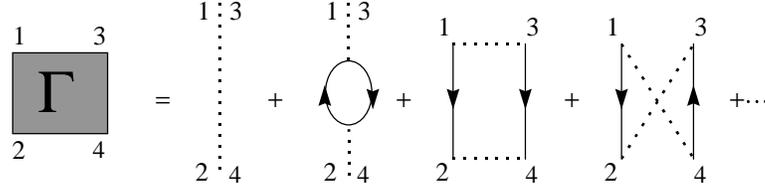


FIG. 5.2: Développement diagrammatique du vertex irréductible. Les lignes continues sont des propagateurs habillés.

## 5.2 Solution de l'équation de Bethe-Salpeter avec l'approche auto-cohérente à deux particules

Vilk et Tremblay ont proposé une méthode approximative pour résoudre l'équation de Bethe-Salpeter permettant de calculer les susceptibilités du modèle de Hubbard [78] [80]. Ils ont montré que les résultats obtenus sont en accord avec les simulations Monte-Carlo. Dans cette section, nous allons expliquer les principes de cette approche.

L'idée est de remplacer les vertex irréductibles par des vertex effectifs locaux et instantanés :

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}(2, 3; 4, 5) = \Gamma_{\sigma\sigma'}\delta(2 - 5)\delta(3 - 4)\delta(4^+ - 5)$$

où  $\Gamma_{\sigma\sigma'}$  est une quantité statique que nous déterminerons plus loin. Si cette approximation est substituée dans l'équation 5.1, nous trouvons

$$\chi_{\sigma\sigma'}(1, 3; 2) = -G_{\sigma}(1, 2)G_{\sigma'}(2, 3)\delta_{\sigma\sigma'} + G_{\sigma}(1, \bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}\chi_{\bar{\sigma}\sigma'}(\bar{2}, \bar{2}; 2)G_{\sigma}(\bar{2}, 3).$$

Grâce à cette approximation, il n'est plus nécessaire de travailler avec des susceptibilités à trois points. En effet, si nous posons  $1 = 3$  dans cette dernière expression, toutes les susceptibilités qui apparaissent ne sont qu'à deux points :

$$\chi_{\sigma\sigma'}(1; 2) = -G_{\sigma}(1, 2)G_{\sigma'}(2, 1)\delta_{\sigma\sigma'} + G_{\sigma}(1, \bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}\chi_{\bar{\sigma}\sigma'}(\bar{2}; 2)G_{\sigma}(\bar{2}, 1).$$

La self-énergie qui habille les fonctions de Green doit être la même que celle à partir de laquelle nous obtenons le vertex irréductible (équation 5.2). Le vertex effectif

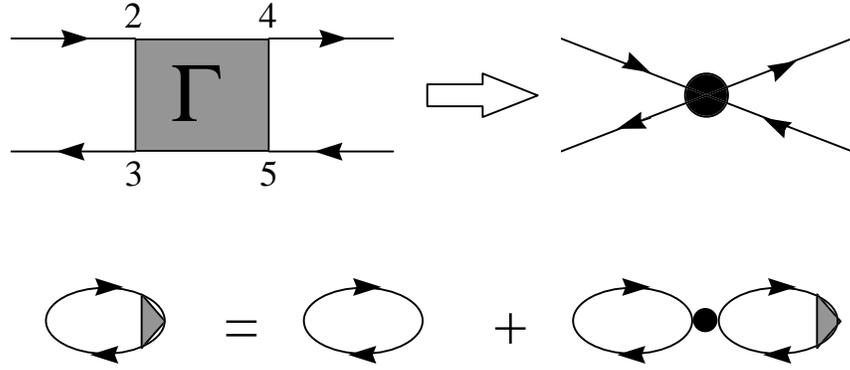


FIG. 5.3: Représentation diagrammatique de l'approche Vilk-Tremblay pour l'équation de Bethe-Salpeter.

que nous avons introduit doit découler d'une self-énergie triviale i.e. qui n'est qu'un simple déplacement du potentiel chimique (voir annexe C de la référence [80]). Dans cette approche, les fonctions de Green qui sont cohérentes avec le vertex au sens de l'équation 5.2 sont donc des propagateurs de particules libres :

$$\chi_{\sigma\sigma'}(1;2) = \frac{1}{2}\chi^0(1;2)\delta_{\sigma\sigma'} + G_{\sigma}^0(1,\bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}\chi_{\bar{\sigma}\sigma'}(\bar{2};2)G_{\sigma}^0(\bar{2},1).$$

Nous voulons maintenant séparer la susceptibilité de spin de la susceptibilité de charge. Sachant que

$$\chi_{sp} = 2(\chi_{\uparrow\uparrow} - \chi_{\uparrow\downarrow}), \quad \chi_{ch} = 2(\chi_{\uparrow\uparrow} + \chi_{\uparrow\downarrow}) \quad (5.3)$$

et en introduisant

$$U_{sp} = \Gamma_{\uparrow\downarrow} - \Gamma_{\uparrow\uparrow}, \quad U_{ch} = \Gamma_{\uparrow\downarrow} + \Gamma_{\uparrow\uparrow}, \quad (5.4)$$

nous trouvons

$$\begin{aligned} \chi_{sp}(1;2) &= \chi^0(1;2)\delta_{\sigma\sigma'} - G^0(1,\bar{2})U_{sp}\chi_{sp}(\bar{2};2)G^0(\bar{2},1) \\ \chi_{ch}(1;2) &= \chi^0(1;2)\delta_{\sigma\sigma'} + G^0(1,\bar{2})U_{ch}\chi_{ch}(\bar{2};2)G^0(\bar{2},1). \end{aligned}$$

Pour solutionner ces deux dernières équations, il suffit de passer dans l'espace réciproque. Nous obtenons :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}, \quad \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{1}{2}U_{ch}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}. \quad (5.5)$$

Ces deux expressions sont similaires à celles que donne l'approche RPA (*random phase approximation*). La différence essentielle est la présence de constantes de couplage effectives ( $U_{sp, ch}$ ) plutôt que d'une interaction de Hubbard telle qu'elle apparaît dans le hamiltonien ( $U$ ). Ces couplages effectifs sont des quantités statiques qui dépendent de la température, du remplissage, de la structure de bande et de l'interaction  $U$ . De ce point de vue, l'approche RPA est une solution de l'équation de Bethe-Salpeter dans laquelle le vertex irréductible est remplacé par son expression au premier ordre en perturbation (voir figure 5.2).

### 5.2.1 Équations pour $U_{sp}$ , $U_{ch}$ et $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$

Jusqu'ici, rien n'a été dit sur la façon de déterminer la valeur des couplages effectifs  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$ . Vilk et Tremblay ont proposé une façon de les calculer de manière auto-cohérente.

Pour déterminer les couplages effectifs, nous devons imposer des contraintes supplémentaires. Les approximations qui ont mené aux résultats 5.5 sont de nature locale et instantanée. Il est donc logique d'essayer de satisfaire des relations qui sont également locales et instantanées. Dans le cadre d'une approche approximative, toutes les relations exactes ne peuvent être satisfaites et un choix approprié s'impose. Nous faisons le choix suivant de relations exactes :

$$\begin{aligned} \chi_{sp}(1, 1) &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \langle (n_\uparrow - n_\downarrow)(n_\uparrow - n_\downarrow) \rangle - \langle (n_\uparrow - n_\downarrow) \rangle \langle (n_\uparrow - n_\downarrow) \rangle \\ \chi_{ch}(1, 1) &= \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \langle (n_\uparrow + n_\downarrow)(n_\uparrow + n_\downarrow) \rangle - \langle (n_\uparrow + n_\downarrow) \rangle \langle (n_\uparrow + n_\downarrow) \rangle. \end{aligned}$$

En principe, nous avons la relation  $\langle n_\sigma^2 \rangle = \langle n_\sigma \rangle$  qui est en quelque sorte la manifestation locale du principe de Pauli. Cette relation n'est pas automatiquement satisfaite dans le cadre d'une méthode approximative. La RPA par exemple ne respecte pas le principe de Pauli, même localement. L'idée de Vilk et Tremblay est d'imposer cette relation pour déterminer  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  :

$$\begin{aligned}\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) &= n - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \\ \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) &= n + 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - n^2.\end{aligned}\quad (5.6)$$

Une relation supplémentaire doit cependant être ajoutée au système d'équations car nous venons d'introduire un nouvel inconnu :  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . La self-énergie qui donne le vertex  $U_{sp}$  en vertu de l'équation 5.2 nous fournit une troisième relation [80] :

$$U_{sp} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle. \quad (5.7)$$

Cette relation est une sorte de décomposition Hartree-Fock ( $\langle n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} \rangle \xrightarrow{\text{HF}} \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{j\downarrow} \rangle$ ) ayant la propriété d'être exacte localement ( $i = j$ ). Elle a été justifiée à l'origine par une méthode semblable à celle de Singwi *et al.* [71]. Pour un modèle répulsif, l'approximation Hartree-Fock surestime la double occupation moyenne  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . Par voie de conséquence,  $U_{sp}$  sera plus petit que  $U$  en vertu de l'équation 5.7.

Les quantités  $U_{sp}$ ,  $U_{ch}$  et  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  peuvent maintenant être évaluées de façon auto-cohérente. Bien qu'il est nécessaire d'avoir recours à des méthodes numériques pour les déterminer, le calcul est relativement simple pour deux raisons :

1) toutes trois sont des quantités statiques ce qui permet de faire le calcul avec le formalisme de Matsubara sans avoir à résoudre un problème de prolongement analytique. C'est un avantage certain car les fonctions écrites dans ce formalisme sont généralement beaucoup plus douces et donc plus faciles à traiter d'un point de vue numérique. Par ailleurs, bien qu'il existe différentes méthodes numériques de prolongement analytique (approximants de Padé, entropie maximum), il s'agit d'un problème difficile dont nous souhaitons nous affranchir ;

2) le système formé des équations 5.6 et 5.7 se ramène directement à une seule équation :

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{1}{2} \frac{U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle}{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle} \chi^0(\mathbf{q}, iq_n)} = n - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle. \quad (5.8)$$

La valeur de  $U_{sp}$  appartient à l'intervalle  $[0, U_{sp}^{\max}]$  avec  $U_{sp}^{\max} = \min \{U, 2/\chi^0(\mathbf{Q}, 0)\}$ . Une fois que  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  est déterminé, il ne reste plus qu'à déterminer  $U_{ch}$  ce qui est aussi un problème à une seule équation.

## 5.2.2 Caractéristiques de l'approche de Vilk et Tremblay

Devant l'impossibilité de faire des calculs exacts à ce stade-ci, nous avons mentionné la nécessité de choisir une méthode approximative appropriée. Le choix de la méthode Vilk-Tremblay est motivé par plusieurs raisons.

1) *La méthode est conservative au sens de Baym et Kadanoff* [7] [8]. Cette propriété est satisfaite parce que la self-énergie qui permet de dériver le vertex effectif est la même qui habille les fonctions de Green. Nous avons déjà mentionné que cette self-énergie est triviale de sorte que les propagateurs sont des  $G^0$ . La méthode respecte donc les lois de conservation parce que ce sont des  $\chi^0$  qui apparaissent dans les formes RPA (équation 5.5).

2) *Le principe de Pauli est satisfait localement par cette approche.* Il s'agit d'un ingrédient très important pour comprendre la physique du modèle. En effet, l'interaction de Hubbard étant locale, deux électrons qui interagissent doivent être sur un même site atomique et leurs spins respectifs doivent être opposés. L'approche tient compte de ce phénomène.

3) *L'approche satisfait le théorème de Mermin-Wagner.* Ce théorème nous dit qu'il ne peut y avoir d'ordre à longue portée à température non-nulle en dimension inférieure à trois [54]. L'apparition d'ordre à longue portée est caractérisée par une divergence dans une fonction  $\chi(\mathbf{q}, 0)$ . Pour que ce théorème soit satisfait, le dénominateur de la forme RPA pour la susceptibilité de spin ne doit donc jamais s'annuler à température finie :

$$1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^0(\mathbf{q}, 0) \stackrel{T \neq 0}{\neq} 0 \quad \forall \mathbf{q}. \quad (5.9)$$

Vilk et Tremblay ont montré que ce théorème était satisfait par leur approche [80].

4) *Les valeurs obtenues pour  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  sont en accord avec les résultats de simulations Monte-Carlo* [80]. Les conclusions de cette étude sont fiables car la double occupation moyenne est une quantité qui est facilement obtenue par des techniques de simulation. C'est une quantité statique qui peut être calculée sans prolongement analytique. Près du demi-remplissage, l'accord avec les SMCQ cesse d'être satisfaisant à trop basse température où la méthode aura tendance à sous-estimer la double occupation. Il est possible de remédier à ce problème en obtenant d'abord  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  par une autre méthode pour ensuite calculer  $U_{sp}$  et  $U_{ch}$  avec les équations 5.6.

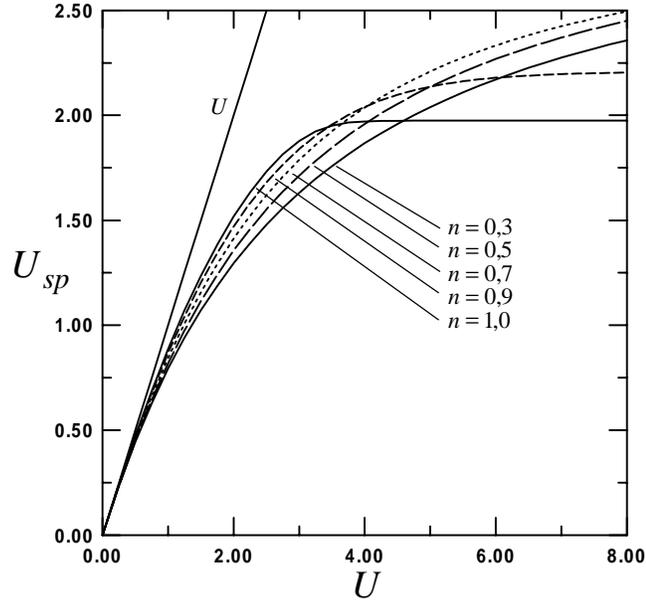


FIG. 5.4:  $U_{sp}$  vs  $U$  pour différents remplissages :  $T = 0, 2$ ,  $t' = 0$ .

### 5.3 Solutions des équations pour $U_{sp}$ , $U_{ch}$ et $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$

Nous allons maintenant utiliser la méthode de Vilk et Tremblay présentée à la section précédente pour comprendre l'effet des interactions sur les fluctuations de spin et de charge. La première étape est d'analyser le comportement des couplages effectifs. Il sera facile par la suite de terminer cette étude pour  $\chi_{sp}$  et  $\chi_{ch}$  étant donné que ces fonctions font directement intervenir la susceptibilité des électrons libres  $\chi^0$  et que celle-ci a déjà fait l'objet du chapitre 3. Nous serons amenés à introduire de nouvelles échelles de longueur et d'énergie caractérisant l'apparition d'ordre à courte portée.

Nous avons déjà expliqué comment nous pouvons procéder pour calculer les couplages effectifs et la double occupation moyenne. Nous allons maintenant présenter les résultats obtenus numériquement.

#### 5.3.1 Résultats numériques

La figure 5.4 montre des courbes de  $U_{sp}$  en fonction de  $U$  à température fixe ( $T = 0, 2$ ) pour différents remplissages. À faible interaction, nous avons  $U_{sp} \approx U$  et ce, pour tous les remplissages. C'est la région du graphique où l'approche Vilk-

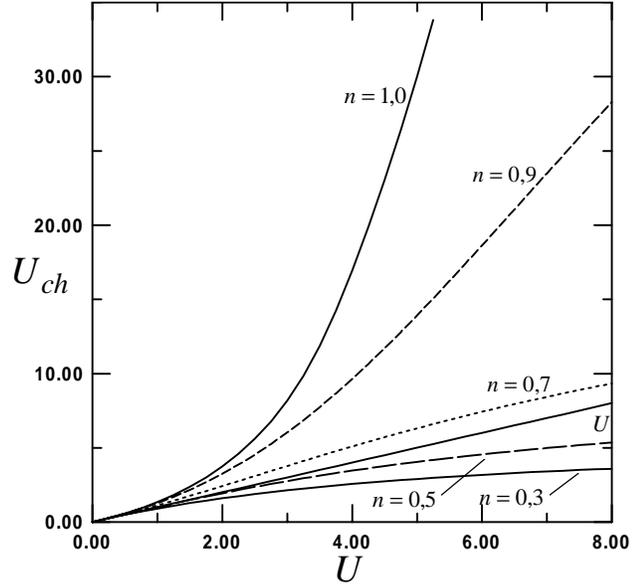


FIG. 5.5:  $U_{ch}$  vs  $U$  pour différents remplissages :  $T = 0, 2$ ,  $t' = 0$ .

Tremblay donne essentiellement le même résultat que la RPA.

À couplage plus élevé, le comportement des courbes change avec le remplissage. À demi-remplissage pour  $T = 0, 2$ , la valeur de  $U_{sp}$  sature vers  $U = 4$ . Ce comportement asymptotique est la manifestation du théorème de Mermin-Wagner. En vertu du critère 5.9,  $U_{sp}$  doit toujours être plus petit que  $2/\chi^{0l}(\mathbf{Q}, 0)$ .  $U_{sp}$  augmente avec la valeur de l'interaction mais sans jamais atteindre cette valeur critique. Ce comportement asymptotique est observé pour  $n = 0,9$  vers  $U = 6$ . Nous verrons plus loin que, près du demi-remplissage, cette saturation de la valeur de  $U_{sp}$  a des conséquences dramatiques sur les fluctuations de spin.

Loin du demi-remplissage, il ne semble pas y avoir de tels comportements asymptotiques pour les valeurs de  $U$  considérées sur la figure 5.4. L'allure des courbes suggère cependant qu'une saturation apparaîtrait à des interactions plus élevées. C'est effectivement ce qui devrait se produire considérant qu'il existe toujours une valeur critique pour  $U_{sp}$  mais que cette dernière devient très grande quand le remplissage est diminué. Cette valeur a été donnée en fonction de  $n$  pour différents  $U$  dans la référence [78]. Or, le domaine de validité de la méthode Vilk-Tremblay est limité aux valeurs d'interaction telles que  $U \lesssim W$ . Nous ne pouvons donc pas vraiment tirer de conséquences physiques à partir de cette approche pour des valeurs de  $U$  beaucoup plus élevées que la largeur de bande.

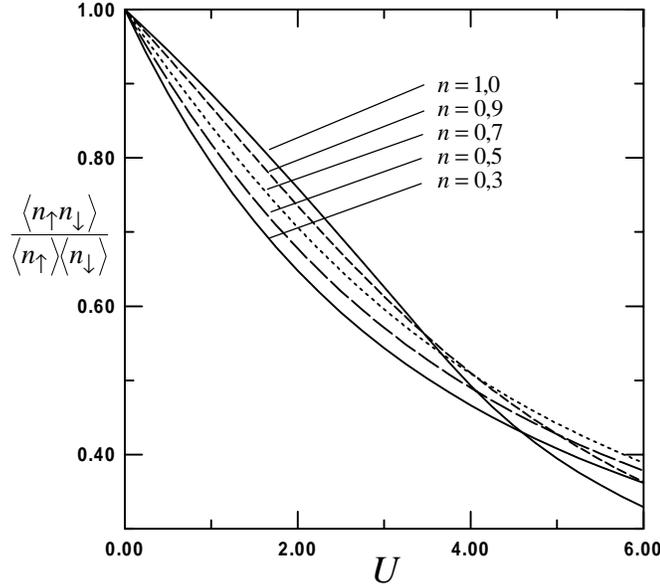


FIG. 5.6:  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle / \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$  vs  $U$  pour différents remplissages :  $T = 0, 2$ ,  $t' = 0$ .

L'équivalent pour  $U_{ch}$  est représenté sur la figure 5.5. Tout comme  $U_{sp}$ , le couplage effectif  $U_{ch}$  n'est pas très différent de  $U$  quand ce dernier est suffisamment faible. Près du demi-remplissage,  $U_{ch}$  devient rapidement beaucoup plus élevé que  $U$ . Cela se traduit par une suppression des fluctuations de charge. Ce phénomène est assez facile à comprendre intuitivement. L'interaction a tendance à défavoriser la double occupation d'un site. Près du demi-remplissage, il y a environ un électron par site. Quand l'interaction devient assez élevée, la charge a tendance à se répartir uniformément sur les différents sites. Les fluctuations de charge deviennent donc très faibles.

À plus faible remplissage ( $n \leq 0,5$  sur la figure 5.5),  $U_{ch}$  reste inférieur à l'interaction. En effet, s'il y a peu d'électrons en moyenne par site atomique, il est possible d'avoir des fluctuations de charge sans pour autant favoriser la double occupation.

Enfin, la figure 5.6 présente les résultats pour la double occupation divisée par la valeur Hartree-Fock ( $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \xrightarrow{\text{H.F.}} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$ ). La quantité  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  est sensible à l'interaction et au remplissage de la bande. L'interaction répulsive défavorise la présence simultanée de deux électrons sur un même site. Le remplissage de la bande par contre intervient de deux façons. D'une part, s'il y a moins d'électrons, les chances d'avoir un site doublement occupé sont réduites. L'effet des interactions diffère aussi selon le remplissage. En divisant  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  par sa valeur Hartree-Fock, nous éliminons les effets triviaux du remplissage sur la double occupation moyenne.

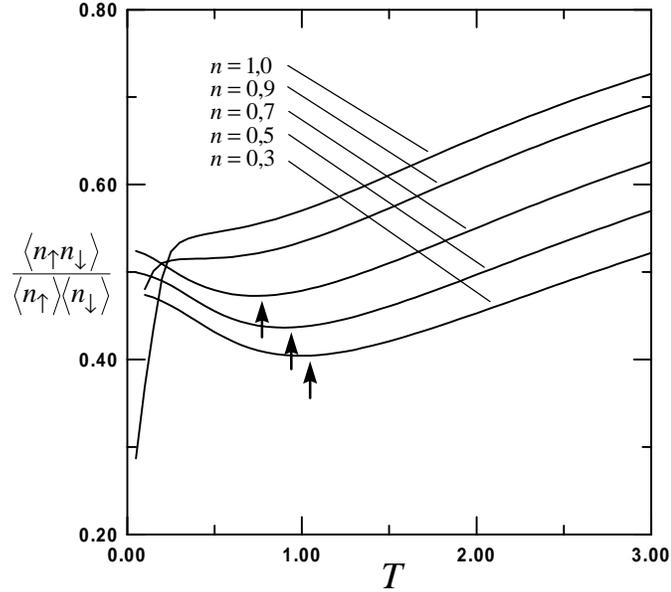


FIG. 5.7:  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle / \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$  vs  $T$  pour différents remplissages :  $U = 4$ ,  $t' = 0$ . Les flèches indiquent la position des minima.

Dans la région  $U \lesssim 3$ , l'interaction a un effet plus rapide sur  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  quand le remplissage est plus faible. Le coût énergétique de la double occupation est plus facilement évité par les électrons s'il y a beaucoup de sites libres. Aux valeurs de  $U$  plus élevées, les courbes  $n = 1, 0$  et  $n = 0, 9$  croisent les autres courbes. Ce comportement n'est pas physique et vient simplement du fait que près du demi-remplissage, à température suffisamment basse et à interaction assez élevée, la méthode Vilk-Tremblay a tendance à sous-estimer  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . Dans ce régime, l'accord avec les valeurs obtenues par simulation Monte-Carlo n'est plus satisfaisant. Cette faiblesse de la méthode s'explique de la façon suivante : à demi-remplissage et à basse température, nous avons vu que  $\chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0) \sim \ln^2 T$ . La seule façon alors de satisfaire le critère 5.9 est de sous-estimer artificiellement la valeur de la double occupation. La solution à ce problème est de ne plus utiliser l'ansatz 5.7 pour calculer  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  et  $U_{sp}$  mais plutôt de substituer dans l'équation 5.6 une valeur de  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  obtenue par une autre méthode.

La figure 5.7 montre la quantité  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle / \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle$  en fonction de la température. La chute artificielle de la double occupation près du demi-remplissage à basse température est très visible. Loin du demi-remplissage, nous voyons un minimum dans la double occupation. Il s'agit d'un phénomène analogue à l'effet Pomerantchuck [61].

Pour finir, nous allons analyser l'effet d'une amplitude de saut au second voisin

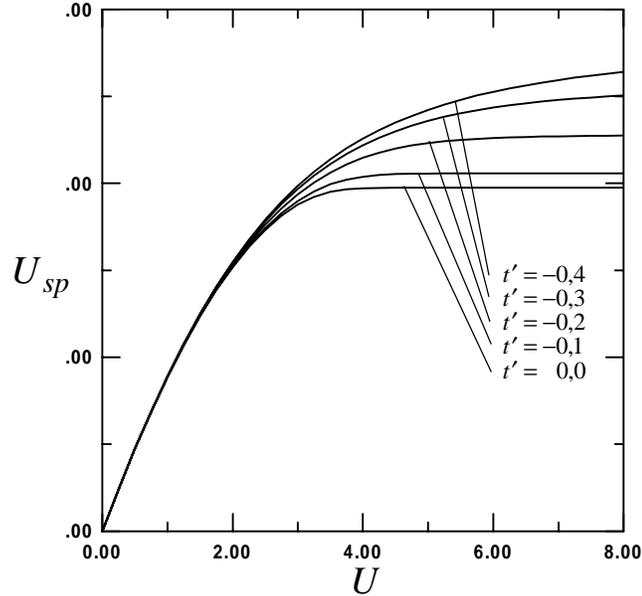


FIG. 5.8:  $U_{sp}$  vs  $U$  pour différentes valeurs de  $t'$  :  $T = 0, 2$ ,  $n = 1, 0$ .

sur le couplage effectif  $U_{sp}$ . La figure 5.8 montre des courbes pour  $U_{sp}$  en fonction de  $U$  pour différentes valeurs de  $t'$ . La saturation pour  $U_{sp}$  se produit à d'autant plus forte interaction que  $|t'|$  est élevé. La valeur de saturation pour  $U_{sp}$  est elle-même plus grande si  $|t'|$  est plus grand. L'effet d'une amplitude de saut au second voisin est donc similaire à celui du dopage pour  $U_{sp}$ .

### 5.3.2 Effet Pomerantchuck hors demi-remplissage

Nous avons mentionné plus haut l'existence d'un minimum loin du demi-remplissage dans la courbe de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  en fonction de la température (figure 5.7). Ce minimum est analogue à un effet Pomerantchuck. La méthode Vilk-Tremblay ne permet pas de savoir si l'effet existe près du demi-remplissage car elle prévoit une chute trop marquée de  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ . Nous avons quand même de bonnes raisons de croire que cet effet ne devrait être présent que loin du demi-remplissage.

L'effet Pomerantchuck est observé pour l'hélium-3 à haute pression et avait été prédit par Pomerantchuck en 1950 [61]. À une pression de 29 atm, la courbe de fusion du diagramme de phase présente un minimum à environ 0,3K (voir figure 5.9) ce qui veut dire qu'il est possible d'avoir une transition de phase de l'état solide vers l'état liquide en abaissant la température. Cet effet plutôt surprenant est le résultat de la

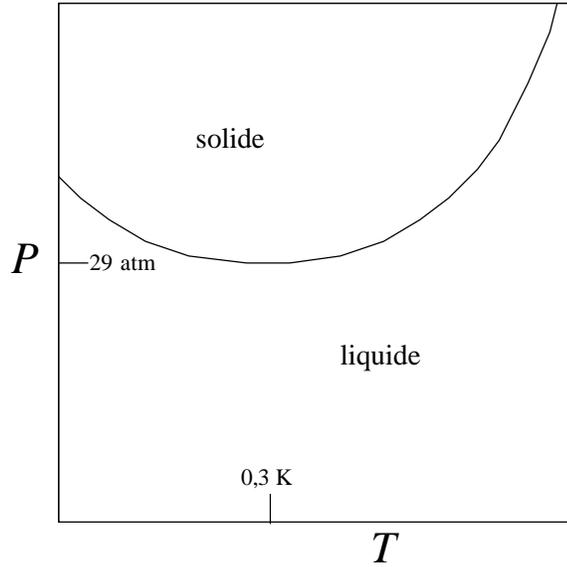


FIG. 5.9: Diagramme de phase pression vs température pour l'hélium-3 : minimum de la courbe de fusion.

compétition entre l'entropie du solide et celle du liquide. À une pression aussi élevée et à très basse température, il appert que le solide peut avoir une entropie plus élevée que le liquide à cause des degrés de liberté de spin. En effet, l'hélium-3 liquide est un bon liquide de Fermi. Il a donc, somme toute, très peu d'entropie à basse température ( $S \propto T$ ). Par contre, l'entropie associée aux moments magnétiques localisés dans l'hélium-3 solide peut être élevée. La diminution de température favorise la phase de basse entropie et donc une transition du solide vers le liquide [74].

Dans notre cas, il n'est pas question de transition du solide au liquide. Cependant, nous pouvons expliquer le minimum de  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  en fonction de la température (figure 5.7) avec un argument basé sur l'entropie. C'est de ce point de vue qu'il y a une similitude avec l'effet Pomerantchuck observé dans l'hélium-3. À basse température, le système a tendance à favoriser la double occupation pour minimiser la contribution à l'entropie des moments magnétiques localisés.

Le tableau suivant nous donne des valeurs de la température  $T^*$  à laquelle  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  est minimum pour différents remplissages et différentes valeurs de l'interaction :

	$U = 0,5$	$U = 2,0$	$U = 4,0$
$n = 0,1$	$T^* = 1,00$	$T^* = 0,98$	$T^* = 0,97$
$n = 0,2$	$T^* = 1,04$	$T^* = 1,02$	$T^* = 1,01$
$n = 0,3$	$T^* = 1,04$	$T^* = 1,01$	$T^* = 0,99$
$n = 0,5$	$T^* = 0,98$	$T^* = 0,93$	$T^* = 0,90$
$n = 0,7$	$T^* = 0,88$	$T^* = 0,80$	$T^* = 0,74$

La température  $T^*$  est toujours de l'ordre de l'unité et varie peu en fonction de l'interaction et du remplissage. Sa dépendance en  $U$  est d'autant plus faible que le remplissage est petit. Il appert également que la dépendance de  $T^*$  en  $n$  n'est pas monotone. À très faible remplissage ( $n \leq 0,2$ ),  $T^*$  augmente avec  $n$ . À partir de  $n = 0,3$ , ce comportement change et  $T^*$  se met à diminuer. Cette modification dans le comportement de  $T^*$  apparaît aux remplissages où la surface de Fermi commence à perdre sa sphéricité.

Le fait que toutes les valeurs de  $T^*$  soient environ de l'ordre de l'unité peut s'expliquer physiquement de la façon suivante. La double occupation sur un site est une quantité qui n'a de sens que si les électrons évoluent sur un réseau. Pour "voir" le réseau, il faut que les électrons puissent diffuser dans un intervalle d'énergie suffisamment grand pour que celui-ci contienne l'essentiel de la structure de bande. Typiquement, cet intervalle doit être de l'ordre de  $W/2$ . Cette condition est satisfaite si  $\pi T^* \sim W/2 \Rightarrow T^* \sim 1$ . Cet argument ne fait pas intervenir la valeur de  $U$  bien qu'il soit clair qu'il n'y a pas d'effet Pomerantchuck s'il n'y a pas d'interaction.

Nous allons maintenant montrer pourquoi  $T^*$  est si faiblement dépendant de  $U$ . Selon l'approche Vilk-Tremblay,  $\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$  obéit à l'équation 5.8 :

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{1}{2} \frac{U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle} \chi^0(\mathbf{q}, iq_n)} = n - 2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle.$$

Supposons que l'interaction et le remplissage sont suffisamment faibles pour que nous ayons  $\frac{1}{2} U_{sp} \chi^0(\mathbf{q}, iq_n) \ll 1 \forall (\mathbf{q}, iq_n)$  quand  $T \approx T^*$ . Il est alors possible de faire l'approximation suivante :

$$\frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi^0(\mathbf{q}, iq_n) \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{U \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}{\langle n_\uparrow \rangle \langle n_\downarrow \rangle} \chi^0(\mathbf{q}, iq_n) \right\} \approx n - 2 \langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4} \frac{U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle T}{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)\}^2 \approx \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle - \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle.$$

$$\Rightarrow \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle \approx \frac{\langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle}{1 + \frac{U}{n^2} \Lambda(T, n)} \quad \text{avec} \quad \Lambda(T, n) \equiv \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)\}^2.$$

Selon cette formule approchée pour la double occupation, le minimum ne peut provenir que du comportement de  $\Lambda(T, n)$ . Il appert que cette quantité passe effectivement par un maximum en température ce qui se traduit par un minimum dans la courbe de  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . La position de ce minimum est indépendante de  $U$  dans la mesure où cette approximation est précise, donc quand le remplissage et l'interaction sont suffisamment faibles. Cette analyse est en accord avec les valeurs de  $T^*$  présentées plus haut.

Il existe un argument physique permettant de penser que l'effet Pomerantchuck devrait être absent près du demi-remplissage. Quand  $n \approx 1$ , la longueur de corrélation des spins se met à croître de façon exponentielle pour  $T < T_X$  [78]. C'est à ces températures que la méthode Vilk-Tremblay cesse de prévoir correctement la valeur de  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$ . L'effet n'étant pas observé au-dessus de  $T_X$ , la seule possibilité est qu'il puisse exister à plus basse température. Or, sous  $T_X$ , les spins sont fortement corrélés. La présence dans le système de spins localisés ne peut donc pas contribuer tellement à une augmentation de l'entropie car ceux-ci ne sont pas indépendants. Il est donc peu probable que l'effet existe dans ce régime. Mathématiquement, la quantité  $\langle S_i^2 \rangle \sim n - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  augmente sous  $T_X$  ce qui suggère une décroissance monotone de la double occupation.

## 5.4 Calcul des fluctuations

Maintenant que nous connaissons le comportement des couplages effectifs et de la double occupation moyenne, nous allons nous intéresser aux fluctuations elles-mêmes. Jusqu'ici, nous n'avons considéré que les fluctuations des électrons libres en tenant compte toutefois des effets du réseau. Ceux-ci se sont avérés fondamentaux pour comprendre les propriétés du système d'électrons. Ce sont eux qui sont responsables des singularités logarithmiques dans le comportement en fréquence de  $\chi^{0''}$ . D'autre part, en présence d'interactions, les fluctuations de spin et de charge cessent de se

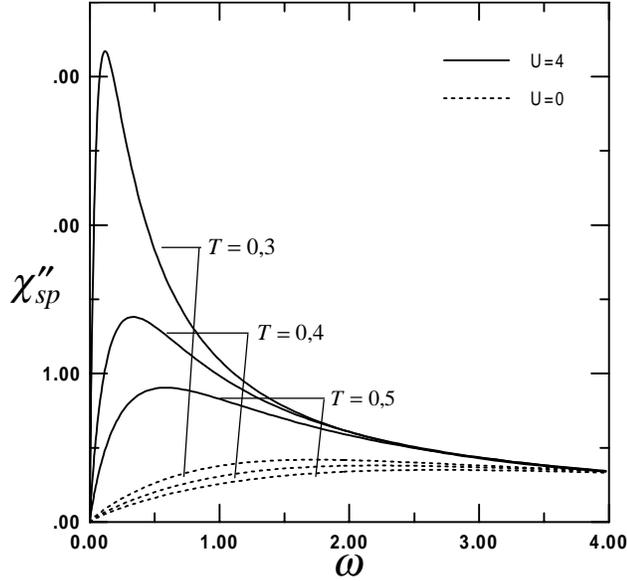


FIG. 5.10:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $q = (\pi, \pi)$ ,  $n = 1, 0$ ,  $t' = 0$ .

confondre. Nous allons commencer par regarder dans les détails ce qui se passe à demi-remplissage.

#### 5.4.1 Régime classique renormalisé : $n = 1$ et $t' = 0$

À demi-remplissage, les interactions favorisent les fluctuations de spin au détriment des fluctuations de charge. Pour un électron en moyenne par site atomique, une fluctuation de charge passe obligatoirement par une double occupation momentanée ce qui implique un coût énergétique. Ce genre de processus est donc défavorisé par la répulsion de Hubbard. Par contre, deux électrons sur deux sites voisins auront tendance à être dans des états de spin opposés. De cette façon, un des électrons pourra faire un aller-retour virtuel sur le site voisin, ce qui lui permettra d'abaisser son énergie à condition évidemment que la répulsion ne soit pas trop élevée. Le spin moyen sur un site est donc nul, mais l'arrangement des spins a une forte tendance antiferromagnétique quand la température est suffisamment basse. La composante  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  des fluctuations magnétiques est donc favorisée par les interactions.

La figure 5.10 illustre le comportement de  $\chi''_{sp}(\mathbf{Q}, \omega)$  à demi-remplissage au fur et à mesure que nous diminuons la température. Un pic très prononcé se développe. À  $T \sim 0,3$ , la position du pic en fréquence devient comparable à la température.

C'est le début du régime classique renormalisé que nous allons décrire dans cette section. À température plus basse, le pic devient encore plus prononcé de sorte qu'il est difficile de le comparer avec les résultats à température plus élevée sur une même figure. De fortes corrélations antiferromagnétiques apparaissent dans le système. Ces corrélations sont à courte portée car la bidimensionnalité du système empêche ce dernier de développer de l'ordre à longue portée à température finie.

L'ordre antiferromagnétique est caractérisé par une longueur de corrélation. Pour estimer cette longueur, développons la dépendance en vecteur d'onde autour du maximum de la susceptibilité situé à  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  :

$$\chi'_{sp}(\mathbf{q}, 0) = \frac{\chi^{0'}(\mathbf{q}, 0)}{1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0'}(\mathbf{q}, 0)} \stackrel{\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}}{\approx} \frac{\chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0) - \alpha(q_x - Q_x)^2}{1 - \frac{1}{2}U_{sp}(\chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0) - \alpha(q_x - Q_x)^2)}$$

$$\text{avec } \alpha \equiv -\frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2 \chi^{0'}(\mathbf{q}, 0)}{\partial^2 q_x} \right]_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}} .$$

La valeur critique de  $U_{sp}$  est donnée par  $2/\chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0) \equiv U_c$ . Posons  $\delta U \equiv U_c - U_{sp}$ . Nous obtenons

$$\chi'_{sp}(\mathbf{q}, 0) \stackrel{\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}}{\approx} \frac{2}{\delta U} \frac{1}{1 + [\frac{1}{2}\alpha U_{sp} U_c / \delta U] (q_x - Q_x)^2} = \frac{2}{\delta U} \frac{1}{1 + \xi_{sp}^2 (q_x - Q_x)^2}$$

$$\text{avec } \xi_{sp} \equiv \sqrt{\frac{U_{sp}}{\delta U}} \xi_0 \text{ et } \xi_0 \equiv \sqrt{\frac{1}{2}\alpha U_c},$$

où  $\xi_{sp}$  est une longueur de corrélation de spin et  $\xi_0$  est une longueur indépendante de l'interaction. À demi-remplissage, la valeur de  $U_{sp}$  a tendance à s'approcher de sa valeur critique  $U_c$  à basse température. La quantité  $\delta U$  devient donc très petite et la longueur de corrélation antiferromagnétique très grande ce qui caractérise l'étroitesse du pic de  $\chi'_{sp}(\mathbf{q}, 0)$  centré en  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ . Nous pouvons montrer que le comportement de  $\xi_{sp}$  est exponentiel quand la température est suffisamment basse [78] :

$$\xi_{sp} \sim \exp(\pi \tilde{\sigma}^2 \xi_0^2 U_{sp} / T)$$

avec

$$\tilde{\sigma}^2 \equiv \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{2}{\delta U} \frac{1}{1 + \xi_{sp}^2 (q - Q)^2},$$

la contribution non-quantique à la somme dans la partie gauche de l'équation 5.6.

Nous pouvons également introduire une fréquence de spin pour caractériser la dynamique des fluctuations magnétiques. Il faut procéder de la même manière :

$$\begin{aligned} \chi^{0'}(\mathbf{Q}, \omega) &\approx \chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0) - \alpha' |\omega| + \dots \\ \chi^{0''}(\mathbf{Q}, \omega) &\approx -\alpha'' \omega \ln |\omega| + \dots \end{aligned}$$

$$\chi_{sp}(\mathbf{Q}, \omega) \approx \frac{\chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0)}{1 - \frac{1}{2} U_{sp} [\chi^{0'}(\mathbf{Q}, 0) - i\alpha'' \omega \ln |\omega|]} = \frac{2}{\delta U} \frac{1}{1 + i \left[ \frac{1}{2} \alpha'' U_{sp} U_c / \delta U \right] \omega \ln |\omega|}$$

$$\chi_{sp}(\mathbf{Q}, \omega) \approx \frac{2}{\delta U} \frac{1}{1 + i(\omega/\omega_{sp}) \ln |\omega|} \quad (5.10)$$

$$\text{avec } \omega_{sp} \equiv \frac{2\delta U}{\alpha'' U_{sp} U_c} = \frac{\alpha}{\alpha''} \xi_{sp}^{-2}.$$

Ce résultat est légèrement différent de ce qui a déjà été obtenu dans la littérature [20] car nous avons tenu compte de la correction logarithmique au comportement en fréquence de  $\chi^{0''}(\mathbf{Q}, \omega)$ . Le coefficient  $\alpha''$  est donc défini par

$$\alpha'' \equiv \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\chi^{0''}(\mathbf{Q}, \omega)}{\omega \ln |\omega|}.$$

La fréquence  $\omega_{sp}$  a donc tendance à devenir très petite quand  $U_{sp} \approx U_c$ . Les fluctuations de spin deviennent presque statiques comme les considérations générales sur le ralentissement critique le suggèrent. Le système entre dans ce qu'il convient d'appeler un régime classique renormalisé. Ce régime est caractérisé par  $\omega_{sp} < \pi T$  et  $\xi_{sp} > \lambda_{th} \equiv \langle v_F \rangle / \pi T$  où  $\lambda_{th}$  est la longueur d'onde thermique de De Broglie. Il est qualifié de classique parce que l'énergie caractéristique des fluctuations de spin y est beaucoup plus petite que l'échelle d'énergie thermique ce qui correspond en mécanique statistique au régime classique.

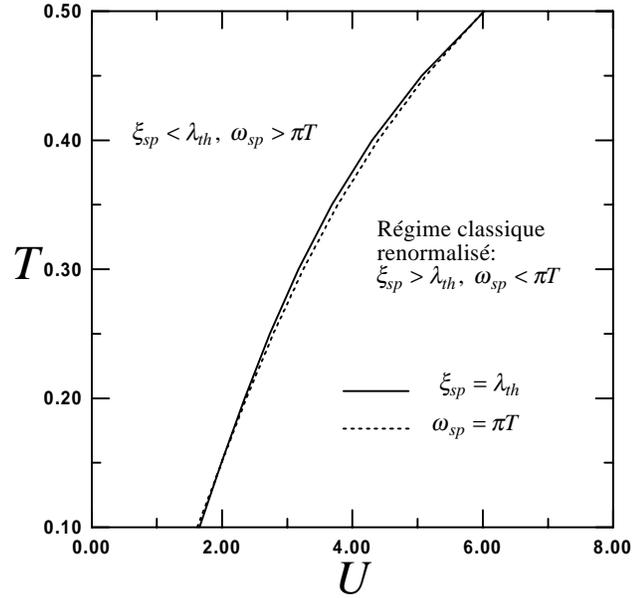


FIG. 5.11: Régime classique renormalisé dans un diagramme  $T$  vs  $U$  :  $n = 1, 0$ ,  $t' = 0$ .

La figure 5.11 montre la région du diagramme  $T$  vs  $U$  correspondant au régime classique renormalisé. La température  $T_X$  à laquelle ce régime apparaît est d'autant plus élevée que l'interaction est grande. Cet énoncé est juste seulement pour les valeurs de  $U$  du domaine de validité de l'approche Vilks-Tremblay ( $U \lesssim W$ ). À  $U$  plus élevée, la température  $T_X$  doit retomber ce qui n'est pas prévu par cette approche. En effet, une répulsion trop élevée finit par former des moments magnétiques locaux (comme dans la limite atomique de l'isolant de Mott) plutôt qu'une onde de densité de spin. Ces moments locaux ne s'ordonnent antiferromagnétiquement qu'à très basse température.

La figure 5.12 montre l'effet des interactions sur la susceptibilité de spin pour un vecteur quelconque de la diagonale de la zone de Brillouin. Bien que ce ne soit pas aussi marqué que dans le cas du vecteur  $\mathbf{Q}$ , les interactions favorisent aussi ces fluctuations. L'effet est d'autant plus prononcé que la température est basse. De même, pour un vecteur dont la fréquence singulière est non-nulle, les interactions agissent un peu de la même manière (figure 5.13).

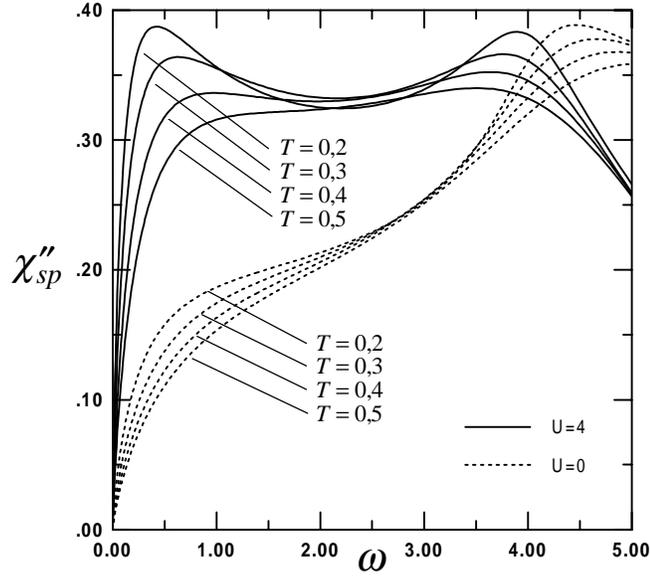


FIG. 5.12:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $q = (\pi/2, \pi/2)$ ,  $n = 1, 0$ ,  $t' = 0$ .

### 5.4.2 Comportement au voisinage de $\omega = \omega_s$

Quelques précisions doivent être apportées au sujet du comportement de  $\chi''_{sp}$  (ou  $\chi''_{ch}$ ) près d'une fréquence  $\omega_s$ . En principe, l'interaction fait disparaître la divergence logarithmique contenue dans  $\chi^{0''}$ . Pour le voir, écrivons la partie imaginaire des fluctuations de spin :

$$\chi''_{sp}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)}{\left(1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0'}(\mathbf{q}, \omega)\right)^2 + \left(\frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)\right)^2}. \quad (5.11)$$

Mathématiquement, une divergence dans  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega_s)$  annule  $\chi''_{sp}(\mathbf{q}, \omega_s)$ . Pourtant, la figure 5.13 semble montrer que les divergences en  $\omega = \omega_s$  ne disparaissent pas en présence des interactions.

Cette particularité vient du fait que la singularité de  $\chi^{0''}$  est logarithmique et donc que le comportement divergent est très lent à tendre vers l'infini. Au voisinage de  $\omega_s$ , la singularité provenant du numérateur de l'expression 5.11 commence à se manifester. Ce n'est cependant que beaucoup plus près de la fréquence  $\omega_s$  que  $\chi^{0''}$  au dénominateur domine le terme contenant  $\chi^{0'}$  pour éventuellement annuler  $\chi''_{sp}(\mathbf{q}, \omega_s)$ . Ce comportement ne peut être observé que si la résolution en fréquence est très élevée.

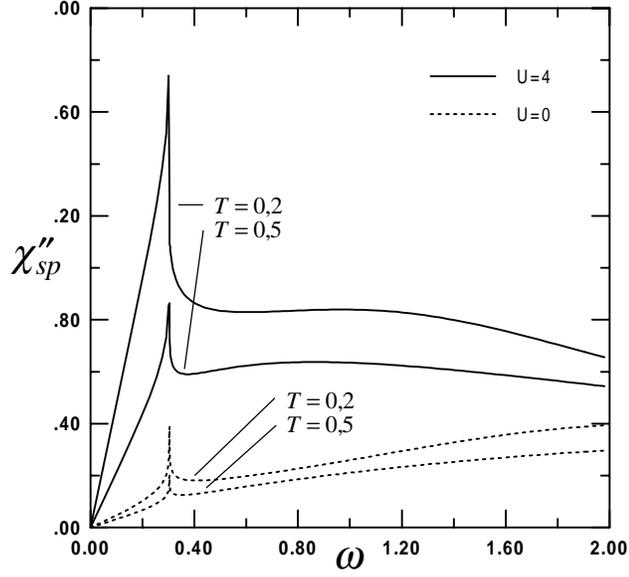


FIG. 5.13:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $q = (\pi, 3\pi/4)$ ,  $n = 1, 0$ ,  $t' = 0$ .

Plaçons-nous à une fréquence  $\omega = \omega_s + \delta\omega$  pour estimer la valeur de  $\delta\omega$  à partir de laquelle  $\chi''_{sp}(\mathbf{q}, \omega)$  cesse d'augmenter et commence à tendre vers zéro. Toujours au dénominateur de l'équation 5.11, le terme en  $\chi^{0''}$  commence à dominer quand

$$\left| 1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0'}(\mathbf{q}, \omega_s^+) \right| = \left| \frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega_s + \delta\omega) \right|.$$

Il faut préciser de quel côté la limite  $\omega \rightarrow \omega_s$  est prise dans  $\chi^{0'}$  car cette fonction est discontinue à  $\omega_s$ . En utilisant  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega_s + \delta\omega) \approx -C \ln |\delta\omega|$ , nous obtenons

$$\delta\omega = \exp \left\{ -\frac{2}{CU_{sp}} \left| 1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^{0'}(\mathbf{q}, \omega_s^+) \right| \right\}.$$

À titre d'exemple, évaluons  $\delta\omega$  pour la courbe  $T = 0,2$  et  $U = 4$  de la figure 5.13. Nous avons approximativement :  $U_{sp} \approx 2$ ,  $\chi^{0'}(\mathbf{q}, \omega_s^+) \approx 0,6$  et  $C \approx 0,034$  ce qui nous donne  $\delta\omega \sim 10^{-6}$ . Ce nombre est effectivement très petit. Nous pourrions donc, à toutes fins pratiques, considérer que  $\chi''_{sp, ch}(\mathbf{q}, \omega_s)$  est à peu près singulier et ce, malgré l'effet des interactions.

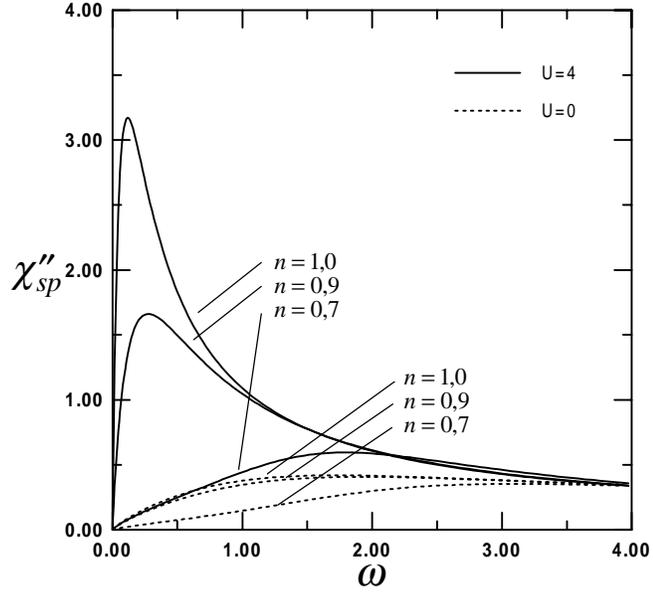


FIG. 5.14:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages :  $q = (\pi, \pi)$ ,  $T = 0, 3$ ,  $t' = 0$ .

### 5.4.3 Effet du dopage

La figure 5.14 illustre comment le remplissage affecte les fluctuations de spin au vecteur d'onde  $\mathbf{Q}$ . Hors demi-remplissage, ce maximum commence par être moins marqué pour éventuellement se déplacer dans la zone de Brillouin quand le potentiel chimique devient comparable à  $\pi T$ . L'effet des interactions sur le pic est également moins fort quand la surface de Fermi n'est plus parfaitement emboîtée. Néanmoins, les interactions favorisent ces fluctuations même lorsque le remplissage est différent de un. L'effet du remplissage est également illustré sur les figures 5.15 et 5.16 pour une fréquence singulière nulle et non-nulle respectivement. Les interactions ont des conséquences similaires.

Le remplissage de la bande a un effet sur le régime classique renormalisé. À  $n = 1$ , il existe une température  $T_X$  à laquelle les corrélations antiferromagnétiques deviennent plus grandes que la longueur d'onde thermique et ce, pour toutes les interactions étudiées ici. Hors demi-remplissage, cet énoncé cesse d'être vrai. Nous avons vu au chapitre trois que le maximum de  $\chi^{0'}$  reste à  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  quand le système est dopé tant et aussi longtemps que le potentiel chimique est plus petit que  $\pi T$ . Quand la température est suffisamment basse, ce maximum se déplace le long de la ligne  $(\pi, \pi) \rightarrow (\pi, 0)$ . Il correspond alors à des fluctuations de spin incommensurables [68].

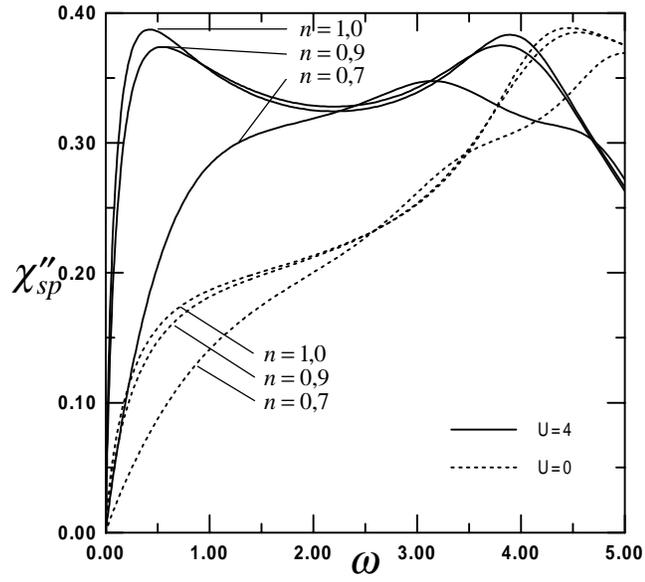


FIG. 5.15:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages :  $q = (\pi/2, \pi/2)$ ,  $T = 0, 2$ ,  $t' = 0$ .

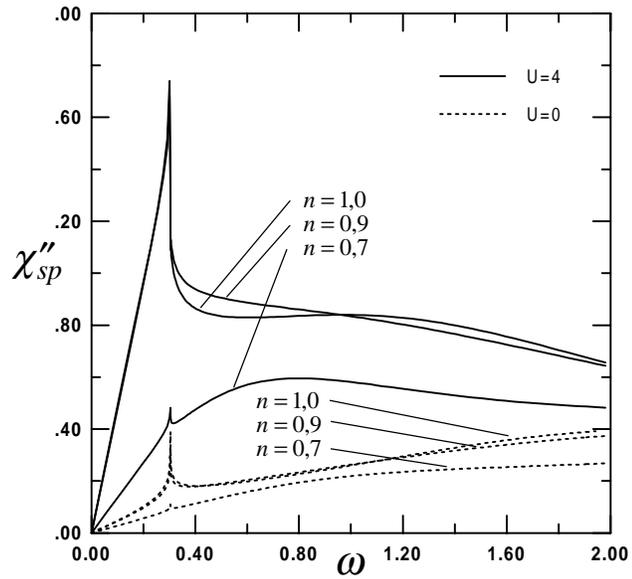


FIG. 5.16:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différents remplissages :  $q = (\pi, 3\pi/4)$ ,  $T = 0, 2$ ,  $t' = 0$ .

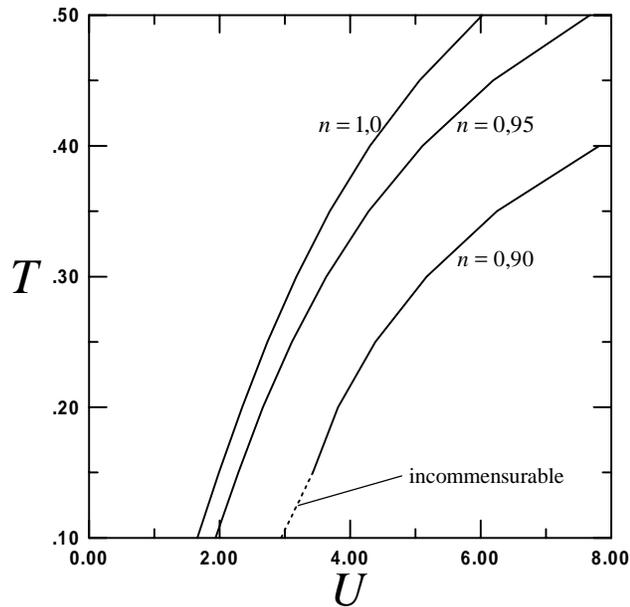


FIG. 5.17: Régime classique renormalisé dans un diagramme  $T$  vs  $U$  pour différents remplissages.  $t' = 0$ .

La figure 5.17 nous montre pour différents remplissages où se trouve la frontière du régime classique renormalisé dans un diagramme  $T$  vs  $U$ . Pour une interaction donnée, la température  $T_X$  est plus basse quand le système est dopé. Ce régime n'existe plus si le système est trop dopé. Le pointillé indique que les fluctuations sont incommensurables dès l'apparition du régime. Ailleurs dans le diagramme, cet ordre magnétique est commensurable lors de l'apparition du régime. À température plus basse que  $T_X$ , l'ordre magnétique finit toujours par devenir incommensurable hors demi-remplissage.

#### 5.4.4 Effet d'un saut au second voisin

La présence d'une amplitude de saut au second voisin a elle aussi un effet sur les fluctuations magnétiques. La figure 5.18 nous montre comment les fluctuations de spin situées à  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  évoluent avec  $t'$ . Ces fluctuations ont tendance à diminuer avec le saut au second voisin ce qui est prévisible car la surface de Fermi perd ses propriétés d'emboîtement. Les interactions favorisent tout de même ces fluctuations qui restent importantes.

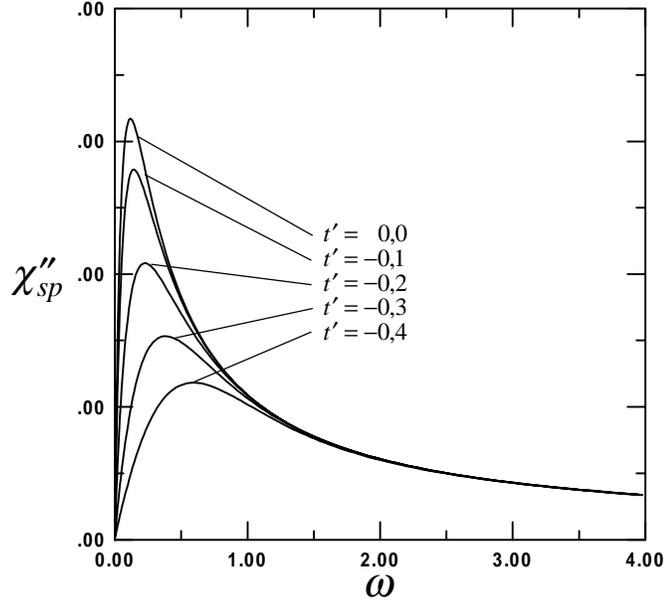


FIG. 5.18:  $\chi''_{sp}(q, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes valeurs de  $t'$  :  $q = (\pi, \pi)$ ,  $T = 0, 3$ ,  $U = 4, 0$ ,  $n = 1, 0$ .

## 5.5 Résumé des résultats importants

L'approche Vilk-Tremblay nous fournit la solution suivante de l'équation de Bethe-Salpeter pour les susceptibilités dans le canal particule-trou :

$$\chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 - \frac{1}{2}U_{sp}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}, \quad \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) = \frac{\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}{1 + \frac{1}{2}U_{ch}\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)}$$

où les couplages effectifs  $U_{sp, ch}$  et la double occupation moyenne sont les solutions du système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) &= n - 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle, \\ \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n) &= n + 2 \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle - n^2, \\ U_{sp} \langle n_{\uparrow} \rangle \langle n_{\downarrow} \rangle &= U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle. \end{aligned}$$

Hors demi-remplissage, il existe une température  $T^*$  à laquelle  $\langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle$  est minimum. La valeur de  $T^*$  dépend faiblement du remplissage et de l'interaction. Il s'agit d'un effet de type Pomerantchuck.

À demi-remplissage, un régime classique renormalisé apparaît à  $T < T_X$ . Ce régime est caractérisé par  $\omega_{sp} < \pi T$  et  $\xi_{sp} > \lambda_{th}$ . Les fluctuations antiferromagnétiques y sont beaucoup plus importantes que toutes les autres fluctuations. Hors demi-remplissage, la température  $T_X$  est plus basse pour une même interaction  $U$ . Les fluctuations dominantes deviennent éventuellement incommensurables. De même, l'effet d'une amplitude de saut au second voisin est de réduire les fluctuations antiferromagnétiques, bien que celles-ci restent importantes.

De façon générale, les interactions ont tendance à favoriser les fluctuations de spin au détriment des fluctuations de charge. C'est à demi-remplissage que cette tendance est maximale. Enfin, les comportements singuliers de  $\chi^{00}$  ne sont pratiquement pas détruits par l'interaction.

# Chapitre 6

## Self-énergie des électrons : approche non-perturbative

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié l'effet des interactions sur les fluctuations de spin et de charge. Nous avons vu notamment qu'elles étaient responsables de l'apparition d'ordre antiferromagnétique à courte portée près du demi-remplissage. Nous avons aussi montré qu'elles ont tendance à favoriser les fluctuations de spin et à supprimer les fluctuations de charge. Enfin, nous avons pu voir que les singularités logarithmiques contenues dans la susceptibilité des électrons libres ne disparaissaient pas vraiment sous l'effet des interactions.

Dans ce chapitre, nous allons calculer l'effet des fluctuations  $\chi_{sp}$  et  $\chi_{ch}$  sur les propriétés à une particule. Nous avons déjà calculé l'effet de  $\chi_0$  sur la self-énergie au chapitre 4. Ici, nous allons utiliser une approche non-perturbative qui tient compte de l'effet des interactions sur les fluctuations en les couplant à la fonction de Green. Ce couplage sera renormalisé par les interactions.

Il est nécessaire d'utiliser une approche non-perturbative pour deux raisons. L'approche perturbative employée au chapitre 4 ne tient pas compte de l'effet sur la self-énergie de l'éventuelle apparition d'ordre à courte portée. De plus, elle cesse d'être justifiée quand  $U \sim W$ .

### 6.1 Formule de Vilk et Tremblay pour la self-énergie

Au chapitre précédent, nous avons présenté la méthode de Vilk et Tremblay servant à résoudre approximativement l'équation de Bethe-Salpeter pour la suscepti-

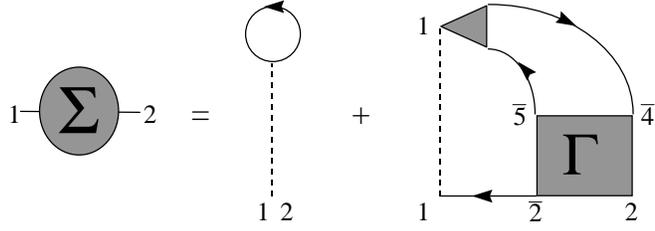


FIG. 6.1: Représentation diagrammatique de l'expression exacte pour la self-énergie.

bilité [78] dans le canal particule-trou. Dans le cadre de leur approche, ces auteurs proposent également d'améliorer le premier estimé pour la self-énergie [79]. Ce premier estimé n'est qu'un déplacement du potentiel chimique. Son contenu physique est donc trivial. La démarche est la suivante.

La self-énergie du modèle de Hubbard est donnée exactement par l'expression [80] :

$$\Sigma_{\sigma}(1, 2) = Un_{-\sigma}\delta(1 - 2) + UG_{\sigma}(1, \bar{2})\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5})\chi_{\bar{\sigma}-\sigma}(\bar{4}, \bar{5}; 1).$$

Le vertex irréductible  $\Gamma_{\sigma\bar{\sigma}}(\bar{2}, 2; \bar{4}, \bar{5})$  et la susceptibilité à trois points  $\chi_{\bar{\sigma}-\sigma}(\bar{4}, \bar{5}; 1)$  apparaissent aussi dans l'équation de Bethe-Salpeter. La figure 6.1 montre la représentation diagrammatique de cette équation. Le premier terme, celui de Hartree, décrit exactement le comportement à haute fréquence de la self-énergie. Le terme suivante, justifié à basse fréquence, est évalué en utilisant les mêmes valeurs de  $G$ ,  $\Gamma$  et  $\chi$  qui ont servi à évaluer de façon précise les fluctuations de spin et de charge.

En utilisant les définitions de  $U_{sp}$ ,  $U_{ch}$ ,  $\chi_{sp}$  et  $\chi_{ch}$  ainsi que le  $G^0$  entrant dans leur calcul, (équations 5.3 et 5.4), nous pouvons récrire cette dernière expression sous la forme suivante :

$$\Sigma_{\sigma}(1, 2) = Un_{-\sigma}\delta(1 - 2) + \frac{1}{4}UG_{\sigma}^0(1, 2) [U_{sp}\chi_{sp}(2; 1) + U_{ch}\chi_{ch}(2; 1)].$$

À partir d'ici, nous laisserons tomber le premier terme de cette dernière expression. De la même manière qu'en théorie des perturbations, ce terme correspond à la contribution Hartree et n'est qu'un déplacement du potentiel chimique.

Dans l'espace réciproque, l'expression pour la self-énergie devient :

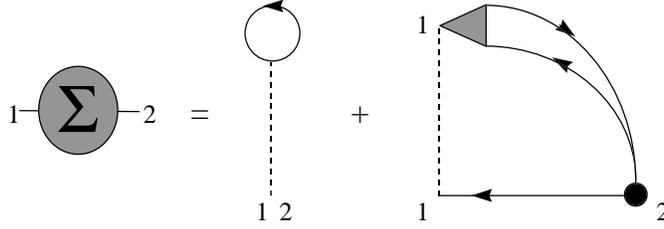


FIG. 6.2: Représentation diagrammatique de l'approche Vilk-Tremblay pour l'expression de la self-énergie.

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U T}{4 N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (6.1)$$

Nous avons laissé tomber les indices de spin car la self-énergie et la fonction de Green n'en dépendent pas dans l'état normal.

L'expression 6.1 est comparée au résultat obtenu en théorie des perturbations (équation 4.4). Les susceptibilités qui y apparaissent contiennent maintenant l'effet des interactions. De plus, le préfacteur en  $U^2$  a été remplacé par  $UU_{sp}$  pour la contribution des spins et  $UU_{ch}$  pour celle des fluctuations de charge. Dans la limite du faible couplage et lorsqu'on se place nettement au-dessus de la température  $T_X$ , nous retrouvons l'expression de la théorie des perturbations. En effet, nous avons alors  $U_{sp,ch} \approx U$  et  $\chi_{sp,ch} \approx \chi^0$ .

L'expression 6.1 est particulièrement attrayante car elle tient compte des corrections de vertex par le biais des préfacteurs  $UU_{sp}$  et  $UU_{ch}$  [80]. Ces dernières sont réputées importantes car le théorème de Migdal ne s'applique pas dans le contexte des interactions électron-électron.

### 6.1.1 Formule symétrique

La formule 6.1 obtenue pour la self-énergie dans le cadre de l'approche Vilk-Tremblay souffre d'une ambiguïté. Elle est écrite en termes des susceptibilités longitudinales  $\chi_{sp}$  et  $\chi_{ch}$ . Or, si nous la dérivons dans le canal transversal, le résultat obtenu est différent :

$$\Sigma^{(t)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U T}{2 N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n).$$

Cette différence est une faiblesse de l'approximation car le résultat exact est invariant sous rotation. En effet, nous avons vu au chapitre 2 que le hamiltonien de Hubbard est invariant sous rotation des spins. Il en va donc de même pour la self-énergie. Afin d'améliorer l'approximation, nous optons pour une solution de compromis en prenant la moyenne des résultats longitudinal et transversal [58] ce qui permet à la fois de satisfaire l'invariance sous rotation et la symétrie de croisement :

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U T}{8 N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [3U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n). \quad (6.2)$$

C'est cette expression dite "symétrique" que nous utiliserons dans tout ce qui suit. En fréquences réelles, elle prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Sigma'(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{U}{32\pi^3} P \int d^2q \int d\omega' [3U_{sp} \chi_{sp}''(\mathbf{q}, \omega') + U_{ch} \chi_{ch}''(\mathbf{q}, \omega')] \frac{n_B(\omega') + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)}{\omega + \omega' - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0} \\ \Sigma''(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{U}{32\pi^2} \int d^2q \int d\omega' [3U_{sp} \chi_{sp}''(\mathbf{q}, \omega') + U_{ch} \chi_{ch}''(\mathbf{q}, \omega')] \\ &\quad \times [n_B(\omega') + f(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0)] \delta(\omega + \omega' - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0). \end{aligned}$$

### 6.1.2 Relation exacte entre les propriétés à une et à deux particules

Dans une théorie exacte, la self-énergie et la fonction de Green obéissent à la relation suivante :

$$\frac{1}{2} \text{Tr} \Sigma G = U \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle. \quad (6.3)$$

Cette relation n'est qu'approximativement satisfaite par la formule de self-énergie de Vilk et Tremblay. Dans cette approche, les quantités servant à calculer  $\Sigma$  ne contiennent pas d'effets de self-énergie. Elles sont toutes fonctions de  $\chi^0$  et de  $G^0$ . C'est la raison pour laquelle la relation 6.3 n'est pas satisfaite. Notons toutefois qu'un

calcul de self-énergie auto-cohérent ne satisfait pas non plus ce genre de relation. Dans l’approche Vilk-Tremblay, cette relation est utilisée pour estimer à quel point l’expression améliorée de la self-énergie est cohérente avec le point de départ.

Par ailleurs, nous pouvons montrer que la relation

$$\frac{1}{2}\text{Tr}\Sigma G^0 = U \langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle \quad (6.4)$$

est satisfaite au sens où la double occupation obtenue par cette trace est rigoureusement égale à celle calculée avec l’ansatz (voir chapitre 5). Il est intéressant de remarquer que le spin et la charge contribuent dans les mêmes proportions à cette égalité. Nous pourrions donc introduire un paramètre  $\alpha \in [0, 1]$  et réécrire la formule de self-énergie sous la forme

$$\Sigma(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{U}{2} \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}, iq_n} [\alpha U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, iq_n) + (1 - \alpha) U_{ch} \chi_{ch}(\mathbf{q}, iq_n)] G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n)$$

sans que la relation 6.4 ne soit affectée. Cette constatation motive aussi le choix de “moyenner” les canaux longitudinal et transversal pour obtenir la formule symétrique 6.2. Ce choix correspond à  $\alpha = 3/4$ .

## 6.2 Propriétés à une particule dans le régime classique renormalisé

Dans cette section, nous allons nous intéresser au comportement de la self-énergie et du poids spectral dans le régime classique renormalisé identifié au chapitre 5. Ce sujet a déjà fait l’objet des références [79], [80] et [58]. Dans ce régime, les fluctuations antiferromagnétiques  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  deviennent nettement dominantes et ont pour conséquence d’ouvrir un pseudogap dans le poids spectral. Nous allons traiter de quelques considérations qui n’ont pas été abordées dans la littérature antérieure.

Les figures 6.3 et 6.4 montrent le comportement de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  pour différentes températures. À haute température, l’évolution des courbes est qualitativement similaire aux résultats obtenus en théorie des perturbations au second ordre. Au-dessus de  $T_X$ , une diminution de la température entraîne une réduction de la largeur de l’anomalie

et de la valeur absolue de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)$ . À  $T \lesssim T_X$ ,  $|\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)|$  se met à croître très rapidement et l'anomalie gagne en largeur. Ce phénomène est plus prononcé et apparaît à plus haute température à  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0)$ .

L'effet des fluctuations antiferromagnétiques est plus déterminant à  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0)$  car ce sont les fluctuations autour du vecteur  $\mathbf{q} \approx (\pi, \pi)$  qui sont responsables de l'anomalie en ce point de la surface de Fermi même au-dessus de  $T_X$  (voir chapitre 4). La self-énergie à ce vecteur d'onde est donc déjà très sensible à ces fluctuations avant même qu'elles ne deviennent dominantes. Le régime classique renormalisé ne fait qu'accentuer davantage le comportement non-analytique à basse fréquence. Nous avons donc

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) - \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\sim} |\omega| \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0), T < T_X.$$

Ailleurs sur la surface de Fermi, l'anomalie à haute température n'est pas créée par les fluctuations antiferromagnétiques. À titre d'exemple, les fluctuations au vecteur d'onde  $\mathbf{q} \approx (0, 0)$  sont responsables de l'anomalie à  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$ . Quand les fluctuations antiferromagnétiques deviennent dominantes, elles font rapidement augmenter la valeur de  $|\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)|$  et les contributions non-analytiques deviennent négligeables. La figure 6.5 illustre bien cette évolution pour le vecteur  $\mathbf{k}_F^0 = (3\pi/4, \pi/4)$ . Nous avons donc

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) - \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0) \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\sim} \omega^2 \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 \neq (\pi, 0), T < T_X.$$

L'effet est également visible dans le poids spectral  $A(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  (figures 6.6 et 6.7). Pour l'interaction choisie ( $U = 4$ ), le poids spectral contient un petit pseudogap avant même que les fluctuations antiferromagnétiques n'apparaissent. Ce pseudogap est uniquement dû aux singularités de  $\chi^{00}$  et aux interactions électrons-électrons. Au-dessus de  $T_X$ , le poids spectral gagne en étroitesse quand la température est diminuée. Sous  $T_X$ , les fluctuations antiferromagnétiques deviennent la cause du pseudogap. Ce dernier se creuse alors et gagne en largeur quand la température diminue. Ici encore, le phénomène est plus marqué au vecteur  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0)$  pour les mêmes raisons évoquées plus haut. Le comportement non-analytique en ce point de la surface de Fermi est d'ailleurs visible dans le poids spectral (figure 6.7).

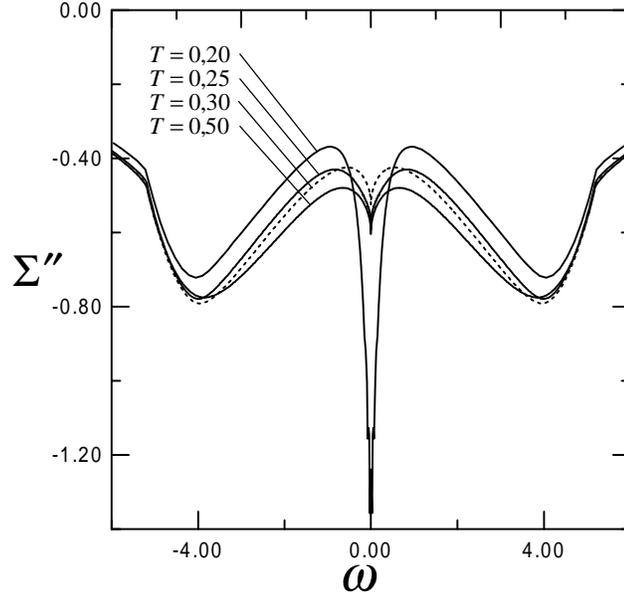


FIG. 6.3:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 1, 0$ ,  $k_F^0 = (\pi/2, \pi/2)$ ,  $U = 4$ ,  $t' = 0$ .

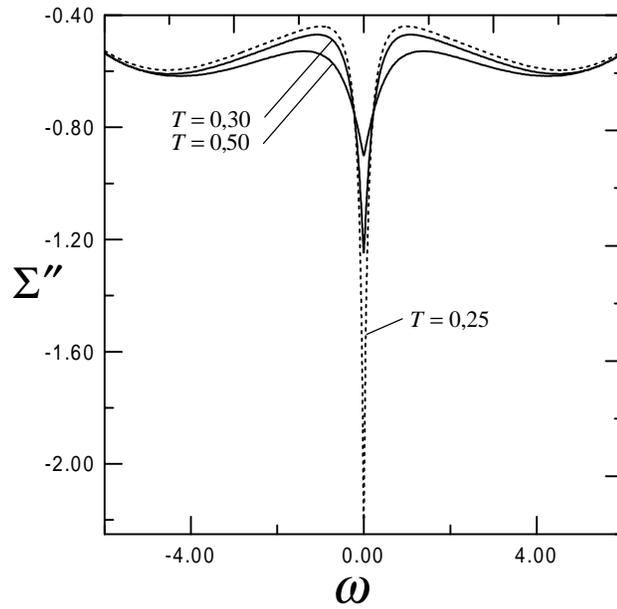


FIG. 6.4:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 1, 0$ ,  $k_F^0 = (\pi, 0)$ ,  $U = 4$ ,  $t' = 0$ .

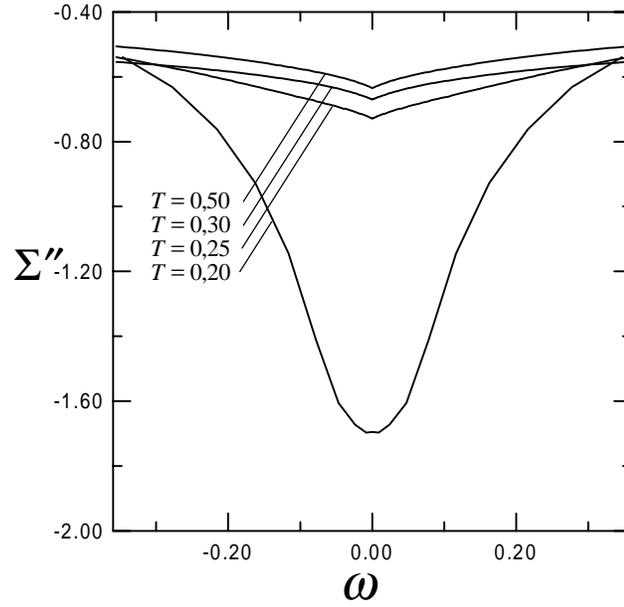


FIG. 6.5:  $\Sigma''(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 1, 0$ ,  $k_F^0 = (3\pi/4, \pi/4)$ ,  $U = 4$ ,  $t' = 0$ .

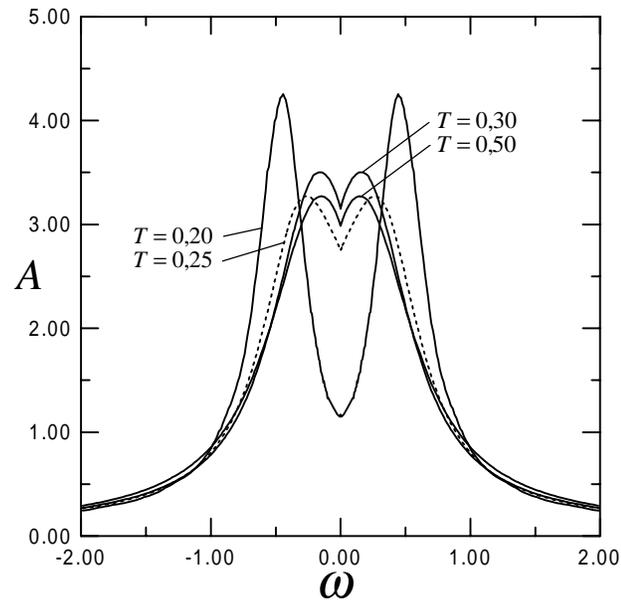


FIG. 6.6:  $A(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 1, 0$ ,  $k_F^0 = (3\pi/4, \pi/4)$ ,  $U = 4$ ,  $t' = 0$ .

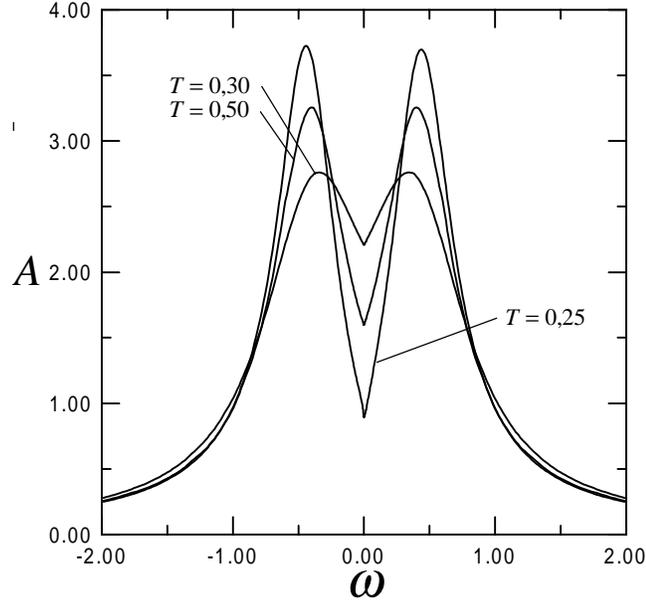


FIG. 6.7:  $A(k_F^0, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 1, 0$ ,  $k_F^0 = (\pi, 0)$ ,  $U = 4$ ,  $t' = 0$ .

### 6.3 Surface de Fermi des SHT : effet d'un saut au second voisin

Finalement, le calcul de la self-énergie et du poids spectral a été effectué pour une surface de Fermi similaire à celle des SHT. Nous avons déjà fait cette étude dans le cadre de la théorie des perturbations au second ordre. À faible  $U$ , il est légitime de supposer que la surface de Fermi est peu affectée par les interactions i.e. que  $\mathbf{k}_F \approx \mathbf{k}_F^0$ . Ici, nous travaillons avec des valeurs de  $U$  comparables à la largeur de bande. Cette hypothèse cesse alors d'être justifiée. Il faut trouver les vecteurs  $\mathbf{k}_F$  pour lesquels le poids spectral est centré à  $\omega = 0$ .

La figure 6.8 montre le comportement de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F, \omega)$  pour trois températures différentes dans la direction  $\theta = \pi/10$ . Nous avons estimé  $\mathbf{k}_F \approx 1,30\mathbf{k}_F^0$  dans cette direction. Près de  $\omega = 0$ ,  $|\Sigma''(\mathbf{k}_F, \omega)|$  augmente avec la diminution de la température. La figure 6.9 montre les poids spectraux correspondants. Un pseudogap se développe quand la température est abaissée.

La figure 6.10 montre les courbes de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F, \omega)$  dans la direction  $\theta = \pi/4$ . Dans cette direction, nous avons  $\mathbf{k}_F \approx 1,24\mathbf{k}_F^0$ . À  $T = 0,3$  et  $T = 0,2$ , le comportement à

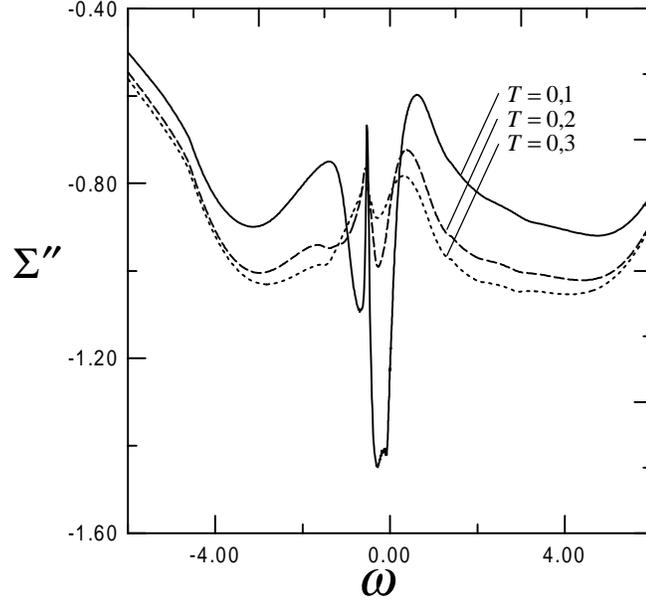


FIG. 6.8:  $\Sigma''(k_F, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 0, 90$ ,  $k_F$  selon la direction  $\theta = \pi/10$ ,  $U = 6$ ,  $t' = -0, 2$ .

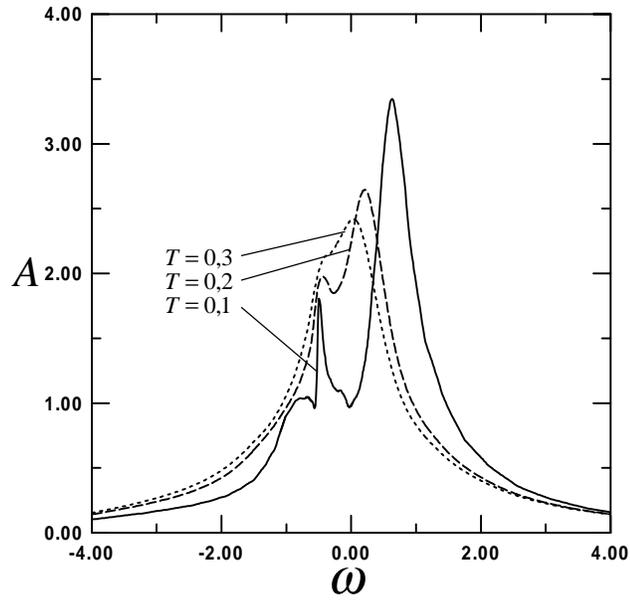


FIG. 6.9:  $A(k_F, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 0, 90$ ,  $k_F$  selon la direction  $\theta = \pi/10$ ,  $U = 6$ ,  $t' = -0, 2$ .

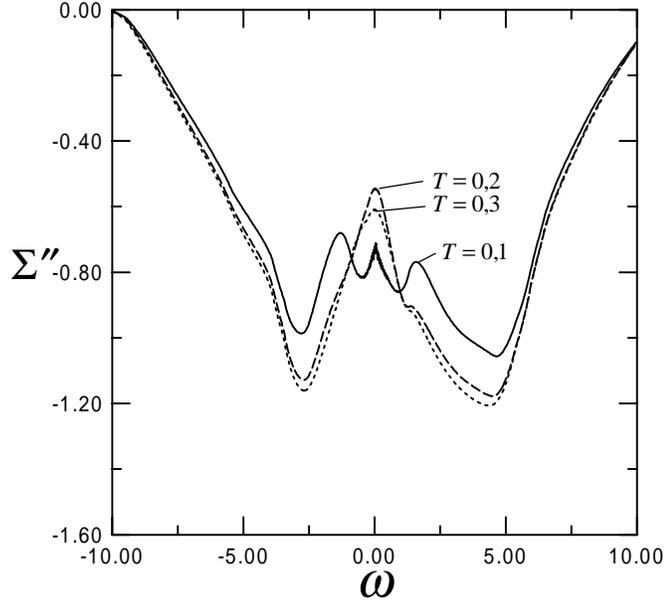


FIG. 6.10:  $\Sigma''(k_F, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 0, 90$ ,  $k_F$  selon la direction  $\theta = \pi/4$ ,  $U = 6$ ,  $t' = -0, 2$ .

basse fréquence est quadratique. La valeur absolue de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F, \omega)$  diminue avec l'abaissement de la température. À  $T = 0, 1$ ,  $|\Sigma''(\mathbf{k}_F, \omega)|$  se met brusquement à augmenter. La résolution numérique ne permet pas de voir si le comportement en fréquence reste quadratique. Si c'est le cas, le poids de quasi-particule est à tout le moins réduit de façon drastique. La figure 6.11 montre les poids spectraux correspondants. Il n'y a pas de pseudogap dans cette direction pour les températures que nous avons étudiées. Cependant, le changement de comportement en température est apparent dans le poids spectral. De plus, la largeur du poids spectral à  $T = 0, 1$  est trop grande pour qu'il s'agisse d'un liquide de Fermi. La largeur du pseudogap dépend donc de la direction. Il augmente quand nous nous éloignons de la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$ .

L'existence apparente de quasi-particules dans la direction  $\theta = \pi/4$  et leur absence complète loin de cette direction ( $\theta = \pi/10$ ) s'apparente aux résultats obtenus dans le cadre du modèle phénoménologique du liquide de Fermi quasi-antiferromagnétique (*nearly antiferromagnetic Fermi liquid*) [55] [56]. Dans cette théorie, les points de la surface de Fermi qui sont dans la direction  $\theta = \pi/4$  sont "froids" en ce sens que les quasi-particules qui s'y trouvent ne sont que faiblement couplées aux fluctuations antiferromagnétiques. Loin de cette direction, ce couplage est fort et les quasi-particules

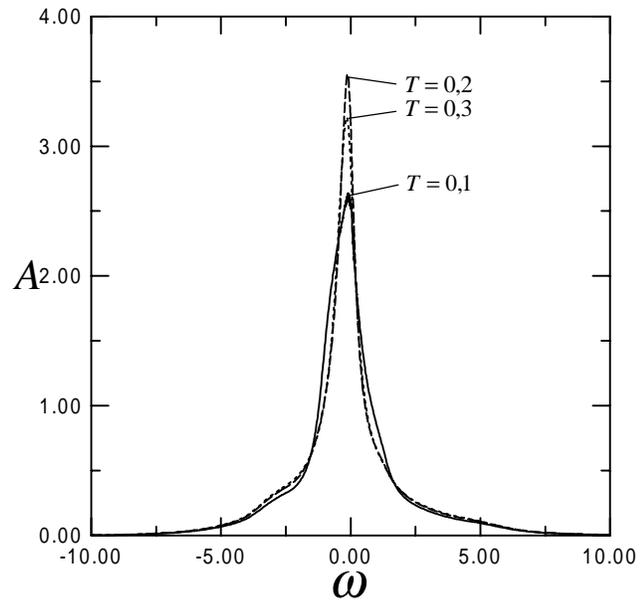


FIG. 6.11:  $A(k_F, \omega)$  vs  $\omega$  pour différentes températures :  $n = 0,90$ ,  $k_F$  selon la direction  $\theta = \pi/4$ ,  $U = 6$ ,  $t' = -0,2$ .

sont détruites. Ce sont des points “chauds”.

# Conclusion.

Dans cet ouvrage, nous avons dérivé plusieurs propriétés électroniques du modèle de Hubbard. Un résultat important de notre travail est certainement l'existence de singularités logarithmiques dans la partie imaginaire de la susceptibilité des électrons libres à demi-remplissage et sans saut au second voisin :

$$\chi^{0''} \sim -\frac{\omega}{T} \ln \left| \frac{|\omega| - \omega_s(\mathbf{q})}{\Delta^2} \right| \quad \text{pour } |\omega|, \omega_s \lesssim \pi T, \Delta \sim \pi T/W.$$

Cette susceptibilité a deux caractéristiques inhabituelles. Le préfacteur  $1/T$  et la singularité logarithmique en  $|\omega| = \omega_s$  sont des conséquences du réseau, de l'emboîtement de la surface de Fermi et de la faible dimensionnalité du système. Ces fluctuations sont déterminantes car elles sont associées à des vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  qui sont approximativement parallèles aux diagonales de la zone de Brillouin. Sur une surface de Fermi emboîtée, ces vecteurs relient des points de faible énergie et ont donc une influence sur le comportement à basse fréquence de la self-énergie.

L'effet de ces fluctuations sur la self-énergie a été étudié dans le cadre de la théorie des perturbations au second ordre. À basse fréquence, la partie imaginaire contient une anomalie dont la largeur est de l'ordre de la température. Le comportement en fréquence est caractérisé par

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\sim} |\omega| \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 \neq (\pi/2, \pi/2) \text{ et}$$

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \stackrel{\omega \rightarrow 0}{\sim} \sqrt{|\omega|} \quad \text{pour } \mathbf{k}_F^0 = (\pi/2, \pi/2).$$

Cette self-énergie est incompatible avec la notion de quasi-particules. Son comportement en température est donné par  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega = 0) \sim T \ln T$  ce qui diffère du comportement  $T^2 \ln T$  caractéristique d'un liquide de Fermi bidimensionnel.

Ces résultats obtenus à demi-remplissage tiennent étonnamment la route lorsque nous dopons le système et que nous introduisons un saut au second voisin. Les singularités de la susceptibilité ne disparaissent que lorsque le potentiel chimique devient comparable à  $\pi T$  et à  $\omega_s$ . Pour une surface de Fermi analogue à celle des SHT, l'anomalie de basse fréquence dans la self-énergie ne se résorbe que partiellement. Ces propriétés électroniques pourraient donc jouer un rôle dans la physique des SHT.

Virosztek et Ruvalds [81] ont montré qu'un liquide de Fermi emboîté est un liquide de Fermi marginal [75] quand la densité d'états est constante au niveau de Fermi. Dans le cas qui nous intéresse, la densité d'états est singulière à  $\omega = 0$ . Une comparaison de nos résultats avec l'hypothèse phénoménologique du liquide de Fermi marginal a d'ailleurs montré que les deux descriptions sont assez différentes.

La self-énergie calculée avec l'approche FLEX possède aussi une anomalie de basse fréquence lorsque l'interaction est suffisamment élevée ( $U \approx 2, 5$ ) [22]. Cette anomalie est un petit minimum local quadratique alors que la nôtre n'est pas analytique à  $\omega = 0$ . La self-énergie de la méthode FLEX n'en est pas moins tout aussi incompatible avec la notion de quasi-particule. Cette méthode est très différente de celle que nous avons utilisée. Il est donc légitime de penser que l'existence d'une anomalie de ce genre est une véritable propriété du modèle et non pas une curiosité de la méthode employée. Cela dit, l'anomalie obtenue avec la méthode FLEX pourrait aussi être d'une nature différente.

La self-énergie que nous avons obtenue peut être mise en relation avec la résistivité dans le régime non liquide de Fermi des SHT. Dans ce régime,  $\rho_{ab}$  est linéaire en température. Si nous laissons tomber la correction logarithmique qui serait par ailleurs difficile à mesurer expérimentalement, nous avons trouvé que  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, 0)$  est linéaire en  $T$  partout sur la surface de Fermi. Il est donc possible qu'un lien existe entre notre résultat et la résistivité des SHT. À dopage élevé, les mesures de résistivité suggèrent un comportement liquide de Fermi ( $\sim T^2$ ) ce qui est également compatible avec nos résultats.

L'effet des interactions sur les fluctuations de spin et de charge a également fait l'objet d'une analyse dans cet ouvrage. Nous avons identifié un comportement analogue à l'effet Pomeranchuk pour la double occupation moyenne hors demi-remplissage. Cet effet a déjà été observé en dimension trois par Daré et Albinet [21] et en dimension infini par Georges et Krauth [29]. Nous avons vu aussi que les singularités du  $\chi^{00}$  ne disparaissent pas sous l'effet des interactions. Enfin, l'existence

d'un régime classique renormalisé près du demi-remplissage n'est pas compromise par les propriétés inhabituelles des fluctuations que nous avons identifiées. La fréquence caractéristique des fluctuations de spin nécessite cependant une redéfinition.

L'utilisation d'une approche non-perturbative nous a permis de travailler avec une interaction de l'ordre de la largeur de bande et de considérer le comportement de la self-énergie dans le régime classique renormalisé. Dans ce régime, nous avons vu un pseudogap dans le poids spectral conformément aux travaux antérieurs sur le sujet. La raison pour laquelle le pseudogap se développe plus rapidement à  $\mathbf{k}_F^0 = (\pi, 0)$  a d'ailleurs été éclaircie. Chose surprenante, nous avons aussi obtenu un petit pseudogap au-dessus du régime classique renormalisé et ce, partout sur la surface de Fermi. L'anomalie de la self-énergie peut ouvrir un pseudogap dans le poids spectral en l'absence de fluctuations antiferromagnétiques importantes si l'interaction est suffisamment élevée. Nous avons également trouvé un pseudogap pour une surface de Fermi analogue à celle des SCHAT. Celui-ci est absent dans la direction  $(0, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$  et n'apparaît que loin de la diagonale. Un parallèle a pu être établi avec la théorie phénoménologique du liquide de Fermi quasi-antiferromagnétique.

En résumé, nous avons identifié et expliqué plusieurs propriétés électroniques du modèle de Hubbard qui diffèrent de celles d'un liquide de Fermi. Nous avons également établi des parallèles entre ces propriétés et celles de l'état normal des SCHAT. Selon nos résultats, il y a toujours lieu de considérer le modèle de Hubbard comme un candidat pour expliquer la physique de l'état normal des SCHAT. Une meilleure compréhension du modèle pourrait dans le futur jeter un éclairage nouveau sur la physique des plans d'oxyde de cuivre en suggérant de nouvelles pistes pour les théories phénoménologiques telles que celles que nous avons mentionnées au chapitre 1.

Ce travail ouvre deux pistes importantes pour la suite des choses. Les caractéristiques du liquide emboîté ont été analysées. Il serait intéressant d'établir la robustesse de cette description en appliquant la théorie des perturbations non pas aux particules libres mais aux excitations du liquide emboîté telles que nous les avons obtenues. D'autre part, nous ne faisons qu'aborder la question d'une surface de Fermi similaire à celle des SCHAT en présence d'une interaction comparable à la largeur de bande. Ce travail pourrait être poussé beaucoup plus loin. Les quelques résultats obtenus dans cet ouvrage suggèrent que cette étude serait très pertinente dans notre quête de compréhension de la physique des SCHAT.



# Annexe A

## Analyse des comportements singuliers de $\chi^{0//}$

Dans cette annexe, nous présentons une dérivation détaillée des résultats 3.12 et 3.13 du chapitre 3. Par hypothèse, nous posons  $q_x, q_y > 0$  partout dans notre analyse.

Le radical au dénominateur de l'équation 3.10 s'annule pour certaines valeurs de  $k_x = k_x^s$ . Il peut y avoir jusqu'à 4 valeurs de  $k_x^s$  qui annulent ainsi le dénominateur sur l'intervalle d'intégration pour  $k_x$ . Ce sont également les coupures imposées par la fonction  $\theta$ . Nous voulons savoir si ces singularités sont intégrables. La position de ces singularités est donnée par

$$\sin(k_x^s) = \frac{\omega/4 \mp \sin(q_y/2)}{\sin(q_x/2)} \quad (\text{A.1})$$

ce qui implique

$$[\sin(k_y^0)]_{k_x=k_x^s} = \pm 1 \Rightarrow [k_y^0]_{k_x=k_x^s} = \pm \frac{\pi}{2}.$$

À partir d'ici, chaque symbole  $\pm$  que nous rencontrerons sera le signe de  $k_y^0$  évalué à la singularité. L'équation A.1 indique que nous n'aurons des points singuliers à intégrer que si  $|\sin(q_x/2)| \geq |\omega/4 \mp \sin(q_y/2)|$ . Étudions la partie de l'intégrale 3.10 qui contient des singularités. Pour ce faire, posons  $k_x = k_x^s + \delta$  avec  $|\delta| \in [0, \Delta]$ . Nous verrons plus loin comment estimer l'ordre de grandeur de la coupure  $\Delta$ . Pour l'instant, ce paramètre est réputé petit. Le signe de  $\delta$  est choisi pour avoir un radical

réel au dénominateur de 3.10. Développons l'argument du radical en puissance de  $\delta$  :

$$\begin{aligned}
& \sin^2(q_y/2) - (\omega/4 - \sin(k_x) \sin(q_x/2))^2 \\
& \approx \sin^2(q_y/2) - \left[ \omega/4 - \left\{ \sin(k_x^s) \left(1 - \frac{\delta^2}{2}\right) + \delta \cos(k_x^s) \right\} \sin(q_x/2) \right]^2 \\
& = \sin^2(q_y/2) - \\
& \quad \left[ \left\{ \omega/4 - \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \right\} - \delta \cos(k_x^s) \sin(q_x/2) + \frac{\delta^2}{2} \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \right]^2 \\
& \approx \sin^2(q_y/2) - \left\{ \omega/4 - \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \right\}^2 \\
& \quad + 2\delta \cos(k_x^s) \sin(q_x/2) \left\{ \omega/4 - \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \right\} \\
& \quad - \delta^2 \cos^2(k_x^s) \sin^2(q_x/2) - \delta^2 \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \left\{ \omega/4 - \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \right\}.
\end{aligned}$$

En vertu de la définition de  $k_x^s$  (équation A.1), nous avons

$$\omega/4 - \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) = \pm \sin(q_y/2).$$

L'argument du radical devient

$$\begin{aligned}
& \pm 2\delta \cos(k_x^s) \sin(q_x/2) \sin(q_y/2) \\
& - \delta^2 \left\{ \cos^2(k_x^s) \sin^2(q_x/2) \pm \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \sin(q_y/2) \right\}.
\end{aligned}$$

Les contributions autour des singularités  $k_x^s$  sont données par

$$\begin{aligned}
\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{1}{8\pi} \sum_{k_x^s} \int_{k_x \approx k_x^s} dk_x \frac{[f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0}}{\sqrt{a(k_x - k_x^s) + b(k_x - k_x^s)^2}} + \dots \\
\text{avec } a &\equiv \pm 2 \cos(k_x^s) \sin(q_x/2) \sin(q_y/2) \\
\text{et } b &\equiv - \left\{ \cos^2(k_x^s) \sin^2(q_x/2) \pm \sin(k_x^s) \sin(q_x/2) \sin(q_y/2) \right\}.
\end{aligned}$$

Le point  $k_x = k_x^s$  sera une singularité intégrable si  $a \neq 0$ , i.e. si  $\cos(k_x^s) \neq 0$ . Nous nous intéresserons plus loin aux cas particuliers  $\sin(q_x/2) = 0$  ou  $\sin(q_y/2) = 0$ . D'ici là, nous supposerons que nous avons  $\sin(q_x/2), \sin(q_y/2) \neq 0$ . Les signes doivent être choisis pour que le radical reste réel. Si nous prenons la limite  $k_x^s \rightarrow \frac{\pi^-}{2}$ ,  $a \rightarrow 0$  et  $b \rightarrow \mp \sin(q_x/2) \sin(q_y/2)$ . Il faut garder le signe  $+$  dans l'expression de  $b$  ce qui implique  $k_y^0 \rightarrow -\frac{\pi}{2}$ . Nous aurons

$$a(k_x - k_x^s) = -2\delta \cos\left(\frac{\pi^-}{2}\right) \sin(q_x/2) \sin(q_y/2) \geq 0 \Rightarrow \delta \leq 0$$

et donc  $\delta \in [-\Delta, 0]$ . L'intervalle pour  $k_x$  est choisi suffisamment petit pour que la différence de fonctions de Fermi-Dirac varie peu sous l'intégration. C'est ce critère qui va nous permettre d'estimer la coupure  $\Delta$ . L'intégrale que nous avons à effectuer est de la forme

$$\begin{aligned} \int_{-\Delta}^0 d\delta \frac{1}{\sqrt{a\delta + b\delta^2}} &= \int_0^{\Delta} d\delta \frac{1}{\sqrt{|a|\delta + b\delta^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{b}} \ln \left| \frac{2\sqrt{b}\sqrt{b\Delta^2 + |a|\Delta} + 2b\Delta + |a|}{a} \right| \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{b}} \ln \left| \frac{4b\Delta}{a} \right| = \frac{1}{\sqrt{b}} \ln \left| \frac{\Delta}{a} \right| + \dots \end{aligned}$$

où nous avons négligé  $|a|$  au numérateur de l'argument du logarithme. Les contributions singulières sont donc

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{k_x^s} \frac{\ln |a/\Delta|}{8\pi\sqrt{b}} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_x=k_x^s, k_y=k_y^0} + \dots \quad (\text{A.2})$$

Le développement autour de la singularité  $k_x^s$  impose la contrainte  $\Delta \ll 1$  sur la coupure. En général, la différence de fonctions de Fermi-Dirac dans l'expression A.2 varie peu si  $\Delta$  satisfait cette contrainte. Lorsque ce n'est pas le cas,  $\Delta$  pourra dépendre de la température. Nous reviendrons sur cette question plus loin.

Nous aurons des contributions singulières quand  $\cos(k_x^s) = 0$ , i.e. quand  $k_x^s = +\frac{\pi}{2}$  ou  $-\frac{\pi}{2}$  ce qui implique  $\sin(k_x^s) = +1$  ou  $-1$ . Le résultat A.2 montre bien que le choix des signes doit être fait de telle sorte que  $b > 0$ . Si par exemple  $k_x^s = +\frac{\pi}{2}$ , nous trouvons

$$[b]_{k_x^s=\frac{\pi}{2}} = \mp \sin(q_x/2) \sin(q_y/2).$$

Le signe  $+$  doit être choisi dans l'équation ci-haut, ce qui implique que  $k_y^0 = -\frac{\pi}{2}$ . La fréquence pour laquelle  $k_x^s$  prend la valeur de  $\frac{\pi}{2}$  est donc

$$\omega = 4 \sin(q_x/2) - \sin(q_y/2).$$

Si par contre  $k_x^s = -\frac{\pi}{2}$ , la fréquence singulière change de signe. Nous avons donc

$$\omega_s \equiv 4 |\sin(|q_x|/2) - \sin(|q_y|/2)|$$

avec  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega = \pm\omega_s) \rightarrow \pm\infty$ .

Nous allons regarder comment  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$  se comporte quand près de la fréquence  $\omega_s$ . Si  $\omega \rightarrow \omega_s^-$ , deux valeurs de  $k_x^s$  se rapprochent de  $\frac{\pi}{2}$ , une par la gauche et l'autre par la droite. Par contre, si  $\omega \rightarrow \omega_s^+$ , il n'y a pas de singularité  $k_x^s$  correspondant à  $k_y^0 = -\frac{\pi}{2}$ . Posons  $\omega = \omega_s - \delta\omega$  avec  $\delta\omega > 0$ . Nous avons alors

$$\sin(k_x^s) = 1 - \frac{\delta\omega}{4 \sin(q_x/2)} \Rightarrow \cos(k_x^s) \approx + \text{ ou } - \sqrt{\frac{\delta\omega}{2 \sin(q_x/2)}}$$

$$[\sin(k_y^0)]_{k_x=k_x^s} = -1, \quad [\cos(k_y^0)]_{k_x=k_x^s} = 0$$

$$\ln |a| = \frac{1}{2} \ln |\delta\omega| + \dots \quad b \approx \sin(q_x/2) \sin(q_y/2)$$

$$[\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0]_{k_x^s, k_y^0} \approx -2 \left[ \sqrt{\frac{\delta\omega}{2 \sin(q_x/2)}} \cos(q_x/2) + \frac{1}{4}(\omega_s - \delta\omega) \right] - \mu^0 \quad (\text{A.3})$$

Si  $\omega_s \neq 0$ ,  $\sqrt{\delta\omega}$  et  $\delta\omega$  sont négligeables devant  $\omega_s$  dans la limite  $\delta\omega \rightarrow 0$ . Nous pouvons néanmoins garder une correction en fréquence. Le terme d'ordre  $\sqrt{\delta\omega}$  est plus important que celui d'ordre  $\delta\omega$  dans la limite  $\delta\omega \rightarrow 0$ , mais il est du même signe dans  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$  et dans  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega$ . Il s'annule donc à l'ordre le plus bas dans le facteur  $f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)$ . Par contre, la correction linéaire en  $\delta\omega$  change de signe et survit dans la différence des distributions de Fermi-Dirac. À partir de l'équation A.2, nous avons

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \lesssim \omega_s) = -\ln \left| \frac{\omega_s - \omega}{\Delta^2} \right| \frac{[f(-\omega/2 - \mu^0) - f(\omega/2 - \mu^0)]}{16\pi \sqrt{\sin(q_x/2) \sin(q_y/2)}} + \dots$$

Nous avons retiré la somme sur  $k_x^s$  car un seul des quatre vecteurs  $(\pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{\pi}{2})$  est responsable de la singularité. Ce vecteur est déterminé par le signe de la fréquence singulière et ceux des composantes  $q_x$  et  $q_y$ .

À basse température et basse fréquence, les fonctions de Fermi-Dirac au numérateur de l'équation A.2 varient substantiellement même si la contrainte  $\Delta \ll 1$  est satisfaite. Nous allons montrer que la coupure est alors proportionnelle à  $\pi T$ . Posons  $k_x = \frac{\pi}{2} - \Delta$  et effectuons le développement pour  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$  en se plaçant à la fréquence  $\omega_s$  :

$$\sin(k_x) \approx 1 - \frac{1}{2}\Delta^2, \quad \cos(k_x) \approx \Delta,$$

$$\sin(k_y^0) \approx -1 + \frac{1}{2}\Delta^2 \frac{\sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)}, \quad \cos(k_y^0) \approx \pm \Delta \sqrt{\frac{\sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)}},$$

$$\begin{aligned} [\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0]_{k_x=\frac{\pi}{2}-\Delta, k_y=k_y^0} - [\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0]_{k_x=\frac{\pi}{2}, k_y=k_y^0} &\approx 2\Delta \left( \cos(q_x/2) - \cos(q_y/2) \sqrt{\frac{\sin(q_x/2)}{\sin(q_y/2)}} \right) \\ &\sim W\Delta \lesssim \pi T. \end{aligned}$$

Dans la limite  $\omega_s, \pi T \ll W$ , il faudra remplacer la contrainte  $\Delta \ll 1$  par  $\Delta \sim \pi T/W$ , la première n'étant plus suffisamment restrictive.

Nous allons maintenant approcher la fréquence  $\omega_s$  par la droite. Ici, le scénario est légèrement différent. Au lieu d'avoir une singularité intégrable qui devient de moins en moins intégrable au fur et à mesure qu'on se rapproche de  $\omega_s$ , nous avons une valeur non-singulière de  $k_x$  qui finit par devenir singulière quand  $\omega = \omega_s$ .

Au-dessus de la fréquence singulière ( $\omega > \omega_s$ ), il n'y a pas de singularité à intégrer. La valeur  $k_x = \frac{\pi}{2}$  est permise et non-singulière. Nous allons étudier l'équation 3.10 pour un petit intervalle d'intégration autour de cette valeur. Pour  $\omega = \omega_s + \delta\omega$  et  $k_x \approx \frac{\pi}{2}$ , l'argument du radical au dénominateur de l'équation 3.10 devient

$$\begin{aligned} &\sin^2(q_y/2) - \left\{ \frac{\omega_s + \delta\omega}{4} - \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( k_x - \frac{\pi}{2} \right)^2 \right] \sin(q_x/2) \right\}^2 \\ &\approx \frac{\delta\omega}{2} \sin(q_y/2) + \left( k_x - \frac{\pi}{2} \right)^2 \sin(q_x/2) \sin(q_y/2) \end{aligned}$$

Nous devons donc évaluer

$$\chi'''(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{8\pi} \int_{k_x \approx \frac{\pi}{2}} dk_x \frac{[f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0}}{\sqrt{\frac{\delta\omega}{2} \sin(q_y/2) + \left( k_x - \frac{\pi}{2} \right)^2 \sin(q_x/2) \sin(q_y/2)}} + \dots$$

Sachant que

$$[\sin(k_y^0)]_{k_x=\frac{\pi}{2}} = -1 + \frac{\delta\omega}{4 \sin(q_x/2)}, \quad [\cos(k_y^0)]_{k_x=\frac{\pi}{2}} \approx + \text{ ou } - \sqrt{\frac{\delta\omega}{2 \sin(q_x/2)}},$$

nous obtenons,

$$[\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0]_{\frac{\pi}{2}, k_y^0} \approx -2 \left[ \sqrt{\frac{\delta\omega}{2 \sin(q_x/2)}} \cos(q_y/2) + \frac{1}{4}(\omega_s + \delta\omega) \right] - \mu^0.$$

Et donc

$$\chi^{0m}(\mathbf{q}, \omega \gtrsim \omega_s) = -\ln \left| \frac{\omega_s - \omega}{\Delta^2} \right| \frac{[f(-\omega/2 - \mu^0) - f(\omega/2 - \mu^0)]}{16\pi \sqrt{\sin(q_x/2) \sin(q_y/2)}} + \dots$$

qui est identique au résultat  $\omega \lesssim \omega_s$ . Le comportement divergent est donc le même à gauche et à droite de la fréquence singulière. Cette constatation implique également que l'expression 3.12 reste justifiée quand  $\omega_s = 0$ .

Considérons le cas particulier  $q_x = 0, q_y \neq 0$ . Évaluons l'équation 3.10 à  $q_x = 0$  :

$$\begin{aligned} \chi^{0m}(q_x = 0, q_y; \omega) &= \frac{1}{8\pi \sqrt{\sin^2(q_y/2) - (\omega/4)^2}} \\ &\times \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0} \end{aligned}$$

Ce cas a de particulier que  $\omega_s = \omega_c$ . Le cas  $\omega > \omega_s$  est donc nul. Posons  $\omega = \omega_s - \delta\omega = 4 \sin(q_y/2) - \delta\omega$  avec  $\delta\omega > 0$ . Nous trouvons

$$\chi^{0m}(q_x = 0, q_y; \omega \lesssim \omega_s) = \frac{|\frac{1}{2}(\omega_s - \omega)|^{-1/2}}{8\pi \sqrt{\sin(q_y/2)}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \sum_{k_y^0} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_y=k_y^0}.$$

La divergence est maintenant de type  $|(\omega_s - \omega)|^{-1/2}$ .

## Annexe B

# Analyse des comportements singuliers de $\chi^{0''}$ en présence d'un saut au second voisin

Nous allons maintenant regarder en détails les singularités qui apparaissent dans  $\chi^{0''}$  en présence d'un saut au second voisin. L'expression 3.18 contient des singularités intégrables et des singularités non-intégrables. Nous cherchons les valeurs de  $k_x = k_x^s$  telles que  $[a^2 + b^2 - c^2]_{k_x^s} = 0$ . Écrivons le dénominateur de la façon suivante :

$$\alpha_1 \sin^2(k_x^s) + \alpha_2 \sin(k_x^s) + \alpha_3 \cos(k_x^s) + \alpha_4 = 0$$

avec

$$\alpha_1 \equiv 64t'^2(\sin^2(q_x/2) - \sin^2(q_y/2)) - 16\sin^2(q_x/2)$$

$$\alpha_2 \equiv 8\omega \sin(q_x/2)$$

$$\alpha_3 \equiv 64t' \cos(q_x/2) \sin^2(q_y/2)$$

$$\alpha_4 \equiv 16\sin^2(q_y/2)(1 + 4t'^2 \cos^2(q_x/2)) - \omega^2.$$

Cette expression se ramène à un polynôme du quatrième degré en  $\sin(k_x^s)$ . La solution pour  $k_x^s$  peut donc être obtenue analytiquement en se souvenant cependant de l'existence de solutions superflues. Il s'agit de résoudre

$$\sin^4(k_x^s) + \frac{2\alpha_2}{\alpha_1} \sin^3(k_x^s) + \frac{\alpha_2^2 + 2\alpha_1\alpha_4 + \alpha_3^2}{\alpha_1^2} \sin^2(k_x^s) + \frac{2\alpha_2\alpha_4}{\alpha_1^2} \sin(k_x^s) + \frac{\alpha_4^2 - \alpha_3^2}{\alpha_1^2} = 0.$$

Nous sommes intéressés à identifier les singularités qui ne sont pas intégrables. Pour les analyser, développons l'argument de l'intégrale dans l'équation 3.18 autour d'une singularité  $k_x^s : a^2 + b^2 - c^2 \approx \gamma_1(k_x - k_x^s) + \gamma_2(k_x - k_x^s)^2$ . Nous trouvons (équation A.2) :

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{k_x^s, k_y^0} \frac{\ln |\gamma_1 / \Delta|}{8\pi \sqrt{\gamma_2}} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_x=k_x^s, k_y=k_y^0} + \dots$$

avec

$$\begin{aligned} \gamma_1 &\equiv 2\alpha_1 \sin(k_x^s) \cos(k_x^s) + \alpha_2 \cos(k_x^s) - \alpha_3 \sin(k_x^s) \\ \text{et } \gamma_2 &\equiv \alpha_1 \cos^2(k_x^s) - 2\alpha_1 \sin^2(k_x^s) - \alpha_2 \sin(k_x^s) - \alpha_3 \cos(k_x^s). \end{aligned}$$

Plaçons-nous au voisinage d'une fréquence singulière i.e. d'une fréquence qui annule le coefficient  $\gamma_1$  pour une des valeurs de  $k_x^s$ . En posant  $\omega = \omega_s + \delta\omega$ , nous obtenons

$$\gamma_1 = 8\delta\omega \cos(k_x^s) \sin(q_x/2) \Rightarrow \ln |\gamma_1| = \ln |\delta\omega| + \dots$$

La divergence dans  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$  est donc de la forme  $\ln |\omega - \omega_s|$ .

# Annexe C

## Fonction $\operatorname{dilog}(x)$

La fonction dilogarithme est définie par l'intégrale suivante[1] :

$$\operatorname{dilog}(x) = - \int_1^x \frac{\ln t}{t-1} dt.$$

Certaines valeurs de la fonction  $\operatorname{dilog}(x)$  sont particulièrement utiles :

$$\operatorname{dilog}(0) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \operatorname{dilog}(1/2) = \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2} \ln^2 2, \quad \operatorname{dilog}(1) = 0.$$

Cette fonction obéit à la relation

$$\operatorname{dilog}(x) + \operatorname{dilog}(1/x) = -\frac{1}{2} \ln^2 x \quad \text{pour } 0 \leq x \leq 1.$$

Cette relation nous permet de déduire le comportement asymptotique de la fonction  $\operatorname{dilog}(x)$  :

$$\lim_{x \rightarrow 0} \operatorname{dilog}(1/x) = -\operatorname{dilog}(0) - \frac{1}{2} \ln^2 x = -\frac{\pi^2}{6} - \frac{1}{2} \ln^2 x$$

$$\Rightarrow \lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{dilog}(x) = -\frac{\pi^2}{6} - \frac{1}{2} \ln^2 x.$$



# Annexe D

## Méthodes de calcul numérique

La plupart des quantités physiques que nous avons étudiées dans cet ouvrage doivent être calculées numériquement. Nous allons maintenant présenter les méthodes numériques que nous avons employées tout au long de ce travail. Les algorithmes que nous mentionnerons sont expliqués dans la référence [63].

### D.1 Quantités statiques

Les quantités thermodynamiques sont faciles à calculer numériquement car il est possible de les obtenir en utilisant le formalisme de Matsubara sans pour autant avoir à faire un prolongement analytique à la toute fin du calcul. Dans ce formalisme, les fonctions de susceptibilité ne sont pas singulières.

Pour calculer les vertex effectifs  $U_{sp,ch}$  et la double occupation moyenne  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$ , nous avons besoin de la susceptibilité des électrons libres en fréquence imaginaire  $\chi^0(\mathbf{q}, iq_n)$ . Le calcul de celle-ci ne pose pas de difficulté. Il doit cependant être efficace pour que le temps de calcul soit raisonnable. Nous avons divisé le premier quadrant de la zone de Brillouin en 240 par 240 valeurs de vecteurs d'onde. Ces vecteurs d'onde sont répartis uniformément. Pour chacun d'entre eux,  $\chi^0$  est calculé pour les 120 premières fréquences positives. L'intégrale double menant au résultat pour  $\chi^0$  est effectuée à l'aide d'un algorithme Runge-Kutta à pas d'intégration variable.

Une fois les valeurs de  $\chi^0$  emmagasinées dans un tableau, il est possible de calculer  $U_{sp,ch}$  et  $\langle n_{\uparrow}n_{\downarrow} \rangle$  avec les équations 5.6. L'intégrale double sur  $\chi_{sp,ch}$  est effectuée avec une règle de Simpson. Le problème se ramène ensuite au calcul des racines d'une fonction. Pour ce faire, nous avons utilisé l'algorithme de Van Wijngaarden-Dekker-

Brent.

## D.2 Susceptibilité en fréquence réelle

Le calcul de la susceptibilité  $\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega)$  est un problème plus difficile car il implique l'intégration de singularités. Il s'agit d'évaluer numériquement l'expression 3.10. Nous avons une seule intégrale sur  $k_x$  à effectuer. Les singularités intégrables sont éliminées en utilisant des changements de variable de la forme  $x^2 = |k_x^s - k_x|$ . L'intégrale sur  $x$  est ensuite évaluée avec une routine Runge-Kutta à pas d'intégration variable.

Pour chaque vecteur d'onde de la zone de Brillouin, nous avons choisi les valeurs de fréquence dans le but de cerner le mieux possible les singularités logarithmiques. Nous avons utilisé le changement de variable  $\omega = \omega_s \pm t^2$ . Cent vingt valeurs de  $t$  ont été réparties uniformément sur les intervalles  $t \in [0, \sqrt{\omega_c - \omega_s}]$  et  $t \in [0, \sqrt{\omega_s}]$ . Le nombre de fréquences pour chacun des deux intervalles a été distribué en proportion de la taille de ces derniers. Les valeurs de  $\chi^{0''}$  sont emmagasinées dans un tableau. La seule interpolation qui est faite pour se référer à cette fonction est selon l'axe des fréquences. Une interpolation linéaire a été utilisée.

Pour obtenir la partie réelle  $\chi^{0'}$ , la transformation de Kramers-Kronig est effectuée avec un algorithme Runge-Kutta à pas d'intégration variable.

## D.3 Self-énergie

Le calcul de la self-énergie est délicat car il nécessite une répartition des vecteurs d'onde de la zone de Brillouin selon une méthode assez particulière. La répartition le long de l'axe des  $x$  est constituée de trois blocs uniformes. Les intervalles  $[0, \pi/10]$  et  $[9\pi/10, \pi]$  contiennent chacun 48 points alors que l'intervalle  $[\pi/10, 9\pi/10]$  en contient 144 pour un total de 240 points. Il est nécessaire de raffiner les extrémités de l'intervalle  $[0, \pi]$  pour bien intégrer les vecteurs autour de  $\mathbf{q} \approx 0$  et  $\mathbf{q} \approx (\pi, \pi)$ . La répartition en  $y$  est faite sur l'intervalle  $[0, q_x]$  avec le changement de variable  $q_y = q_x - y^2$ . La répartition de la variable  $y$  est uniforme sur l'intervalle  $y \in [0, \sqrt{q_x}]$ . Elle contient 240 points dans le calcul. Avec cette répartition des vecteurs d'onde, les singularités de basse fréquence sont correctement intégrées (vecteurs diagonaux). La figure D.1 montre les points de la zone de Brillouin pour une répartition de 60 par 60.

Les parties imaginaire et réelle de la self-énergie sont calculées avec une règle de

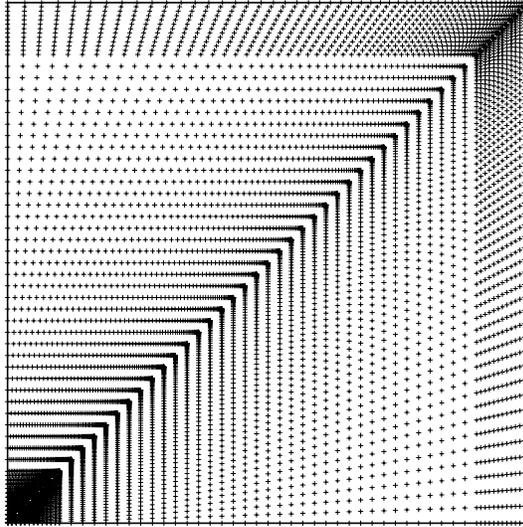


FIG. D.1: Répartition des vecteurs d'onde  $q$  dans la zone de Brillouin pour le calcul de la self-énergie.

Simpson.



## Annexe E

# Comportement en fréquence de $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$ : cas $T = 0$

Nous allons maintenant étudier le comportement en fréquence de  $\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega)$  à température nulle. Ce cas doit être traité séparément car la susceptibilité des électrons libres change qualitativement de forme dans cette limite. L'analyse à température finie présentée au chapitre 4 repose en partie sur le fait que la fréquence est plus petite que l'échelle d'énergie thermique ( $|\omega| \lesssim \pi T$ ). Cette hypothèse n'a plus de sens à  $T = 0$ . La fréquence ne peut être petite que comparée à la largeur de bande ou à l'énergie de Fermi.

À température nulle, l'expression 4.5 pour la partie imaginaire de la self-énergie devient

$$\Sigma''(\mathbf{k}, \omega) = \frac{U^2}{8\pi^2} \int d^2q \int_{-\omega}^0 d\omega' \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega') \delta(\omega + \omega' - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0).$$

Nous pouvons utiliser  $\xi_{\mathbf{k}_F^0+\mathbf{q}}^0 \approx 2 \sin(k_y - q_x) \delta q_y \equiv v \delta q_y$  pour intégrer le delta de Dirac sur la composante  $q_y$  si  $\sin(k_y - q_x) \neq 0$ . Nous trouvons

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int \frac{dq_x}{v} \int_{-\omega}^0 d\omega' \chi^{0''}(q_x; -q_x + \frac{\omega + \omega'}{v}; \omega').$$

Si  $q_x$  est tel que  $\sin(k_y - q_x) = 0$ , l'approximation pour la relation de dispersion n'est plus justifiée et nous devons la remplacer par  $\xi_{\mathbf{k}_F^0+\mathbf{q}}^0 \approx \cos(k_y - q_x) (\delta q_y)^2 \equiv v' (\delta q_y)^2$ . Nous aurons alors

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) \sim U^2 \int_{v \approx 0} \frac{dq_x}{v'} \int_{-\omega}^0 d\omega' \chi^{0''}(q_x; -q_x \pm \sqrt{\frac{\omega + \omega'}{v'}}; \omega').$$

Dans la limite  $\omega \rightarrow 0$ , les vecteurs d'onde  $\mathbf{q}$  qui interviennent dans l'intégrale sont tous diagonaux. Nous allons donc remplacer  $\chi^{0''}$  par l'expression appropriée. Nous savons déjà que

$$\chi^{0''}(\pi; \pi; \omega \rightarrow 0^+) \stackrel{T=0}{\sim} -\ln |\omega|.$$

Pour les autres vecteurs diagonaux, la divergence logarithmique est coupée à fréquence finie. Pour le voir, il faut revenir à l'expression A.2

$$\chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{k_x^s} \frac{\ln |a/\Delta|}{8\pi\sqrt{b}} [f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0) - f(\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0 + \omega)]_{k_x=k_x^s, k_y=k_y^0} + \dots$$

$$\text{avec } [\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0]_{k_x, k_y} \approx -2 \left[ \sqrt{\frac{\omega}{2 \sin(q_x/2)}} \cos(q_x/2) + \frac{1}{4}\omega \right]$$

dérivée dans l'annexe A (équation A.3). Quand  $T = 0$ , c'est la grandeur relative de la correction en  $\sqrt{\omega}$  et de celle en  $\omega$  dans l'expression pour  $\xi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}^0$  qui détermine si la différence de fonctions de Fermi-Dirac est nulle ou égale à un. La divergence logarithmique est coupée de la manière suivante :

$$\lim_{T \rightarrow 0} \chi^{0''}(\mathbf{q}, \omega \rightarrow 0) \stackrel{\omega_s=0}{\sim} -\ln |\omega| \theta [|\omega| \sin(q_x/2) - 8 \cos^2(q_x/2)] + \dots$$

La susceptibilité  $\chi^{0''}$  ne coupe pas brusquement. Seule la contribution divergente est affectée par la fonction  $\theta$ . Comme c'est cette contribution qui nous intéresse pour le calcul de  $\Sigma''$ , nous utiliserons cette dernière expression. Quand  $q_x = \pi$ , nous retrouvons le résultat connu.

L'expression de la partie imaginaire de la self-énergie devient

$$\begin{aligned} \Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) &\sim U^2 \int \frac{dq_x}{v} \int_{-\omega}^0 d\omega' \ln |\omega'| \theta [|\omega'| \sin(q_x/2) - 8 \cos^2(q_x/2)] \\ &\sim U^2 \int \frac{dx}{\sin(k_y - x)} \int_{-\omega}^0 d\omega' \ln |\omega'| \theta [|\omega'| \cos(x/2) - 8 \sin^2(x/2)] \end{aligned}$$

où nous avons fait le changement de variable  $x = \pi - q_x$ . Dans la limite  $\omega \rightarrow 0$ , l'intervalle d'intégration sur  $\omega'$  est limité aux petites valeurs de la fréquence ce qui restreint également l'intervalle d'intégration sur  $x$  de sorte que nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}
\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega) &\sim U^2 \int_0^{\Delta x} \frac{dx}{\sin(k_y - x)} \int_{-\omega}^0 d\omega' \ln |\omega'| \theta [|\omega'| - 2x^2] \\
&= U^2 \int_0^{\sqrt{|\omega|/2}} \frac{dx}{\sin(k_y - x)} \int_{2x^2}^{\omega} d\omega' \ln \omega'.
\end{aligned}$$

Pour les petites valeurs de  $x$ , nous avons  $\sin(k_y - x) \approx \sin(k_y) - x \cos(k_y)$ . Si  $\sin(k_y) \neq 0$ , nous négligeons la dépendance en  $x$  pour obtenir après intégration :

$$\Sigma''(\mathbf{k}_F^0, \omega \rightarrow 0) \stackrel{T=0}{\sim} |\omega|^{3/2} \ln |\omega| + \dots$$

Lorsque  $\sin(k_y) = 0$ , il faut utiliser l'approximation au second ordre en  $\delta q_y$  pour la relation de dispersion  $\xi_{\mathbf{k}_F^0 + \mathbf{q}}^0$ . Le résultat final reste cependant inchangé.

Ce résultat n'ayant pas fait l'objet de vérifications numériques, la prudence sera de mise quant à son utilisation.



# Bibliographie

- [1] M. Abramowitz et I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, NBS US. Gov. Printinf-Off, Washington D.C. (1964).
- [2] P.W. Anderson, *Mater. Res. Bull.* 8, 153 (1973).
- [3] P.W. Anderson, *Science* 235, 1196 (1987).
- [4] J. Bardeen, L.N. Cooper et J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* 108, 1175 (1957).
- [5] B. Batlogg, H.Y. Hwang, H. Takagi, R.J. Cava, H.L. Kao et J. Kwo, *Physica C* 130, 235 (1994).
- [6] B. Batlogg et C.M. Varma, *Physics World* 13, 2 (2000).
- [7] G. Baym et L.P. Kadanoff, *Phys. Rev.* 124, 287 (1961).
- [8] G. Baym, *Phys. Rev.* 127, 1391 (1962).
- [9] K.S.D. Beach, R.J. Gooding et F. Marsiglio, *Phys. Rev. B* 61, 5147 (2000).
- [10] J.G. Bednorz et K.A. Müller, *Z. Phys. B* 64, 189 (1986).
- [11] P. Bénard, L. Chen et A.-M.S. Tremblay, *Phys. Rev. B* 47, 15217 (1993).
- [12] P. Bénard, *Fluctuations magnétiques des gaz d'électrons bidimensionnels : application au composé supraconducteur  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$* , thèse de doctorat, Université de Sherbrooke (1993).
- [13] H. Bethe, *Z. Phys.* 71, 205 (1931).
- [14] N.E. Bickers et D.J. Scalapino, *Ann. Phys.* 193, 206 (1989).
- [15] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino et R.L. Sugar, *Phys. Rev. D* 24, 2278 (1981).
- [16] R.J. Cava, R.B. Van Dover, B. Battlog, E.A. Rietman, *Phys. Rev. Lett.* 58, 408 (1987).
- [17] J.-H. Choy, S.-J. Kwon et G.-S. Park, *Science* 280, 1589 (1998).
- [18] L.N. Cooper, *Phys. Rev.* 104, 1189 (1956).

- [19] S.I. Cooper et K.E. Gray, Éd. D.M. Ginzburg, *Physical properties of high temperature superconductors IV*, chap. 3, World scientific, Singapore (1994).
- [20] A.-M. Daré, Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B 53, 14236 (1996).
- [21] A.-M. Daré et G. Albinet, Phys. Rev. B 61, 4567 (2000).
- [22] J.J. Deisz, D.W. Hess et J.W. Serene, Phys. Rev. Lett. 76, 1312 (1996).
- [23] V.J. Emery et S.A. Kivelson, Nature 374, 434 (1995).
- [24] P. Fazekas, *Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific, Singapore (1999).
- [25] J.P. Franck, Phys. Rev. B 44, 5318 (1991).
- [26] H. Frölich, Phys. Rev. 79, 845 (1950).
- [27] J. Galan, J.A. Vergés et A. Martin-Rodero, Phys. Rev. B 48, 13654 (1993).
- [28] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth et M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996).
- [29] A. Georges et W. Krauth, Phys. Rev. B 48, 7167 (1993).
- [30] L. Ginzburg et L. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20, 1064 (1950).
- [31] L.P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP 36, 1364 (1959).
- [32] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963).
- [33] J.M. Harris et al., Phys. Rev. Lett. 79, 143 (1997).
- [34] J.E. Hirsh, Phys. Rev. B 31, 4403 (1985).
- [35] C. Hodges, H. Smith et J.W. Wilkins, Phys. Rev. B 4, 302 (1971).
- [36] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London, A 276, 238 (1963).
- [37] L.B. Ioffe et A.J. Millis, J. Phys. Chem. Solids 56, 1611 (1995).
- [38] J. Kanamori, J. Prog. Theor. Phys., 30, 275 (1963).
- [39] V.Z. Kresin et S.A. Wolf, Phys. Rev. B 49, 3652 (1994).
- [40] L.D. Landau, Sov. Phys. JETP 3, 920 (1956).
- [41] P.A. Lee et N. Read, Phys. Rev. Lett. 58, 2691 (1987).
- [42] S. Lefebvre, P. Wzietek, S. Brown, C. Bourbonnais, D. Jérôme, C. Mézière, M. Fourmigué et P. Batail, cond-mat/0004455.
- [43] E.H. Lieb et F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. 20, 1445 (1968).

- [44] A.G. Loeser, Z.-X. Shen, D.S. Dessau, D.S. Marshall, C.H. Park, P. Fournier et A. Kapitulnik, *Science* 273, 325 (1996).
- [45] H. et F. London, *Proc. Roy. Soc. London, A* 141, 71 (1935).
- [46] J.W. Loram, K.A. Mirza, J.R. Cooper, W.Y. Liang et J.M. Wade, *J. Superconductivity* 7, 243 (1994).
- [47] J.W. Loram, K.A. Mirza, J.R. Cooper et J.L. Tallon, *Physica C* 1405, 282 (1997).
- [48] J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* 119, 1153 (1960).
- [49] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New-York et Londres (1990).
- [50] M.B. Maple, *MRS Bulletin XV* 6, 60 (1990).
- [51] E. Maxwell, *Phys. Rev.* 78, 477 (1950).
- [52] D.B. McWhan, J.P. Remeika, T.M. Rice, W.F. Brinkman, J.P. Maita et A. Menth, *Phys. Rev. Lett.* 27, 941 (1971).
- [53] W. Meissner et R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaft* 21, 787 (1933).
- [54] N.D. Mermin et H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* 17, 1133 (1966).
- [55] P. Monthoux et D. Pines, *Phys. Rev. B* 47, 6069 (1993).
- [56] P. Monthoux, A. Balatsky et D. Pines, *Phys. Rev. Lett.* 67, 3448 (1993), *Phys. Rev. B* 46, 14803 (1992).
- [57] A. Montorsi, *The Hubbard Model*, World Scientific, Singapore (1992).
- [58] S. Moukouri, S. Allen, F. Lemay, B. Kyung, D. Poulin, Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay, *Phys. Rev. B* 61, 7887 (2000).
- [59] H.K. Onnes, *Leiden Commun.* 120b 122b 124c (1911).
- [60] D.R. Penn, *Phys. Rev.* 142, 350 (1966).
- [61] I.I. Pomerantchuk, *Zhur. Eksp. i. Theoret. Fiz.* 20, 919 (1950).
- [62] C.P. Poole Jr, H.A. Farach et R.J. Creswick, *Superconductivity*, Academic Press, San Diego (1995).
- [63] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling et B.P. Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge (1986).
- [64] M.J. Rozenberg, G. Kotliar et X.Y. Zhang, *Phys. Rev. B* 49, 10181 (1994).
- [65] S. Sachdev, *Physics World*, 33, avril (1999).

- [66] J. Schlipf, M. Jarrell, P.G.J. van Dongen, N. Blümer, S. Kehrein, Th. Pruschke et D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* 82, 4890 (1999)
- [67] T. Schneider et H. Keller, *Phys. Rev. Lett.* 69, 3374 (1993).
- [68] H.J. Schulz, *Phys. Rev. Lett.* 64, 1445 (1990).
- [69] M.H. Sharifzadeh Amin, *Vertices and vortices in high  $T_c$  superconductors*, thèse de doctorat, University of British Columbia (1999).
- [70] B.S. Shastry, *Phys. Rev. Lett.* 56, 2453 (1986).
- [71] K.S. Singwi et M.P. Tosi, *Solid State Physics*, H. Ehrenreich, F. Seitz et D. Turnbull, Academic, New York (1981) p. 177.
- [72] T. Timusk et B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* 62, 61 (1999).
- [73] A.-M.S. Tremblay, notes du cours *Problème à N-Corps* (1997).
- [74] S.B. Trickey, W.P. Kirk et E.D. Adams, *Rev. Mod. Phys.* 44, 668 (1972).
- [75] C.M. Varma, P.B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams et A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* 63, 1996 (1989).
- [76] M. Vekić et S.R. White, *Phys. Rev. B* 47, 1160 (1993).
- [77] H.J. Vidberg et J.W. Serene, *J. Low Temp. Phys.* 29, 179 (1977).
- [78] Y.M. Vilk, L. Chen et A.-M.S. Tremblay, *Phys. Rev. B* 49, 13267 (1994).
- [79] Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay, *Europhys. Lett.* 33, 159 (1996).
- [80] Y.M. Vilk et A.-M.S. Tremblay, *J. Phys. I France* 7, 1309 (1997).
- [81] A. Virosztek et J. Ruvalds, *Phys. Rev. B* 42, 4064 (1990).
- [82] D.J. Van Harlingen, *Rev. Mod. Phys.* 67, 515 (1995).
- [83] S.R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, E.Y. Loh Jr, J.E. Gubernatis et R.T. Scalettar, *Phys. Rev. B* 40, 506 (1989).