

THESE
PRESENTEE PAR

ROBIN, Jean-Marc

POUR OBTENIR LE TITRE DE DOCTEUR
DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1
(ARRETES MINISTERIELS DU 5 JUILLET 1994 ET
DU 30 MARS 1992)

(SPECIALITE PHYSIQUE)

SUPRACONDUCTIVITE DANS UN MELANGE
DE FERMIONS ET DE BOSONS

DATE DE SOUTENANCE: 5 JUILLET 1995

COMPOSITION DU JURY:

Président du jury : P. Nozières
Directeur de thèse : J. Ranninger
Rapporteur : D. Baeriswyl
Rapporteur : C. Lhuillier
Examineur : P. Schuck

THESE PREPAREE AU SEIN DU CENTRE DE RECHERCHE SUR LES TRES BASSES TEM-
PERATURES, CNRS, GRENOBLE

Avant-propos et remerciements

Cette thèse s'est déroulée au Centre de Recherche sur les Très Basses Températures à Grenoble sous la direction de Julius Ranninger. Elle a commencé en septembre 1991 et s'est interrompue pendant une année, de septembre 1993 à septembre 1994.

Je remercie le CRTBT et son directeur Pierre Monceau pour m'avoir accueilli pendant la durée de cette thèse et pour les moyens numériques importants qu'ils ont investi pendant toute la durée de mon travail et sans qui cette thèse n'aurait pu avoir lieu. Je voudrais remercier également l'ensemble des personnes du CRTBT pour leur accueil très chaleureux.

Je voudrais apporter mes sincères remerciements à Julius Ranninger qui a tout d'abord bien voulu m'accepter pour faire une thèse avec lui sur un sujet audacieux et qui par la suite m'a témoigné une grande confiance et avec qui j'espère garder de très bons rapports après cette thèse.

Je remercie Benoît Douçot pour nos nombreuses discussions et son extrême gentillesse pendant ces longues années. Je remercie Nils Schopohl, Dietrich Foerster et Konrad Matho pour les nombreuses discussions que nous avons eu et pour l'intérêt qu'ils ont porté sur mon travail. Je remercie Jean-Christian Anglès Dauriac et Daniel Gueniche pour leurs nombreux éclaircissements en informatique. Je remercie Matthias Eschrig pour m'avoir initié aux continuations analytiques et pour m'avoir beaucoup aidé par la suite. Je remercie Marie-Noëlle Geoffray pour avoir lu cette thèse et apporté de nombreuses corrections sous bien des points.

Je voudrais remercier la fondation ISI pour m'avoir accueilli à Turin en Septembre 1994, ainsi que l'université de Bochum (Allemagne) et l'université de Bordeaux qui m'ont invité durant ma thèse et qui m'ont permis d'avoir de nombreux rapports et d'intéressantes discussions avec la communauté scientifique.

Finalement, je voudrais remercier Philippe Nozières d'avoir bien voulu être le président du Jury de cette thèse, Claire Lhuillier et D. Baeriswyl d'avoir accepté d'être les rapporteurs et P. Schuck d'en être l'examineur.

Table des matières

1	Introduction Générale	9
2	Espace de Phase du Modèle Boson-Fermion	19
2.1	Introduction	19
2.2	Le mélange Boson-Fermion	20
2.2.1	Grandeurs thermodynamiques	20
2.2.2	Condensation de Bose	21
2.2.3	Développement basse température	23
2.3	Equations de Boltzmann	26
2.4	Self-énergie des fermions	32
2.5	Self-énergie des bosons	35
2.6	Comparaison avec le couplage électron-phonon	37
2.7	Conclusion	39
3	La Phase Superfluide	41
3.1	Introduction	41
3.2	Instabilité supra	42
3.2.1	Self-énergie des fermions	42
3.2.2	Self-énergie des bosons	46
3.2.3	Fonction de Green à deux particules : critère de Thouless	47
3.3	La théorie du champ-moyen	50
3.4	Excitations collectives dans l'état supra	55
3.5	Action effective	59
3.6	L'approche de Friedberg et Lee	70
3.7	Conclusion	75
4	La Phase Normale	77
4.1	Introduction	77
4.1.1	Equations couplées	77
4.1.2	Calcul sur réseau	78
4.1.3	Somme sur les fréquences de Matsubara	78
4.1.4	Potentiel chimique	79
4.1.5	Continuations analytiques	79
4.1.6	Organisation des calculs	80
4.1.7	Autres calculs numériques	81

4.2	Etude de la transition	82
4.3	Spectre des fermions	87
4.3.1	Etude de la surface de Fermi	87
4.3.2	Etude des pôles de la fonction de Green	88
4.3.3	Nombre d'occupation	91
4.4	Fonctions spectrales pour les fermions	95
4.5	Spectre des bosons	100
4.6	Conductivité	106
4.7	Conclusion	107
5	Bosons de Coeurs Durs	109
5.1	Introduction	109
5.2	Théorie du champ-moyen pour la phase supra	112
5.3	Longueur de pénétration	115
5.4	Excitation dans l'état normal	117
5.5	Conclusion	118
6	Conclusion Générale	119
A	Fonctions de Green	123
A.1	Fonctions de Green pour les bosons	123
A.1.1	Fonction spectrale	124
A.1.2	Fonction de Green ordonnée	124
A.1.3	Fonction de Green en température	125
A.2	Fonctions de Green pour les fermions	125
A.3	Règles de somme	126
A.4	Fonctions de Green et seconde quantification	127
A.5	Forme opérationnelle pour les fonctions de Green	128
B	Théorie des Perturbations	129
B.1	Le développement de Feynman-Dyson	129
B.2	Self-énergie des fermions	130
B.3	Self-énergie des bosons	132
B.4	Potentiel thermodynamique	134
B.4.1	Développement perturbatif	135
B.4.2	Variation du couplage	140
C	Calculs Numériques	143
C.1	Représentation spectrale	143
C.1.1	Somme sur les vecteurs \vec{k} et \vec{q} du réseau	144
C.1.2	Somme sur l'énergie ω	145
C.2	Représentation en Matsubara	148
C.2.1	Représentation	149
C.2.2	Calcul des sommes	152

D	Formule de Kubo pour la Conductivité	157
D.1	Courant électrique	157
D.2	Théorie de la réponse linéaire	158
D.3	Formule de Kubo pour la conductivité	159
D.4	Calcul à l'ordre zéro	160
E	Noyau e.m pour un Réseau Discret	163
E.1	Courant paramagnétique et diamagnétique	163
E.2	Expression du noyau $K_{\alpha\beta}$	164
E.3	Phase normale	165
E.4	Phase supra	167
F	Potentiel Effectif	169
G	Intégrales Fonctionnelles	173

Chapitre 1

Introduction Générale

L'interaction électron-phonon est un sujet important en physique du solide. Elle est responsable de la supraconductivité dans de nombreux métaux et affecte les propriétés de transport de tous les métaux. La nature de cette interaction dépend fortement de la nature du cristal que l'on considère. Dans les cristaux covalents ou polaires tels que les semi-conducteurs, l'interaction est due à la déformation élastique locale du cristal et ce sont les phonons acoustiques qui se couplent aux électrons de conduction. Dans les cristaux ioniques, ce sont les phonons optiques qui interagissent avec les électrons via la polarisation diélectrique du réseau.

Le hamiltonien qui décrit un système d'électrons et de phonons en interaction, s'écrit de façon générale sous la forme d'un hamiltonien de Fröhlich

$$H = H_0 + H_c + H_{e-p} \quad (1.1)$$

avec

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{q\lambda} \hbar\omega_{q\lambda} \quad (1.2)$$

$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} V_q^c c_{k+q\sigma}^+ c_{k'-q\sigma'}^+ c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \quad (1.3)$$

$$H_{e-p} = \sum_{k,\sigma,q,\lambda} M_\lambda(q) c_{k+q\sigma}^+ c_{k\sigma} a_{q\lambda} + hc \quad (1.4)$$

La nature de l'interaction est contenue dans les termes $M_\lambda(q)$ et ne dépend pas du moment de l'électron [20]. Le terme H_c décrit l'interaction coulombienne entre les électrons. Le hamiltonien de Fröhlich décrit l'émission et l'absorption de phonons par les électrons qui se déplacent dans une bande d'énergie. Un électron de moment k sans phonons excités, ne peut pas être un état propre du système. L'électron est accompagné par un nuage de phonons virtuels qui forment alors un polaron.

Au second ordre, l'interaction électron-phonon génère une interaction entre les électrons via l'échange d'un phonon. Dans la théorie BCS de la supraconductivité (1956), cette interaction est responsable de l'instabilité de la mer de Fermi par rapport à la formation de paires de Cooper [17]. Lorsque le nombre de phonons dans un polaron est faible, on peut éliminer le

terme H_{e-p} par une transformation canonique.

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S} \quad (1.5)$$

avec

$$S = \sum_{k,\sigma,q,\lambda} \frac{M_\lambda(q)}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k - \hbar\omega_{q\lambda}} c_{k+q\sigma}^+ c_{k\sigma} a_{q\lambda} + \sum_{k,\sigma,q,\lambda} \frac{M_\lambda^*(q)}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k + \hbar\omega_{q\lambda}} c_{k-q\sigma}^+ c_{k\sigma} a_{q\lambda}^+ \quad (1.6)$$

L'interaction effective entre les électrons est alors

$$H_{eff} = \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma',\lambda} \frac{|M_\lambda(q)|^2 \hbar\omega_{q\lambda}}{(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2 - \hbar^2\omega_{q\lambda}^2} c_{k+q\sigma}^+ c_{k'-q\sigma'}^+ c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \quad (1.7)$$

On définit l'énergie de liaison polaronique par

$$E_P = \sum_{q,\lambda} \frac{|M_\lambda(q)|^2}{\hbar\omega_{q\lambda}} \quad (1.8)$$

Dans l'approximation de BCS, on prend le potentiel entre deux électrons de moment \mathbf{k} et \mathbf{k}'

$$\begin{aligned} V_{BCS} &= -2E_P \quad \text{si } |\epsilon_{k'} - \epsilon_k| < \hbar\omega_D \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned} \quad (1.9)$$

où ω_D est la fréquence de Debye qui est une énergie caractéristique des phonons de grandes longueurs d'onde, avec un spectre linéaire $\omega_{q\lambda} = c_\lambda q$. Dans ces conditions, la théorie BCS est capable de fournir le gap supra Δ_{BCS} pour les excitations à une particule

$$\Delta_{BCS} = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (1.10)$$

avec $\lambda = 2E_P \mathcal{N}(0)$, $\mathcal{N}(0)$ étant la densité d'états électroniques à la surface de Fermi. De plus, la théorie fournit le rapport universel du gap supra à température nulle et de la température critique:

$$\frac{2\Delta_{BCS}}{k_B T_C} = 3.52 \quad (1.11)$$

La constante λ , sans dimension, est une grandeur caractéristique du couplage électron-phonon pour la supra. Pour des valeurs de λ à peu près inférieure à 1, la théorie BCS est en parfait accord avec les mesures expérimentales. Pour des valeurs plus grandes, la théorie reste valable qualitativement. Dans ce cas, on peut essayer de prendre en compte la nature retardée de l'interaction, toujours en restant dans la limite adiabatique. On obtient alors un formalisme très lourd (les équations d'Eliashberg) qui nécessite des solutions numériques [34]. L'un des résultats le plus accessible de cette théorie du couplage fort est la formule empirique de Mc Millan obtenue après investigation numérique (1968)

$$k_B T_C = \frac{\hbar\omega_D}{1.45} e^{-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)}} \quad (1.12)$$

où μ^* représente un pseudo-potentiel coulombien qui caractérise la répulsion coulombienne entre les électrons [2].

Dans la limite opposée, ou limite anti-adiabatique, l'interaction électron-phonon peut donner lieu à la formation de petits polarons où les électrons deviennent fortement localisés. Dans cette limite, le nombre de phonons dans le nuage polaronique est grand. On applique alors une transformation dite de Lang Firsov [20] qui introduit de nouveaux opérateurs pour les phonons et pour les électrons:

$$\bar{a}_{q\lambda} = a_{q\lambda} - \sum_{j,\sigma} u_{j\lambda}(q) n_{j\sigma} \quad (1.13)$$

et

$$\bar{c}_{j\sigma} = c_{j\sigma} \exp \left\{ \sum_{q,\lambda} [u_{j\lambda}(q) a_{q\lambda} - u_{j\lambda}^*(q) a_{q\lambda}^+] \right\} \quad (1.14)$$

où $n_{j\sigma} = c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma}$ et avec

$$u_{j\lambda}(q) = \frac{M_\lambda(q)}{\hbar\omega_{q\lambda}} e^{iq\mathbf{R}_j} \quad (1.15)$$

et

$$c_{j\sigma} = \Omega^{-\frac{1}{2}} \sum_k e^{ik\mathbf{R}_j} c_{k\sigma} \quad (1.16)$$

où Ω est le volume du système et les vecteurs \mathbf{R}_j correspondent aux sites du réseau. Le nouvel hamiltonien est alors

$$H = \sum_{i,j,\sigma} \hat{\sigma}_{i,j} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - E_P \sum_{j\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} v_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ c_{j\sigma'} c_{i\sigma} + \sum_{q,\lambda} \hbar\omega_{q\lambda} a_{q\lambda}^+ a_{q\lambda} \quad (1.17)$$

avec une interaction donnée par

$$v_{ij} = V_{ij}^c - \sum_{q,\lambda} \hbar\omega_{q\lambda} u_{i\lambda}(q) u_{j\lambda}^*(q) \quad (1.18)$$

et un terme de saut, qui est en fait un opérateur compliqué, donné par

$$\hat{\sigma}_{ij} = t_{ij} \exp \left\{ \sum_{q,\lambda} [u_{i\lambda}(q) - u_{j\lambda}(q)] a_{q\lambda} - \sum_{q,\lambda} [u_{i\lambda}^*(q) - u_{j\lambda}^*(q)] a_{q\lambda}^+ \right\} \quad (1.19)$$

L'opérateur $c_{j\sigma}$ décrit maintenant un petit polaron. L'énergie des polarons est abaissée de E_P qui représente l'énergie de liaison d'un polaron. Le terme de saut initial t_{ij} a été réduit. Pour des phonons optiques, sans dispersion de fréquence ω_0 , on obtient la moyenne sur les phonons

$$\sigma_{ij} = \langle \hat{\sigma}_{ij} \rangle_{\text{phonons}} = t_{ij} e^{-\frac{E_P}{2\hbar\omega_0} \coth \frac{1}{2} \beta \hbar\omega_0} \quad (1.20)$$

On obtient que $\sigma_{ij} \rightarrow 0$ lorsque l'énergie de liaison polaronique devient très grande, ce qui correspond à des polarons parfaitement localisés. D'autre part, les polarons voient une interaction attractive (le deuxième terme dans v_{ij}). Lorsque cette attraction est plus grande

que la répulsion coulombienne, les polarons vont être instables par rapport à la formation de bi-polarons. Pour des phonons optiques, l'attraction n'a lieu que sur un même site et vaut

$$- 2E_p \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \quad (1.21)$$

qui est alors à comparer à la répulsion coulombienne intrasite U de Hubbard (modèle de Holstein pour un cristal moléculaire). Dans cette limite bi-polaronique, le terme de saut effectif s'élimine au second ordre pour donner un couplage ferromagnétique J

$$J = - \frac{t^2}{2 E_p} e^{-E_p/\hbar\omega_0} \quad (1.22)$$

On s'attend alors à une température critique, ou température de Curie, $T_c \sim J$. On peut alors développer une théorie de la supraconductivité bi-polaronique [4]. Pour des phonons avec une dispersion, l'interaction polaronique s'étend aux sites voisins et l'on a des polarons qui peuvent se former sur des sites adjacents.

La transformation de Lang Firsov montre que l'énergie de liaison d'un polaron est E_p et donc la condition de formation d'un polaron est $E_p > t$ où t (ou zt) est l'énergie cinétique de l'électron. Elle montre d'autre part, que les polarons sont instables par rapport à la formation de bi-polarons si $E_p > U$ (pour des phonons optiques). Les résultats exacts (numériques) montrent que cette transition des électrons vers des petits polarons (ou bi-polarons) existe bien et qu'elle est assez abrupte [26]. Si l'on revient à la théorie du couplage faible de BCS, on voit que la condition $\lambda > 1$ correspond à la condition de formation des polarons (ou bi-polarons), en prenant $\mathcal{N}(0) \sim t^{-1}$. On peut donc faire l'hypothèse que la limite de validité de la théorie BCS du couplage faible correspond à la formation de polarons (ou bi-polarons) et que dans ce cas, la limite adiabatique (théorème de Migdal) n'est plus valable.

En 1985, Ranninger et Robazkiewicz ont proposé un modèle de supra, pour les électrons, induite par le couplage électron-phonon où l'on est dans le régime intermédiaire du couplage faible de BCS et la limite du couplage fort de la supra bi-polaronique [27]. En comparant le spectre d'excitation et les propriétés thermodynamiques des deux limites, ils en arrivent à la conclusion que le régime intermédiaire peut être décrit par un modèle où coexistent des bi-polarons et des électrons libres qui interagissent via un couplage supra. Dans le modèle RR les bi-polarons correspondent à deux électrons liés sur un site et sont décrits par des opérateurs de spin (bosons de coeurs durs). Le hamiltonien du modèle est

$$H = -t \sum_{j,\delta,\sigma} c_{j+\delta,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \sum_{j,\sigma} (2zt - \mu) c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \sum_j (\Delta_B - 2\mu) b_j^\dagger b_j + g \sum_j (b_j^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + hc) \quad (1.23)$$

où t est l'intégrale de saut pour les électrons, δ sont les vecteurs proches voisins pour le modèle des liaisons fortes, z est le nombre de proches voisins, Δ_B est l'énergie de liaison des bi-polarons, μ est le potentiel chimique et g est une constante de couplage qui mesure l'hybridation. L'opérateur b_j^\dagger crée un bi-polaron sur le site j du réseau. On considère le cas d'un état singlet par exemple, $b_j^\dagger = \bar{c}_{j\uparrow}^\dagger \bar{c}_{j\downarrow}^\dagger$ où les opérateurs $\bar{c}_{j\sigma}$ décrivent des polarons et anticommulent avec les électrons décrits par les opérateurs $c_{j\sigma}$.

Dans le contexte des supraconducteurs à hautes températures critiques, le mécanisme microscopique responsable est, depuis leur découverte par Bergnoz et Muller en 1986 un sujet très controversé. Les fortes corrélations électroniques de même que les fortes corrélations antiferromagnétiques qui sont présentes dans ces matériaux ont conduit la majorité de la communauté scientifique à chercher un état supra du type BCS où l'attraction entre paires serait transmise par des excitations électroniques ou magnétiques. Ces excitations, ayant des énergies typiques bien supérieures à celles des phonons – normalement considérés comme responsables de l'attraction des paires – devraient donner une échelle d'énergie plus grande pour la température de transition supra.

Un point de vue différent pour essayer d'obtenir des plus grandes valeurs de T_c est de considérer la possibilité d'une condensation de Bose-Einstein de paires d'électrons fortement liées. Une estimation grossière de la température critique peut être obtenue à l'aide de la formule de Bose-Einstein pour un gaz de bosons libres: $k_B T_{BEC} \simeq 3.3 \hbar^2 n_B^{2/3} / m_B$ où n_B est la densité de bosons et m_B leurs masses. Pour $n_B \sim 10^{-21} - 10^{-22} / \text{cm}^3$ et $m_B \sim 1 - 10 m_e$ (m_e est la masse d'un électron libre) qui sont les valeurs estimées pour les hauts T_c , on obtient facilement T_{BEC} de l'ordre de quelques centaines de degrés.

La faible longueur de cohérence combinée avec la faible concentration de porteurs, observée dans les hauts T_c , donne au scénario de la condensation de Bose-Einstein un point de départ attractif pour comprendre les hautes températures critiques de ces matériaux.

Certainement, les expériences de photoémission résolues en angle ont identifié une surface de Fermi et un gap supraconducteur dans le spectre d'excitation électronique. Néanmoins, les propriétés des excitations électroniques près de la surface de Fermi se révèlent être anormales, de même pour le comportement de la conductivité optique qui ne suit pas une loi de Drude, pour la relaxation magnétique nucléaire qui ne suit pas une loi de Korringa, pour le coefficient de Hall qui possède une dépendance linéaire en température ou encore pour la partie électronique de l'entropie qui n'est pas linéaire en température.

Dans les années 90, J. Ranninger a proposé une théorie pour les hauts T_c basée sur un mélange de deux types de porteurs: des bi-polarons localisés (Bosons) et des électrons itinérants (Fermions) avec une forte interaction d'échange entre les deux. La question importante est de voir comment l'idée de la condensation de Bose-Einstein peut survivre dans un tel système tout en gardant certaines propriétés du liquide de Fermi. Un test crucial pour un tel système à deux composantes est de vérifier la dépendance en concentration des propriétés thermodynamiques et des propriétés de transport. Il se trouve que cela peut être fait expérimentalement sur un très large régime du dopage. Une question fondamentale pour un tel modèle à deux composantes concerne la nature des porteurs de charges bosoniques et leurs propriétés dynamiques. L'existence de petits porteurs de charges polaroniques localisés dans les hauts T_c a été vérifiée expérimentalement sans aucun doute possible. Si des bi-polarons existent en tant qu'états bien définis, alors on s'attend à une supraconductivité bi-polaronique. On ne sait pas jusqu'à présent, ni expérimentalement, ni théoriquement, si les excitations de grandes longueurs d'onde dans les systèmes polaroniques possèdent ces propriétés. Cependant, on peut faire l'hypothèse que des bi-polarons initialement localisés peuvent devenir itinérants via la forte interaction d'échange

avec les électrons itinérants.

Deux points expérimentaux importants concernant les propriétés du réseau de ces matériaux ont été mis en évidence très tôt. Le premier concerne une observation faite par les chimistes [37] que les environnements des ligands de certains anions dans ces composés existent dans des configurations "ambiguës", c'est-à-dire entre deux configurations de ligands stables possédant des états de valence ioniques définis. Le deuxième point concerne l'observation expérimentale (EXAFS [38], DPNS [39] et l'absorption infrarouge [40]) d'instabilités dynamiques locales du réseau qui sont liées aux fortes interactions entre les porteurs de charges et les déformations locales du réseau. De telles caractéristiques favorisent naturellement les fluctuations de charges de petits clusters qui sont accompagnées par les déformations appropriées des ligands. Par exemple

- les fluctuations $Cu^+(1) \leftrightarrow Cu^{++}(1)$ accompagnées par les configurations dumbbell \leftrightarrow square des oxygènes environnants des chaînes de $YBaCuO_{6+x}$.
- les fluctuations $Bi^{3+} \leftrightarrow Bi^{5+}$ accompagnées par les configurations octaédriques \leftrightarrow tétraédriques des oxygènes dans les composés $Ba(Bi_xPb_{1-x})O_3$
- les fluctuations $C_{60}^- \leftrightarrow C_{60}$ accompagnées par les déformations tangentielles des pentagones qui fluctuent entre deux tendances extrêmes des configurations sp^2 , typiques pour le graphique, et des configurations sp^3 , typiques pour le diamant.

Les fluctuations dynamiques fortement couplées de la valence de l'anion et des positions atomiques des environnements des ligands révèlent des caractéristiques polaroniques pour

- les modes locaux de phonons qui correspondent aux déformations spécifiques des environnements des ligands mentionnés plus haut.
- le spectre électronique des porteurs de charges qui sont self-piégés sur ces clusters.

Ces caractéristiques peuvent être testées par des moyens expérimentaux dans lesquels un électron est retiré du système, soit par photoémission, soit par diffusion Raman résonante. De tels processus donnent une grande amplitude de vibration de l'environnement du ligand auquel on a retiré un électron, donnant une pluie de phonons qui se manifeste par une série d'harmoniques bien définie des modes locaux de base.

La photoémission [41] comme la diffusion Raman résonante [42], ainsi que diffusion Raman hors équilibre [43] ont dans ce sens établi de façon claire la nature polaronique des porteurs de charges localisés dans la phase isolante des matériaux supras à hautes T_c . Il y a une accumulation de preuves expérimentales que les porteurs de charges polaroniques continuent à exister quand on dope la phase isolante de ces matériaux dans la phase métallique. La diffusion Raman a identifié des modes dans la phase métallique dont les fréquences sont pratiquement identiques à celles des modes observés dans des échantillons isolants photo-induits [44]. La spectroscopie de photoémission sur Rb_3C_{60} métallique montre [45] des rémanences des premières harmoniques des pitch-modes pentagonaux de $1500cm^{-1}$ caractéristiques des molécules isolées

de C_{60}^- . Dans les cuprates à hautes T_C , il n'y a pas, jusqu'à présent, de telles preuves directes pour des porteurs de charges polaroniques, si ce n'est la dispersion aplatie observée dans la direction $Y - \Gamma$ qui s'étend sur pratiquement la moitié d'un vecteur du réseau réciproque (la dite singularité de van Hove)[46] d'origine polaronique. De plus, les mesures de la conductivité optique, lorsqu'elles sont interprétées en terme d'une contribution régulière de Drude ainsi qu'une contribution d'une bande large mi-infrarouge [47], fournissent une preuve indirecte de la présence de porteurs de charges polaroniques dans la phase métallique. En particulier, les mesures de reflectance polarisées sur l'axe c dans le lointain infrarouge[48] donnent la preuve d'un fort couplage entre des phonons longitudinaux de l'axe c et des excitations électroniques du plan a,b . Un transfert de poids des phonons, induit par la température et le dopage, de l'oxygène du plan vers les modes des oxygènes apicaux est observé, et le background électronique dans la conductivité optique montre une condensation lorsque l'on entre dans l'état supra. L'existence de la bande mi-infrarouge semble être commune aux oxydes métalliques[49] incluant V_2O_3 , $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$, $Ca_{0.5}Sr_{0.5}RuO_3$ et $Ba_{1-x}K_xPbO_3$, $Sr_{0.9}La_{0.1}TiO_3$, $SrTiO_{3-x}$, $Bi_2Sr_3Co_2O_9$, etc.. tous étant des composés très polaires.

Sur la base de ces faits expérimentaux, et en particulier:

- l'existence de porteurs de charges polaroniques ou bi-polaroniques dans la phase isolante,
- la mise en place d'un transfert de charges entre les états polaroniques ou bi-polaroniques et un continuum électronique d'électrons itinérants quand le système est dopé dans le régime métallique,
- la disparition du continuum électronique dans la condensation quand on entre dans la phase supra,

J. Ranninger a proposé le scénario suivant pour les supraconducteurs à hautes températures critiques et en particulier pour les cuprates.

Lorsque l'on dope, les états bi-polaroniques sont introduits dans les couches (les réservoirs de charges) entre plans CuO_2 i.e dans les chaînes pour $YBa_2Cu_3O_{6+x}$, les doubles chaînes pour $YBa_2Cu_4O_8$ et la couche LaO pour La_2CuO_4 . Pour être plus spécifique, la création de bi-polarons avec des chaînes intervient quand on installe un atome O entre deux dumbbells adjacents $O^{2-}(4) - Cu^+(1) - O^{2-}(4)$ contrôlée par le processus $[O^{2-}(4) - Cu^+(1) - O^{2-}(4)] - O(1) - [O^{2-}(4) - Cu^+(1) - O^{2-}(4)] \rightarrow [O^{2-}(4) - Cu^{2+}(1) - O^{2-}(4)] - O^{2-}(1) - [O^{2-}(4) - Cu^{2+}(1) - O^{2-}(4)]$ conjointement avec une forte réduction en taille de la liaison $Cu(1) - O(4)$. Le dernier caractérise la nature polaronique des deux électrons vivants sur $O^{2-}(1)$ que l'on identifie à un bi-polaron. Le niveau d'énergie de tels bi-polarons devrait (sur la base des spectroscopies Raman et des études de fluorescence) tomber à l'intérieur de la bande de valence remplie -la bande $Cu - O$ hybridée des plans CuO_2 - séparé par un gap de transfert de charges de la bande de Hubbard supérieure. Sur la figure 1.1 est tracée schématiquement cette situation avec les niveaux d'énergies respectifs des états moléculaires des dumbbells isolés $O^{2-}(4) - Cu^{2+}(1) - O^{2-}(4)$ de même que deux autres dumbbells avec un ion $O(1)$ intercalé et qui présente le centre des bi-polarons. A faible dopage, les électrons qui sont nécessaires pour former ces bi-polarons

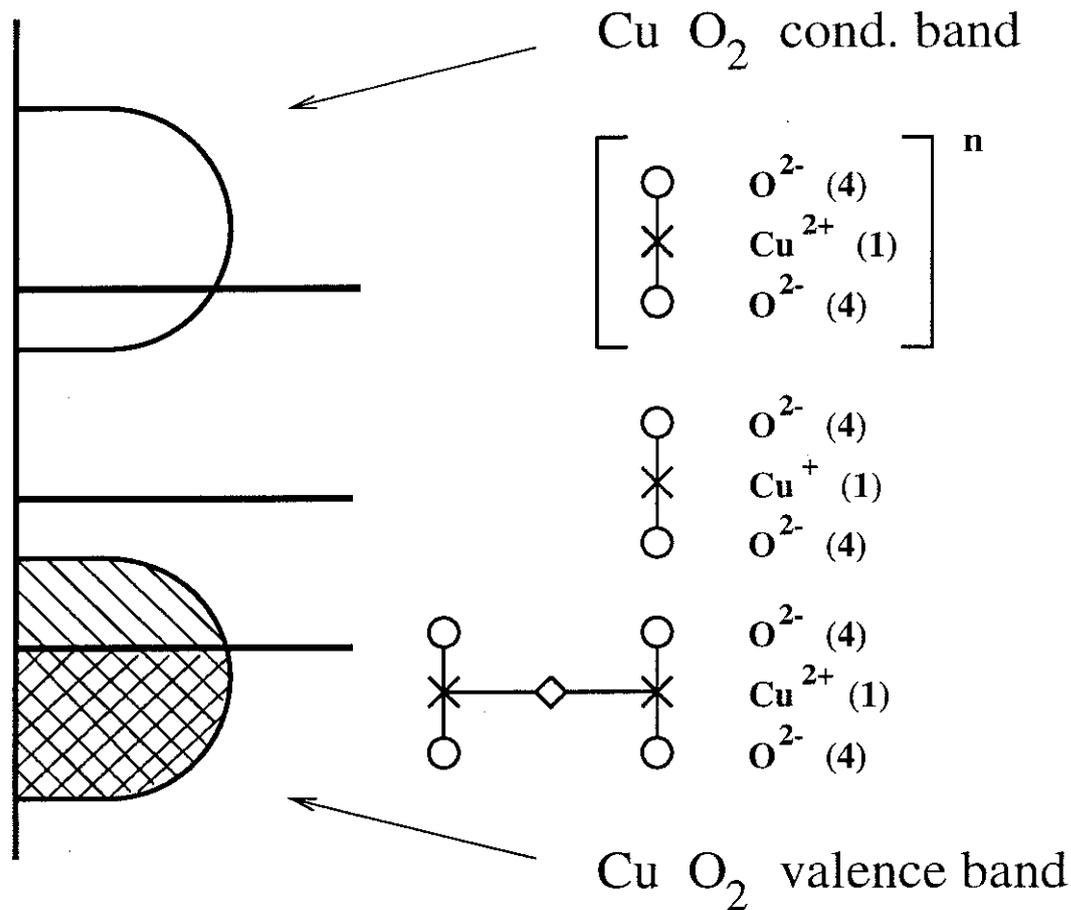


Figure 1.1: Le schéma de bande et des niveaux d'énergies pour $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ pour $x = 0$ correspondant à la bande inférieure pleine de l'isolant transfert de charges (simplement hachée) et $x \geq 0.4$ correspondant à cette bande étant remplie jusqu'au niveau des centres dopants (doublement hachée). La position des niveaux d'énergies des dumbbells pour $x = 0$ et des dumbbells ionisés étant le siège des bi-polarons pour $x > 0$ est indiquée.

viennent essentiellement des anions du réservoir de charges. Ainsi, le faible dopage influence peu ou pas la bande de valence. Au-delà d'un certain niveau des dopants, le réservoir de charges a été vidé. C'est le cas, par exemple, dans $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ pour $x \geq 0.25$ quand on ne peut plus lier de $O(1)$ dans les chaînes en utilisant exclusivement des électrons du réservoir car tous les ions $Cu^+(1)$ disponibles ont déjà été convertis en $Cu^{2+}(1)$ et $Cu^{3+}(1)$ et sont énergétiquement prohibés. D'autres oxygènes peuvent alors être liés seulement par un transfert de charges des plans CuO_2 vers le réservoir de charges. A partir de ce moment, le haut de la bande de valence est graduellement vidé en dopant encore le système, et le système deviendrait métallique si les électrons dans la bande de valence étaient un simple système de fermions sans corrélations. En ce qui concerne les états bi-polaroniques, ils sont complètement occupés dans cette situation. Quand le potentiel chimique approche le niveau bosonique par-dessous, il reste pratiquement figé à cette énergie, et lorsque l'on dope encore, d'autres sites bi-polaroniques sont créés qui peuvent être complètement occupés. C'est dans ce régime de dopage (où l'occupation

des sites bosoniques diminue de l'unité à zéro) que la physique intéressante intervient, avec un échange important entre les bi-polarons et les paires d'électrons de valence. Si l'on dope encore plus, le potentiel chimique tombe en dessous du niveau bosonique et les états bosoniques sont inoccupés. Ce scénario ressort directement des études détaillées de photoémission qui montrent le taux de conversion de $Cu^+(1) \rightarrow Cu^{2+}(1)$ en fonction du dopage [51]. Un modèle simple qui décrit ce scénario est le modèle Boson-Fermion introduit par J. Ranninger et S. Robaszkiewicz pour décrire le couplage intermédiaire électron-phonon. Le hamiltonien pour un tel modèle est celui de l'équation (1.23). Dans ce modèle, la conservation de la charge nécessite un potentiel chimique μ commun pour les deux types de porteurs de charges, le nombre total de particules dans le système étant donné par

$$N_{tot} = \sum_{j,\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + 2 \sum_j b_j^\dagger b_j \quad (1.24)$$

Les bosons dans ce modèle, décrits par les opérateurs b_j et b_j^\dagger sont des bosons de coeurs durs qui vérifient les relations de commutation des opérateurs de spin pour un même site.

La présence de bosons de coeurs durs, rend difficile l'utilisation du développement perturbatif car on ne peut plus utiliser le théorème de Wick dans le développement de Feynman Dyson. Seule l'analyse champ moyen pour l'état supra est relativement facile. Dans ce cas, on manipule uniquement les matrices 2×2 des spins $1/2$. Pour aller au-delà, au niveau RPA par exemple, il faut utiliser la méthode des équations d'évolutions pour les fonctions de Green par exemple, où l'on calcule expressement les commutateurs.

Afin d'obtenir un modèle techniquement moins compliqué, nous développons un modèle Boson-Fermion où l'on néglige les corrélations de coeurs durs pour les bosons. Dans ce cas, les bi-polarons localisés sont représentés par des opérateurs de bosons qui commutent dans l'espace des q

$$[b_q, b_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'} \quad (1.25)$$

Cette approximation est dans le même esprit que celle de Holstein Primakov pour remplacer les opérateurs de spin par des opérateurs de bosons (magnons) dans l'étude du hamiltonien de Heisenberg. Néanmoins, du fait que le hamiltonien Boson-Fermion comporte un terme où les bosons se couplent via deux électrons, on recupère quand même des effets de coeurs durs pour les bosons. On a ainsi un hamiltonien que l'on peut étudier au moyen de la théorie des perturbations standard.

Notons finalement qu'en physique nucléaire, il existe un modèle Boson-Fermion introduit pour décrire simultanément les excitations collectives et individuelles des noyaux atomiques. Dans ce modèle, les bosons peuvent être interprétés comme des paires de nucléons (protons, neutrons) et les degrés de liberté collectifs peuvent être décrits par un système de bosons en interaction [13]. Les degrés de liberté à une particule représentent le mouvement des nucléons individuels dans le potentiel nucléaire moyen. Ils sont décrits par un système de fermions en interaction. Le couplage des fermions et des bosons conduit au modèle Boson-Fermion [14]. On considère par exemple des bosons avec un moment angulaire et une parité $J^P = 0^+$ et 2^+ .

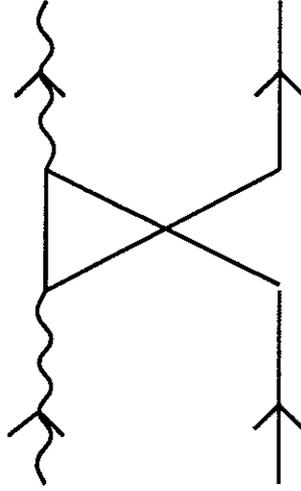


Figure 1.2: Interaction d'échange pour le modèle Boson-Fermion en physique nucléaire

Les opérateurs de création et d'annihilation $b_{l,m}^+$ et $b_{l,m}$, ($l = 0, 2$ et $-l \leq m \leq l$) vérifient les relations de commutation standard des bosons:

$$[b_{l,m}, b_{l',m'}^+] = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad , \quad [b_{l,m}, b_{l',m'}] = 0 \quad (1.26)$$

Les fermions correspondant aux nucléons isolés (spin 1/2) sont décrits par les opérateurs de fermions $a_{j,m}^+$ et $a_{j,m}$, où j est le moment angulaire et m sa composante sur l'axe de quantification, qui vérifient les relations d'anticommutation des fermions

$$\{a_{j,m}, a_{j',m'}^+\} = \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \quad , \quad \{a_{j,m}, a_{j',m'}\} = 0 \quad (1.27)$$

On suppose que les opérateurs de boson et de fermion commutent entre eux. Dans cette approximation, les bosons sont traités comme des particules élémentaires sans structure interne, alors que, dans le noyau, ce sont des particules composites (paires de fermions). L'effet de la nature composite des bosons est introduit par une interaction d'échange entre les fermions et les bosons. Le hamiltonien du modèle comprend une partie bosonique H_B , une partie fermionique H_F et une partie V_{BF} qui décrit l'interaction entre fermions et bosons:

$$H_B = E_0 + \sum_{\alpha,\beta} \epsilon_{\alpha\beta} b_{\alpha}^+ b_{\beta} + \sum_{\alpha,\alpha',\beta,\beta'} \frac{1}{2} w_{\alpha\alpha'\beta\beta'} b_{\alpha}^+ b_{\alpha'}^+ b_{\beta} b_{\beta'} + \dots \quad (1.28)$$

$$H_F = \mathcal{E}_0 + \sum_{i,k} \eta_{ik} a_i^+ a_k + \sum_{i,i',k,k'} \frac{1}{2} v_{i i' k k'} a_i^+ a_{i'}^+ a_k a_{k'} + \dots \quad (1.29)$$

$$V_{BF} = \sum_{\alpha,\beta,i,k} w_{\alpha\beta i k} b_{\alpha}^+ a_i^+ b_{\beta} a_k + \dots \quad (1.30)$$

La forme V_{BF} est très générale mais contient l'interaction d'échange très importante représentée sur la figure 1.2.

Chapitre 2

Espace de Phase du Modèle Boson-Fermion

2.1 Introduction

Dans ce deuxième chapitre, nous analysons l'espace de phase du modèle Boson-Fermion. Du fait que les bosons que l'on considère sont formés de deux fermions, on obtient des propriétés très différentes d'un couplage électron-boson habituel, où les bosons correspondent à des excitations collectives dont le nombre d'excitations n'est pas conservé, comme dans le cas de l'interaction électron-phonon. Dans notre système, nous prenons explicitement en compte la conservation totale du nombre de particules via le potentiel chimique. De même, au niveau de l'interaction, le vertex Boson-Fermion respecte localement la conservation du nombre de particules. Le système Boson-Fermion possède ainsi des propriétés particulières qui se reflètent dans l'espace de phase. Dans un premier temps, nous considérons uniquement un mélange de fermions et de bosons sans interaction. Dans ce cas, nous montrons que le système est déjà capable d'exhiber une condensation de Bose pour le sous-système de bosons. Pour des bosons initialement sans dispersion, la température de Bose est nulle. Après avoir vu comment la conservation du nombre total de particules influence la thermodynamique du mélange, nous considérons ensuite l'espace de phase au niveau des interactions. Pour cela, nous considérons les équations de Boltzmann pour le système Boson-Fermion. Après avoir dérivé les équations couplées pour le système, nous considérons une solution particulière qui permet d'obtenir des contraintes sur l'espace de phase. Nous analysons ensuite l'espace des phases sur les fonctions de Green à une particule pour les fermions et les bosons. A l'ordre le plus bas, on peut intégrer sur l'angle et obtenir les seuils de réaction. Enfin nous terminons ce chapitre en comparant le système Boson-Fermion au système électron-phonon et en soulignant les différences. Dans tout ce chapitre, nous considérons des bosons avec une dispersion quadratique, le cas de bosons sans dispersion étant un cas particulier. Cela correspond à l'hypothèse selon laquelle l'interaction va délocaliser les bosons, et donc qu'un système avec des bosons délocalisés correspond à une renormalisation du spectre.

2.2 Le mélange Boson-Fermion

Nous commençons par étudier le système en l'absence d'interactions. Pour plus de généralités, nous considérons des fermions et des bosons avec une relation de dispersion ϵ_k et E_q , respectivement, le cas de bosons sans dispersion (masse infinie), correspond au cas particulier $E_q = E_0$. Dans un premier temps, nous donnons l'expression des grandeurs thermodynamiques habituelles dans l'ensemble Grand Canonique pour le mélange. Dans un deuxième temps, nous discutons de la condensation de Bose qui survient dans un tel système, en utilisant des arguments généraux. Enfin, nous donnons des résultats quantitatifs pour ces grandeurs thermodynamiques dans le cas particulier des particules libres où l'on dispose des développements standard, à basses températures pour les fermions et près de la température de Bose pour les bosons.

2.2.1 Grandeurs thermodynamiques

En l'absence d'interactions, le hamiltonien du système que l'on considère est la somme de deux termes cinétiques: un pour le système de fermions et un pour le système de bosons

$$H - \mu N = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_q E_q b_q^+ b_q \quad (2.1)$$

Cet opérateur est diagonal avec la solution $\langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle = n_F(\epsilon_k)$ et $\langle b_q^+ b_q \rangle = n_B(E_q)$, où $n_F(x)$ et $n_B(x)$ sont respectivement les fonctions de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein. Il est alors loisible d'introduire les énergies individuelles ξ_k^F et ξ_q^B pour les fermions et les bosons, définies par

$$\epsilon_k = \xi_k^F - \mu \quad \text{et} \quad E_q = \xi_q^B - 2\mu \quad (2.2)$$

On obtient alors directement l'expression du nombre total de particules N dans le système, ainsi que l'énergie moyenne E

$$N = \sum_{k\sigma} n_F(\epsilon_k) + 2 \sum_q n_B(E_q) \quad (2.3)$$

$$E = \sum_{k\sigma} \xi_k^F n_F(\epsilon_k) + \sum_q \xi_q^B n_B(E_q) \quad (2.4)$$

Le facteur 2 dans l'expression de N prend en compte (via le potentiel chimique) qu'un boson est composé de deux particules. L'état du système est entièrement déterminé par la connaissance du potentiel chimique μ . La valeur de μ est donnée comme une fonction du nombre total de particules N dans le système. Pour obtenir la description standard Grand Canonique de notre système, on considère la fonction de partition Ξ qui est définie par

$$\Xi(T, \mu, \Omega) = \sum_{\ell} e^{-\beta(E_{\ell} - \mu N_{\ell})} \quad (2.5)$$

où T est la température, Ω le volume du système, β l'inverse de la température et ℓ les états accessibles du système. La fonction de partition se factorise en $\Xi = \Xi_F \cdot \Xi_B$ du fait que les deux

systèmes sont indépendants. On peut alors utiliser les résultats standard pour un système de fermions ou de bosons sans interactions et exprimer toutes les grandeurs thermodynamiques en fonction des nombres d'occupation $n_k^F = n_F(\epsilon_k)$ et $n_q^B = n_B(E_q)$. Le potentiel Grand Canonique $J(T, \mu, \Omega)$ défini par $J = -k_B T L n(\Xi)$ s'écrit comme la somme $J = J_F + J_B$ où les deux potentiels sont donnés par

$$J_F(T, \mu, \Omega) = +k_B T \sum_{k\sigma} L n(1 - n_k^F) \quad (2.6)$$

$$J_B(T, \mu, \Omega) = -k_B T \sum_q L n(1 + n_q^B) \quad (2.7)$$

L'entropie Grand Canonique $S = -(\partial J / \partial T)_{\mu, \Omega}$ s'écrit elle aussi comme la somme $S = S_F + S_B$ avec

$$S_F = -k_B \sum_{k\sigma} \left[(1 - n_k^F) L n(1 - n_k^F) + n_k^F L n(n_k^F) \right] \quad (2.8)$$

$$S_B = +k_B \sum_q \left[(1 + n_q^B) L n(1 + n_q^B) - n_q^B L n(n_q^B) \right] \quad (2.9)$$

Enfin l'énergie du système E qui est reliée aux autres fonctions par $J = E - TS - \mu N$ est la somme des énergies des deux systèmes E_F et E_B données par

$$E_F = \sum_{k\sigma} \xi_k^F n_k^F \quad (2.10)$$

$$E_B = \sum_q \xi_q^B n_q^B \quad (2.11)$$

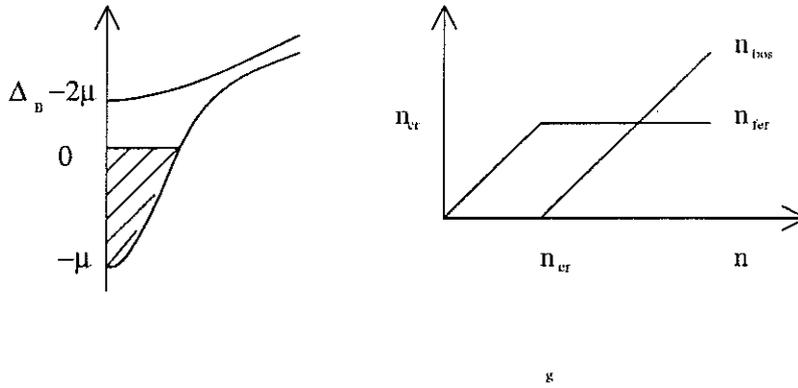
2.2.2 Condensation de Bose

Le but de ce qui suit est de donner le comportement qualitatif du système en prenant en compte uniquement le fait que l'on a des fermions et des bosons indépendants avec un potentiel chimique partagé. La contrainte imposée par le potentiel chimique est $N = N_F + 2N_B$. Il est loisible d'introduire le *remplissage* du système n qui est défini par $n = N/(2M)$ où M est le nombre de sites pour le modèle sur réseau et le volume Ω pour le système à la limite thermodynamique. On définit de même les remplissages (ou densités) pour les fermions $n_{fer} = N_F/(2M)$ et pour les bosons $n_{bos} = N_B/M$ avec la relation $n = n_{fer} + n_{bos}$. On fait alors des hypothèses sur les relations ξ_k^F et ξ_q^B . Dans le modèle initial sur réseau, nous avons des relations de dispersion du type *liaisons fortes*

$$\xi_k^F = \sum_{\alpha=1}^3 (2t - 2t \cos(k_\alpha)) \quad (2.12)$$

$$\xi_q^B = \Delta_B + \gamma_B \sum_{\alpha=1}^3 (2t - 2t \cos(q_\alpha)) \quad (2.13)$$

Le paramètre γ_B vaut zéro dans le modèle initial et correspond à avoir une intégrale de saut $\gamma_B t$ pour les bosons ou un rapport de masse $m_F/m_B = \gamma_B$. Nous faisons alors l'hypothèse que

Figure 2.1: Remplissage du système à $T = 0$

ξ_k^F démarre quadratiquement en zéro et que ξ_q^B démarre quadratiquement en Δ_B . Il s'ensuit que ϵ_k démarre en $-\mu$ et que E_q démarre en $E_0 = \Delta_B - 2\mu$.

A température nulle, les états de fermions sont remplis jusqu'à un niveau de Fermi qui est défini par $\epsilon_k = 0$ pour $k = k_F$, alors que pour les bosons, seul le niveau de plus basse énergie E_0 peut être occupé si $E_0 = 0$. Si l'on part d'un système sans particules et que l'on ajoute progressivement des particules au système, on commence par remplir les états de fermions dont l'énergie ϵ_k est inférieure à zéro. On continue ce remplissage tant que $E_0 > 0$, c'est-à-dire $\mu < \Delta_B/2$. Lorsque l'on atteint $E_0 = 0$, on est à un point d'équilibre pour le système: les excitations de fermions à la surface de Fermi ont la même énergie que les excitations des bosons (le mode $q = 0$). Si l'on ajoute deux particules supplémentaires, de spins opposés, elles vont devoir être, à cause du principe de Pauli, dans des états d'énergies plus hautes. Pour un système de fermions seul, il suffit de redéfinir le potentiel chimique pour pouvoir accommoder ces deux particules. Dans notre système, il suffit de mettre ces deux particules dans le niveau bosonique d'énergie nulle, sans avoir à modifier le potentiel chimique, et ainsi de suite pour les particules supplémentaires. Il est loisible de définir un remplissage critique n_{cr} qui correspond au nombre de fermions à $T = 0$ avec le potentiel chimique $\mu = \Delta_B/2$. Si $n < n_{cr}$, alors le système à $T = 0$ comporte uniquement des fermions ($n = n_{fer}$) alors que si $n > n_{cr}$, le nombre de fermions dans le système est $n_{fer} = n_{cr}$ et le nombre de bosons est $n_{bos} = n - n_{cr}$. Dans le premier cas, le potentiel chimique est déterminé par l'équation $n = n_{fer}$ sans aucune référence aux bosons, alors que dans le second cas le potentiel chimique est bloqué à $\mu = \Delta_B/2$. La figure 2.1 illustre le remplissage du système à température nulle. Nous définissons la densité d'états à une particule $D(\epsilon)$ par

$$D(\epsilon) = \frac{1}{M} \sum_k \delta(\epsilon - \xi_k^F) \quad (2.14)$$

qui, avec nos hypothèses, commence en $\epsilon = 0$ et vaut $D(\epsilon) = A\sqrt{\epsilon}$ pour $\epsilon \rightarrow 0$, pour un système à trois dimensions. La densité critique est alors donnée par

$$n_{cr} = \int_0^{\Delta_B/2} d\epsilon D(\epsilon) \quad (2.15)$$

A température non nulle, le système de bosons peut exhiber une condensation de Bose-Einstein à la température T_B et avoir un condensat de Bose pour $T < T_B$, puisque dans nos hypothèses, nous avons un système à trois dimensions avec une densité d'états qui s'annule en $\sqrt{\epsilon}$. La condensation de Bose survient lorsque l'énergie du bas de la bande des bosons s'annule, c'est-à-dire pour $E_0 = \Delta_B - 2\mu = 0$. On en déduit que, si la condensation de Bose a lieu, le potentiel chimique est bloqué à $\mu = \Delta_B/2$ pour $T < T_B$. La conservation du nombre total de particules s'écrit $n = n_{fer} + n_{bos} + n_0$ où l'on sépare la densité de fermions, la densité de bosons non condensés et la densité de bosons condensés (condensat de Bose du mode $q = 0$). A $T = 0$, tous les bosons sont condensés, et la conservation s'écrit $n = n_{fer} + n_0$, ou encore $n = n_{cr} + n_0$. On en déduit que si $n < n_{cr}$, il ne peut pas y avoir de condensation de Bose. Pour $n = n_{cr}$ il y a condensation de Bose avec $T_B = 0$, et pour $n > n_{cr}$, il y a condensation de Bose avec $T_B > 0$. Pour $T = T_B$, le condensat est nul et le potentiel chimique vaut $\mu = \Delta_B/2$. L'équation qui détermine T_B est donc

$$\begin{cases} n = n_{fer} + n_{bos} \\ T = T_B \\ \mu = \Delta_B/2 \end{cases} \quad (2.16)$$

En résumé, nous voyons que le système exhibe deux comportements très différents selon le remplissage du système. Pour $n < n_{cr}$, il n'y a pas de condensation de Bose. A $T = 0$, on peut définir une énergie de Fermi avec sa signification habituelle pour un système de fermions. Pour $T > 0$, les excitations vont être principalement fermioniques tant que $T \ll E_0$, alors que pour $T \simeq E_0$, les excitations bosoniques entrent en jeu également. Pour $n > n_{cr}$, le système exhibe une condensation de Bose pour une température T_B . Pour $T \leq T_B$, le potentiel chimique du système est bloqué à $\mu = \Delta_B/2$, il y a un nombre fini de bosons condensés. On s'attend de plus à ce que le nombre de fermions varie peu pour $T \leq T_B$, du fait que le potentiel chimique est bloqué.

2.2.3 Développement basse température

On s'intéresse au cas $n > n_{cr}$, et l'on se propose de regarder le système pour $T < T_B$ et autour de T_B , c'est-à-dire la région où le potentiel chimique $\mu \simeq \Delta_B/2$. On considère le cas de particules libres, avec des relations de dispersion

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \quad \text{et} \quad E_q = \Delta_B + \gamma_B \frac{\hbar^2 q^2}{2m} - 2\mu \quad (2.17)$$

On utilise la densité d'états à trois dimensions $D(\epsilon)$ donnée par

$$D(\epsilon) = \frac{\Omega \sqrt{2m}^{3/2} \sqrt{\epsilon}}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (2.18)$$

que l'on note $D(\epsilon) = A\sqrt{\epsilon}$. La densité critique pour le système est alors simplement

$$n_{cr} = A \frac{2}{3} \left(\frac{\Delta_B}{2} \right)^{3/2} \quad (2.19)$$

Pour $T > T_B$, l'équation à résoudre qui détermine le potentiel chimique est $n = n_{fer} + n_{bos}$, avec

$$n_{fer} = A \int_0^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon} n_F(\epsilon - \mu) \quad (2.20)$$

$$n_{bos} = A \int_0^{\infty} d\epsilon \sqrt{\epsilon} n_B(\Delta_B - 2\mu + \gamma_B \epsilon) \quad (2.21)$$

Pour évaluer l'intégrale donnant n_{fer} , on utilise le *développement basse température* habituel qui est valable tant que l'énergie thermique $k_B T$ est inférieure à l'énergie de Fermi. On définit l'énergie de Fermi pour notre système par $k_B T_F = \Delta_B/2$. On obtient pour la densité de fermions

$$n_{fer} = A \frac{2}{3} \mu^{3/2} + A \frac{\pi^2}{12} (k_B T)^2 \mu^{-1/2} \quad (2.22)$$

Pour l'intégrale donnant la densité de bosons, on obtient

$$n_{bos} = A \frac{(k_B T)^{3/2}}{\gamma_B^{3/2}} I_{1/2}(\varphi) \quad (2.23)$$

où φ est la fugacité des bosons qui est définie par

$$\varphi = e^{\beta(\Delta_B - 2\mu)} \quad (2.24)$$

et $I_{1/2}(\varphi)$ est la fonction donnée sous la forme d'une somme de Riemman

$$I_{1/2}(\varphi) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi^j}{j^{3/2}} \quad (2.25)$$

avec $I_{1/2}(1) = \sqrt{\pi}/2 \times 2.612$. Cette fonction $I_{1/2}(\varphi)$ possède aussi un développement pour $\varphi \simeq 1$, donné par

$$\begin{aligned} I_{1/2}(\varphi) \simeq & \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[2.612 - 2\sqrt{\pi} [\beta(\Delta_B - 2\mu)]^{1/2} \right. \\ & \left. + 1.460[\beta(\Delta_B - 2\mu)] - 0.104[\beta(\Delta_B - 2\mu)]^2 \right] \end{aligned} \quad (2.26)$$

La température de Bose T_B est obtenue en posant $T = T_B$ dans les équations et $\mu = \Delta_B/2 = k_B T_F$. On obtient alors

$$T_B = T_F \gamma_B \left[\frac{2}{3 I_{1/2}(1) n_{cr}} \right]^{2/3} \left[n - n_{cr} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{T_B}{T_F} \right)^2 \right] \right]^{2/3} \quad (2.27)$$

On voit que l'on retrouve essentiellement la forme standard de la formule habituelle $T_B \sim (n_{bos})^{2/3}$ où $n_{bos} \simeq (n - n_{cr})$, plus une petite correction en $(T_B/T_F)^2$ qui représente la variation du nombre de fermions avec la température. On obtient alors la solution approchée

$$T_B = T_B^0 - \frac{n_{cr}}{12(n - n_{cr})} \left(\frac{T_B^0}{T_F} \right)^3 \quad (2.28)$$

où T_B^0 est la température de Bose obtenue en prenant le nombre de fermions fixe avec la température ($n_{fer} = n_{cr}$) et qui est donnée par

$$T_B^0 = T_F \gamma_B \left[\frac{2}{3 I_{1/2}(1) n_{cr}} \right]^{2/3} [n - n_{cr}]^{2/3} \quad (2.29)$$

La présence des fermions a donc pour effet de *diminuer* la valeur de la température de Bose. Le développement de London pour $I_{1/2}$ en $\sqrt{E_0}$ permet d'obtenir la valeur de E_0 pour $\alpha = (T - T_B)/T_B \rightarrow 0$. On obtient

$$\left(\frac{E_0}{k_B T_F} \right)^{1/2} \simeq \frac{3 + 4a}{2b} \alpha \quad (2.30)$$

avec

$$a = \frac{\pi^2 \gamma_B^{3/2}}{12 I_{1/2}(1)} \left(\frac{T_B}{T_F} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad b = \frac{\pi}{I_{1/2}(1)} \quad (2.31)$$

On retrouve, comme pour le gaz de Bose libre, que $E_0 \sim (T - T_B)^2$. La présence des fermions ne change pas la nature de la transition. La variation du condensat, dans la même approximation est donnée par

$$n_0 \simeq (n - n_{cr}) \left[1 - t^{3/2} \frac{1 + at^{1/2}}{1 + a} \right] \quad (2.32)$$

où $t = T/T_B$. La variation de n_0 est moins *aplatie* que pour le gaz de bosons libres où l'on a $n_0 = n_{bos}(1 - t^{3/2})$.

La densité d'énergie du mélange $\epsilon = E/2M$ est donnée par

$$\epsilon = A \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{3/2} n_F(\epsilon - \mu) + \frac{A}{2} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon^{1/2} (\gamma_B \epsilon + \Delta_B) n_B(\gamma_B \epsilon + \Delta_B - 2\mu) + n_0 \frac{\Delta_B}{2} \quad (2.33)$$

Le développement basse température pour l'énergie des fermions est

$$\epsilon_{fer} = A \frac{2}{3} \mu^{5/2} + A \frac{\pi^2}{4} (k_B T)^2 \mu^{1/2} \quad (2.34)$$

alors que la densité d'énergie pour les bosons s'écrit

$$\epsilon_{bos} = n_{bos} \frac{\Delta_B}{2} + \frac{A (k_B T)^{5/2}}{2 \gamma_B^{3/2}} I_{3/2}(\varphi) + n_0 \frac{\Delta_B}{2} \quad (2.35)$$

La fonction $I_{3/2}$ est définie par

$$I_{3/2}(\varphi) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi^j}{j^{5/2}} \quad (2.36)$$

et son développement de London est donné par

$$\begin{aligned} I_{3/2}(\varphi) \simeq & \frac{3\sqrt{\pi}}{4} [1.342 - 2.612[\beta(\Delta_B - 2\mu)]] \\ & + \frac{4\sqrt{\pi}}{3} [\beta(\Delta_B - 2\mu)]^{3/2} - 0.730[\beta(\Delta_B - 2\mu)]^2 \end{aligned} \quad (2.37)$$

2.3 Equations de Boltzmann

Nous considérons le modèle Boson-Fermion en interaction dans le cadre des équations de Boltzmann, où les fermions et les bosons sont considérés comme des particules classiques soumises à des collisions. Cette approche est la méthode self-consistante la plus simple possible pour voir comment intervient le couplage dans l'espace des phases. Dans notre approche des équations de Boltzmann, une particule est décrite par une fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ où \vec{r} est la position de la particule, \vec{p} le moment de la particule et t représente le temps. En l'absence de sources extérieures dépendantes du temps ou de l'espace, il n'a qu'une dépendance par rapport au moment de la particule. On note ainsi F_k la fonction de distribution pour un fermion d'impulsion $\hbar\vec{k}$ avec la contrainte de la statistique de Fermi $0 \leq F_k \leq 1$, et on note B_q la fonction de distribution d'un boson d'impulsion $\hbar\vec{q}$, avec la contrainte de la statistique de Bose $0 \leq B_q$. Nous négligeons de prendre des fonctions de distribution pour les fermions avec un indice de spin, puisque dans notre problème, $F_{k,\uparrow} = F_{k,\downarrow} = F_k$. Le nombre total de particule dans le système est donné par

$$N = 2 \sum_k F_k + 2 \sum_q B_q \quad (2.38)$$

L'équation de Boltzmann pour la fonction de distribution, dans notre approche, est obtenue en égalant la variation totale en temps à la variation en temps due aux collisions

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\vec{r}}{dt} \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} f + \frac{d\vec{p}}{dt} \vec{\nabla}_{\mathbf{p}} f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} \quad (2.39)$$

Dans un premier temps, nous établissons les termes de collisions pour les fonctions de distribution F_k et B_q . Dans un deuxième temps, nous établissons les équations de Boltzmann pour les fonctions de distribution à l'équilibre en l'absence de champ extérieur, puis en présence d'un champ électrique extérieur. Dans le premier cas nous retrouvons que les fonctions de distribution F_k et B_q s'identifient aux distributions de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein respectivement. Dans le second cas, nous établissons le système d'équations linéaires qui permet d'obtenir la conductivité électrique, nous recherchons les solutions dans l'approximation du temps de relaxation et nous discutons de la solution à l'aide d'un résultat numérique.

La variation des fonctions de distribution F_k et B_q est obtenue en utilisant la règle d'or de Fermi, qui donne la probabilité de transition par unité de temps, ainsi que les statistiques de Fermi et de Bose [16]. Pour les fermions, F_k peut diminuer lorsqu'un fermion de moment k se combine avec un fermion de moment $-k+q$ et de spin opposé pour donner un boson de moment q . A cela, il faut rajouter les probabilités $\langle c_k^\dagger c_k \rangle = F_k$ pour les fermions et la probabilité $\langle b_q b_q^\dagger \rangle = 1 + B_q$ pour le boson. De même, F_k peut augmenter lorsqu'un boson de moment q se désexcite en un fermion de moment k et un fermion de moment $-k+q$ et de spin opposé. Dans ce cas, il faut inclure la probabilité pour le boson $\langle b_q^\dagger b_q \rangle = B_q$, ainsi que les probabilités pour les fermions $\langle c_k c_k^\dagger \rangle = 1 - F_k$. Pour les bosons, B_q peut diminuer lorsqu'un boson de moment q se désexcite en un fermion de moment k et un fermion de moment $-k+q$ de spin

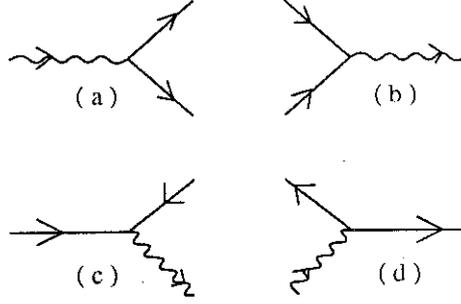


Figure 2.2: Les processus pour les termes de collisions. Les diagrammes (a) et (b) correspondent aux bosons et les diagrammes (c) et (d) correspondent aux fermions

opposé. Dans ce cas, il faut inclure la probabilité B_q pour le boson et $1 - F_k$ et $1 - F_{-k+q}$ pour les fermions. Enfin, B_q peut augmenter lorsqu'un fermion de moment k se combine avec un fermion de moment $-k + q$ et de spin opposé pour donner un boson de moment q . La probabilité du boson étant $1 + B_q$ et la probabilité des fermions, étant F_k et F_{-k+q} . Il reste à utiliser la règle d'or de Fermi qui donne la variation de la probabilité par unité de temps comme étant 2π fois l'élément de matrice de la transition au carré, que multiplie $\delta(E_{final} - E_{initial})$, où E_{final} est l'énergie finale et $E_{initial}$ est l'énergie initiale. Les quatre processus sont résumés sur la figure 2.2. On obtient ainsi

$$\left. \frac{\partial F_k}{\partial t} \right|_{coll} = + 2\pi g^2 \sum_q [1 - F_k] [1 - F_{-k+q}] B_q \delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) - 2\pi g^2 \sum_q F_k F_{-k+q} [1 + B_q] \delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) \quad (2.40)$$

$$\left. \frac{\partial B_q}{\partial t} \right|_{coll} = + 2\pi g^2 \sum_k F_k F_{-k+q} [1 + B_q] \delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) - 2\pi g^2 \sum_k [1 - F_k] [1 - F_{-k+q}] B_q \delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) \quad (2.41)$$

En l'absence de champs extérieurs, les fonctions de distribution F_k et B_q à l'équilibre ne doivent pas dépendre du temps. Si on note F_k^0 et B_q^0 ces fonctions, les équations de Boltzmann se réduisent à $\partial_t F_k^0|_{coll} = 0$ et $\partial_t B_q^0|_{coll} = 0$. On vérifie que les solutions $F_k^0 = n_F(\epsilon_k)$ et $B_q^0 = n_B(E_q)$ vérifient les équations de Boltzmann. Pour cela, il suffit d'utiliser l'identité entre les distributions de Fermi et de Bose

$$[1 - n_F(x)] [1 - n_F(y)] n_B(x+y) = n_F(x) n_F(y) [1 + n_B(x+y)] \quad (2.42)$$

Nous considérons maintenant le système en présence d'un champ électrique extérieur \vec{E} qui interagit avec les fermions de charge e et les bosons de charge $2e$. La variation d'impulsion pendant l'intervalle de temps Δt est $\hbar \Delta \vec{k} = e \vec{E} \Delta t$ pour les fermions et $\hbar \Delta \vec{q} = 2e \vec{E} \Delta t$ pour les bosons. Les équations de Boltzmann sont alors

$$\begin{cases} \partial_t F_k|_{coll} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k F_k \\ \partial_t B_q|_{coll} = \frac{2e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_q B_q \end{cases} \quad (2.43)$$

Nous voulons obtenir la conductivité électrique, c'est-à-dire la réponse linéaire du système par rapport au champ électrique. Nous considérons uniquement les termes linéaires en E . Nous développons les fonctions de distribution selon $f = f^0 + f^1 + \dots$. Il s'ensuit que f^1 est proportionnelle à E . Les équations de Boltzmann linéarisées s'écrivent alors

$$\begin{cases} \partial_t F_k^1|_{coll} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k F_k^0 \\ \partial_t B_q^1|_{coll} = \frac{2e}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_q B_q^0 \end{cases} \quad (2.44)$$

Il est alors loisible de définir les vitesses $\vec{v}_F(\vec{k})$ et $\vec{v}_B(\vec{q})$ pour les fermions et les bosons selon

$$\vec{v}_F(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \epsilon_k \quad \text{et} \quad \vec{v}_B(\vec{q}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_q E_q \quad (2.45)$$

de même que les dérivées des distributions, $L_F(x)$ et $L_B(x)$

$$L_F(x) = \frac{d}{dx} n_F(x) \quad \text{et} \quad L_B(x) = \frac{d}{dx} n_B(x) \quad (2.46)$$

Avec ces notations, les équations de Boltzmann s'écrivent

$$\begin{cases} \partial_t F_k^1|_{coll} = e L_F(\epsilon_k) \vec{E} \cdot \vec{v}_F(\vec{k}) \\ \partial_t B_q^1|_{coll} = 2e L_B(E_q) \vec{E} \cdot \vec{v}_B(\vec{q}) \end{cases} \quad (2.47)$$

La densité de courant est

$$\vec{j} = 2e \sum_k \vec{v}_F(\vec{k}) F_k^1 + 2e \sum_q \vec{v}_B(\vec{q}) B_q^1 \quad (2.48)$$

Nous évaluons les termes de collision en $0(E^2)$. Nous obtenons

$$\partial_t F_k^1|_{coll} = \sum_q W_{k,q}^B B_q^1 - F_k^1 \sum_q W_{k,q}^F - \sum_q W_{-k+q}^F F_{-k+q}^1 \quad (2.49)$$

$$\partial_t B_q^1|_{coll} = 2 \sum_k W_{k,q}^F F_k^1 - B_q^1 \sum_k W_{k,q}^B \quad (2.50)$$

où l'on a introduit les éléments de transition $W_{k,q}^F$ et $W_{k,q}^B$ définis par

$$W_{k,q}^F = 2\pi g^2 [n_B(E_q) + n_F(\epsilon_{-k+q})] \delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) \quad (2.51)$$

$$W_{k,q}^B = 2\pi g^2 [1 - n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{-k+q})] \delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) \quad (2.52)$$

Nous avons donc établi les équations de Boltzmann linéarisées pour les fonctions de distribution. Il faut maintenant tenter de trouver une solution à ces équations. Tout d'abord, on remarque que dans les expressions des termes de collision, il apparaît les termes diagonaux suivants

$$\frac{1}{\tau_F(k)} = \sum_q W_{k,q}^F \quad \text{et} \quad \frac{1}{\tau_B(q)} = \sum_k W_{k,q}^B \quad (2.53)$$

Ces quantités $\tau_F(k)$ et $\tau_B(q)$ sont les durées de vie à *une particule* pour les fermions et les bosons. Elles sont reliées directement aux self-énergies par $1/\tau_F(k) = \Gamma_F(k, \epsilon_k)$ et $1/\tau_B(q) = \Gamma_B(q, E_q)$ lorsque l'on évalue les self-énergies au deuxième ordre comme ici. Si on néglige les termes non diagonaux, on obtient immédiatement la solution des équations. Cette solution est identique à celle donnée par la formule de Kubo, lorsque l'on évalue les corrélations courant-courant sans corrections de vertex. Les termes non diagonaux dans les expressions des termes de collision permettent précisément de définir des durées de vie liées au transport. Nous cherchons donc des solutions de cette forme pour les fonctions de distribution, c'est-à-dire

$$\begin{cases} F_k^1 = -e L_F(\epsilon_k) \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_F(\vec{k}) \\ B_q^1 = -2e L_B(E_q) \vec{E} \cdot \vec{\Lambda}_B(\vec{q}) \end{cases} \quad (2.54)$$

où Λ_F et Λ_B ont le sens de libres parcours moyens, que l'on peut exprimer comme le produit d'une vitesse et d'une durée de vie, qui maintenant est reliée au transport. Dans cette approximation pour la forme de la solution, la conductivité se met sous la forme

$$\sigma_{\mu\nu} = -2e^2 \sum_k \Lambda_F^\nu(\vec{k}) v_F^\mu(\vec{k}) L_F(\epsilon_k) - 4e^2 \sum_q \Lambda_B^\nu(\vec{q}) v_B^\mu(\vec{q}) L_B(E_q) \quad (2.55)$$

Nous faisons l'hypothèse habituelle et simplificatrice, mais sans la justifier, que $\vec{\Lambda}_F(\vec{k}) = \Lambda_F(k) \vec{k}/k$ et que $\vec{\Lambda}_B(\vec{q}) = \Lambda_B(q) \vec{q}/q$. Dans ce cas on obtient des équations linéaires pour les Λ

$$\begin{pmatrix} H_{FF} & H_{FB} \\ H_{BF} & H_{BB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_F \\ \Lambda_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_F & 0 \\ 0 & L_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_F \\ v_B \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

Les éléments de la matrice H sont donnés par

$$\begin{aligned} H_{FF}^0(\vec{k}, \vec{k}') &= \delta(\vec{k} - \vec{k}') L_F(\epsilon_k) / \tau_F(k) \\ H_{FF}^1(\vec{k}, \vec{k}') &= W_{k', k'+k}^F L_F(\epsilon_{k'}) \cos(\vec{k}, \vec{k}') \\ H_{FB}(\vec{k}, \vec{k}') &= -2 W_{k, k'}^B L_B(E_{k'}) \cos(\vec{k}, \vec{k}') \\ H_{BB}(\vec{k}, \vec{k}') &= 2\delta(\vec{k} - \vec{k}') L_B(E_k) / \tau_B(k) \\ H_{BF}(\vec{k}, \vec{k}') &= -2 W_{k', k}^F L_F(\epsilon_{k'}) \cos(\vec{k}, \vec{k}') \end{aligned} \quad (2.57)$$

et $H_{FF} = H_{FF}^0 + H_{FF}^1$. Le cosinus entre les vecteurs \vec{k} et \vec{k}' est défini par

$$\cos(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{k k'} \quad (2.58)$$

La matrice H est alors une matrice symétrique dans l'espace des \vec{k} . Nous considérons les relations de dispersion pour des particules libres $\epsilon_k = z - \mu$ et $E_k = \Delta_B + \gamma_B z - 2\mu$ avec $z = \hbar^2 k^2 / 2m$. Dans ce cas, on peut facilement intégrer sur l'angle et obtenir des équations dans

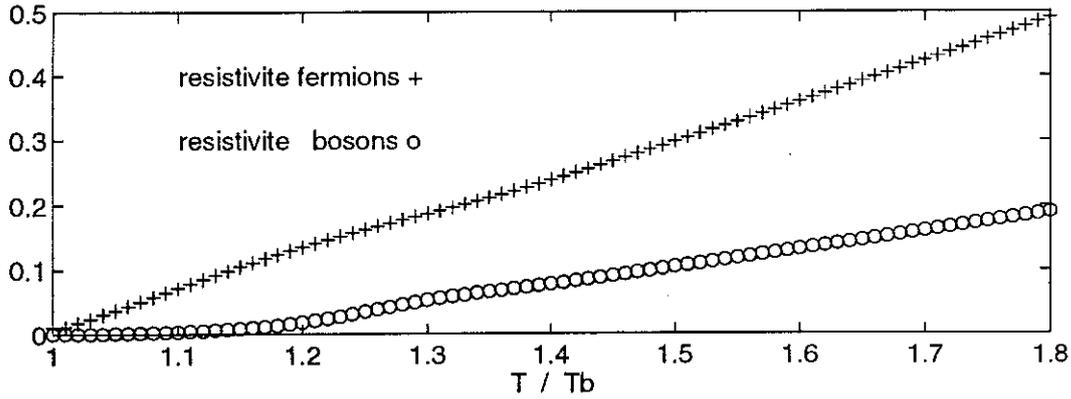


Figure 2.3: Resistivité pour les fermions et les bosons en fonction de la température T/T_B .

l'espace des z pour $\Lambda_F(z)$ et $\Lambda_B(z)$, mais la matrice H n'est plus une matrice symétrique. Pour les fermions, on trouve qu'il existe un seuil de diffusion en énergie $z_F = \Delta_B(1 - \gamma_B)/(1 - 2\gamma_B)$ au delà duquel les fermions ne sont plus affectés par les collisions: leurs temps de vie et leurs libres parcours moyens sont infinis, ils donnent une contribution infinie à la conductivité. De même, pour les bosons, on trouve un seuil de diffusion $z_B = 2\Delta_B/(1 - 2\gamma_B)$ avec les mêmes conséquences. Pour les autres énergies, inférieures aux seuils de diffusion, les équations restent bien définies et possèdent une solution. En fait, ces deux seuils de diffusion ont une origine commune qui est la conservation de l'énergie dans le facteur $\delta(E_q - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q})$. Notons que, lorsque la masse des bosons est deux fois celle des fermions ($\gamma_B = 1/2$), ces seuils de diffusion disparaissent, il y a des collisions à toute énergie. La conductivité, qui est une quantité scalaire s'écrit alors

$$\begin{aligned} \sigma = & -\frac{2e^2}{3} \int_0^\infty dz D(z) \Lambda_F(z) v_F(z) L_F(z - \mu) \\ & - \frac{4e^2}{3} \int_0^\infty dz D(z) \Lambda_B(z) v_B(z) L_B(\Delta_B + \gamma_B z - 2\mu) \end{aligned} \quad (2.59)$$

avec $v_F(z) = (2z/m)^{1/2}$ et $v_B(z) = \gamma_B(2z/m)^{1/2}$. A basse température, les fonctions $L_F(x)$ et $L_B(x)$ se comportent comme des fonctions delta (au signe près) centrées en $x = 0$. Seuls les fermions à la surface de Fermi et les bosons d'énergie inférieure à $k_B T$ entrent en jeu, et les seuils de diffusion ne sont pas importants. Sur la figure 2.3, nous montrons un résultat numérique pour la résistivité des fermions $\rho_F = 1/\sigma_F$ et celle des bosons $\rho_B = 1/\sigma_B$ en fonction de la température. Ce résultat a été obtenu en discrétisant l'espace des z en 600 points et en inversant directement la matrice H . Nous avons pris une densité d'état $D(z) = 8/\pi\sqrt{z(1-z)}$ pour des paramètres $\Delta_B = 0.4$, $\gamma_B = 0.4$ et $g^2 = 1$ ($\rho \sim g^2$ dans ce problème). Nous avons fixé une densité totale $n = 0.5$ et calculé le potentiel chimique pour chaque température. La figure montre que ρ_F et ρ_B s'annule pour $T = T_B$ et que les résistivités dépendent très fortement de la température. La solution numérique *brutale* des équations de Boltzmann qui consiste à discrétiser les énergies, puis à inverser une grosse matrice, s'avère peu précise. Comme dans le cas du mélange fermion boson, il faut utiliser des développements adéquats. C'est une voie que

nous n'avons pas poursuivie.

2.4 Self-énergie des fermions

La self-énergie des fermions représente la réponse du système lorsque l'on injecte un fermion de moment k et d'énergie ω . On peut retrouver la formule de la self-énergie, donnée par le développement de Feynman-Dyson pour la fonction de Green des fermions à l'ordre deux, au moyen du développement en perturbation de Brillouin-Wigner à l'ordre deux et des prescriptions du chapitre 4 du livre de Kadanoff et Baym[16]. On considère un fermion de moment k , l'énergie au second ordre est donnée par

$$\omega = \epsilon_k + \sum_n \frac{\langle k|H_1|n \rangle \langle n|H_1|k \rangle}{\omega - E_n} \quad (2.60)$$

avec $|k \rangle = c_{k\uparrow}^+ |0 \rangle$ qui est l'état avec le fermion que l'on a injecté, $|0 \rangle$ est l'état du système non perturbé et $|n \rangle$ est l'état intermédiaire avec l'énergie E_n . La figure 2.4 montre les deux processus qui interviennent dans la self-énergie de l'électron. Le premier processus possible est un processus direct. L'électron que l'on a injecté est caractérisé par (k, \uparrow) . Il s'associe avec un fermion présent dans le système qui est caractérisé par $(-k + q, \downarrow)$ et $n_F(\epsilon_{-k+q})$ pour donner un boson caractérisé par q et $[1 + n_B(E_q)]$ au moyen du hamiltonien H_1 . L'interaction préserve le moment et le spin et donne un facteur g^2/M , g étant la constante de couplage et M le nombre de sites du réseau. Les facteurs thermiques prennent en compte la statistique. Cette contribution du processus direct est

$$\frac{g^2}{M} \sum_q \frac{n_F(\epsilon_k) [1 + n_B(E_q)]}{\omega - E_q + \epsilon_{-k+q}} \quad (2.61)$$

Le second processus est indirect. Le fermion que l'on a injecté empêche les bosons de se désexciter en deux fermions en prenant un peu d'espace des phases. La modification de l'énergie du boson est au second ordre

$$\frac{g^2}{M} \sum_q \frac{[1 - n_F(\epsilon_{-k+q})] n_B(E_q)}{E_q - (\omega + \epsilon_{-k+q})} \quad (2.62)$$

Pour des fermions, il faut retirer cette contribution. On obtient alors

$$\omega = \epsilon_k + \frac{g^2}{M} \sum_q \frac{n_F(\epsilon_{-k+q}) + n_B(E_q)}{\omega - E_q + \epsilon_{-k+q}} \quad (2.63)$$

On obtient la correction en g^2 qui correspond à la self-énergie des fermions. On se propose maintenant de regarder l'espace des phases de cette self-énergie $\Sigma(k, \omega)$ pour des relations de dispersion quadratiques des particules libres. Cela permet d'intégrer sur l'angle et d'obtenir des conditions sur les énergies. On sépare la partie réelle et imaginaire $\Sigma^R(k, \omega) = R(k, \omega) - \frac{i}{2}\Gamma(k, \omega)$

$$\Gamma(k, \omega) = 2\pi \frac{g^2}{M} \sum_q [n_F(\epsilon_{-k+q}) + n_B(E_q)] \delta(\omega - E_q + \epsilon_{k-q}) \quad (2.64)$$

$$R(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} P P \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\Gamma(k, \omega')}{\omega - \omega'} \quad (2.65)$$

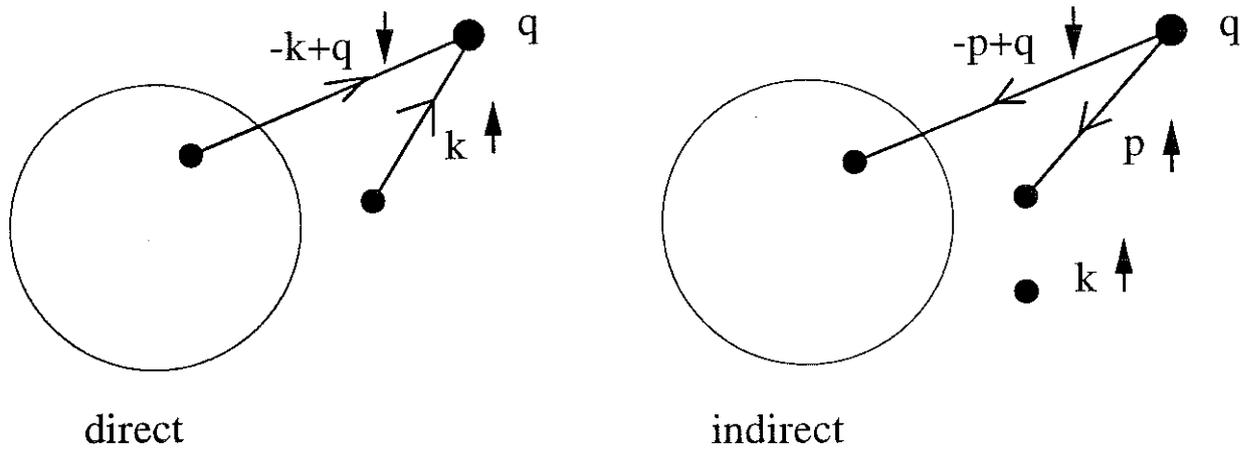


Figure 2.4: Processus direct et indirect pour le fermion

R est la transformée de Hilbert de Γ . Pour des relations de dispersion paraboliques

$$\epsilon_k = Fk^2 - \mu$$

$$E_q = \Delta_B - 2\mu + Bq^2$$

$$B/F = m_F/m_B = \gamma_B$$

on peut évaluer la somme sur q . On obtient

$$\begin{aligned} \Gamma(z, \omega) &= \frac{\pi g^2 A}{2\beta\gamma_B\sqrt{z}} \left\{ L\eta \frac{\sinh \frac{1}{2}\beta(\Delta_B - 2\mu + \gamma_B \epsilon_2)}{\sinh \frac{1}{2}\beta(\Delta_B - 2\mu + \gamma_B \epsilon_1)} - L\eta \frac{\cosh \frac{1}{2}\beta(\Delta_B - 2\mu + \gamma_B \epsilon_2 - \omega)}{\cosh \frac{1}{2}\beta(\Delta_B - 2\mu + \gamma_B \epsilon_1 - \omega)} \right\} \\ &= 0 \text{ si } z < z_0 \end{aligned} \quad (2.66)$$

avec

$$z_0 = \frac{1 - \gamma_B}{\gamma_B} (\omega - \Delta_B + \mu)$$

$$\epsilon_1 = \left[\frac{\sqrt{z}}{1 - \gamma_B} - \frac{\sqrt{\gamma_B z - \gamma_B z_0}}{1 - \gamma_B} \right]^2$$

$$\epsilon_2 = \left[\frac{\sqrt{z}}{1 - \gamma_B} + \frac{\sqrt{\gamma_B z - \gamma_B z_0}}{1 - \gamma_B} \right]^2$$

$$z = Fk^2$$

$$A = \frac{\Omega \sqrt{2} m_F^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3}$$

A température nulle, l'expression devient

$$\Gamma(z, \omega) = \frac{\pi g^2 A}{2\sqrt{z}} \left[\min \left(\epsilon_2, \frac{\omega - \Delta_B + 2\mu}{\gamma_B} \right) - \min \left(\epsilon_1, \frac{\omega - \Delta_B + 2\mu}{\gamma_B} \right) \right] \quad (2.67)$$

$$= 0 \text{ si } z < z_0 \quad (2.68)$$

Pour $\gamma_B = 0$, l'intégrale sur l'angle disparaît et on obtient

$$\Gamma(z, \omega) = 2\pi g^2 A [n_F(E_0 - \omega) + n_B(E_0)] \sqrt{E_0 - \omega + \mu} \quad (2.69)$$

$$= 0 \text{ si } z < z_0 \quad (2.70)$$

La condition $z > z_0$ pour avoir $\Gamma \neq 0$ correspond à l'existence d'une solution pour \mathbf{q} dans l'équation $\omega + \epsilon_{-k+q} - E_q = 0$. A température nulle, Γ est nulle pour $\omega < \Delta_B - 2\mu$ ce qui correspond à l'énergie minimum pour créer un boson à partir d'un électron à la surface de Fermi par le processus direct $f + f \rightarrow b$. A température non nulle, l'énergie minimum pour créer un boson est diminuée, car l'électron à la surface de Fermi possède l'énergie $k_B T$, mais d'autre part, il y a une contribution du processus indirect $b \rightarrow f + f$ car le nombre d'occupation des bosons est alors non nul.

Dans la limite $\gamma_B \rightarrow 0$, la dépendance en \mathbf{k} disparaît et Γ devient une fonction de ω uniquement. Du fait que la somme sur l'angle disparaît, on peut aller plus loin que l'ordre 0 pour évaluer la self-énergie. Si on note $N(\omega)$ la densité des fermions définie par

$$N(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_k A(k, \omega) \quad (2.71)$$

alors, on obtient en gardant toujours l'ordre zéro pour la fonction de Green des bosons, avec une seule énergie d'excitation E_0

$$\Gamma(\omega) = 2\pi g^2 [n_F(E_0 - \omega) + n_B(E_0)] N(E_0 - \omega) \quad (2.72)$$

On a alors une solutions self-consistante pour évaluer Γ et N numériquement au moyen des fonctions spectrales. Pour $\omega = 0$, c'est-à-dire à l'énergie de Fermi, on obtient

$$\begin{aligned} \Gamma(\omega = 0) &= 2\pi g^2 [n_F(E_0) + n_B(E_0)] N(E_0) \\ &= 2\pi g^2 \frac{1}{\sinh \beta E_0} N(E_0) \end{aligned} \quad (2.73)$$

$$\simeq 2\pi g^2 \frac{k_B T}{E_0} N(E_0) \text{ si } E_0 \ll k_B T$$

2.5 Self-énergie des bosons

Si l'on fait le même raisonnement pour décomposer la self-énergie du propagateur pour le boson, le processus direct correspond à $b \rightarrow f + f$ qui donne l'énergie au second ordre pour un boson dans l'état q

$$\frac{g^2}{M} \sum_k \frac{[1 - n_F(\epsilon_k)] [1 - n_F(\epsilon_{-k+q})]}{\omega - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}} \quad (2.74)$$

alors que le processus indirect correspond à la modification de l'énergie des fermions due à la présence du boson dans le mode q , pour les processus $f + f \rightarrow b$ dont l'énergie au second ordre est donnée par

$$\frac{g^2}{M} \sum_k \frac{n_F(\epsilon_k) n_F(\epsilon_{-k+q})}{\epsilon_k + \epsilon_{-k+q} - \omega} \quad (2.75)$$

Pour des bosons, il faut ajouter cette contribution, on obtient alors la self-énergie des bosons

$$\frac{g^2}{M} \sum_k \frac{1 - n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{-k+q})}{\omega - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}} \quad (2.76)$$

Comme pour la self-énergie des fermions, on peut effectuer l'intégrale sur l'angle en prenant des relations de dispersion quadratiques. La partie imaginaire de la self-énergie est

$$\Gamma(q, \omega) = 2\pi \frac{g^2}{M} \sum_k \tanh \frac{1}{2} \beta \epsilon_k \delta(\omega - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q}) \quad (2.77)$$

On obtient

$$\Gamma(z, \omega) = \frac{\pi g^2 A}{\sqrt{z} \beta} L n \frac{\cosh \frac{1}{2} \beta (\epsilon_2 - \mu)}{\cosh \frac{1}{2} \beta (\epsilon_1 - \mu)} \quad (2.78)$$

$$= 0 \text{ si } z > z_0 \quad (2.79)$$

avec

$$z_0 = 2\omega + 4\mu$$

$$\epsilon_1 = \left[\frac{\sqrt{z}}{2} - \frac{\sqrt{z_0 - z}}{2} \right]^2$$

$$\epsilon_2 = \left[\frac{\sqrt{z}}{2} + \frac{\sqrt{z_0 - z}}{2} \right]^2$$

$$z = Fq^2$$

A température nulle, l'expression devient

$$\Gamma(z, \omega) = \frac{\pi g^2 A}{2\sqrt{z}} (|\epsilon_2 - \mu| - |\epsilon_1 - \mu|) \quad (2.80)$$

$$= 0 \text{ si } z > z_0 \quad (2.81)$$

Pour le mode $\mathbf{q} = 0$, on obtient

$$\Gamma(0, \omega) = 2\pi g^2 A \sqrt{\mu + \omega/2} \tanh \frac{1}{2} \beta \frac{\omega}{2} \quad (2.82)$$

La self-énergie ne dépend pas du rapport des masses γ_B . La condition $z > z_0 \rightarrow \Gamma = 0$ vient de la conservation de l'énergie $\omega - \epsilon_k - \epsilon_{-k+q} = 0$. Pour $q = 0$, Γ est toujours nulle en $\omega = 0$.

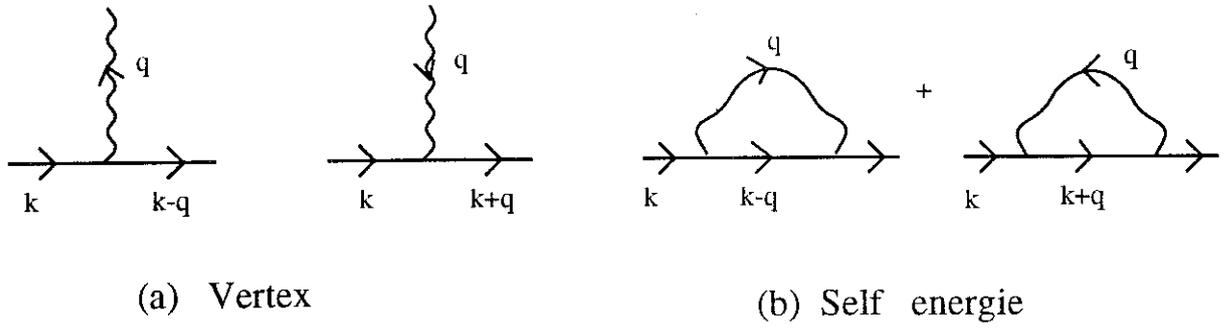


Figure 2.5: Vertex et self-énergie de l'électron à l'ordre deux pour une interaction électron-phonon.

2.6 Comparaison avec le couplage électron-phonon

Du fait que les diagrammes d'ordre deux du modèle Boson-Fermion ressemble fortement à ceux du couplage électron-phonon, nous rappelons quelques résultats sur le couplage électron-phonon. Le hamiltonien le plus simple qui décrit le couplage électron-phonon est de la forme

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_q E_q b_q^+ b_q + M^{-1/2} \sum_{k,q,\sigma} g_q c_{k+q,\sigma}^+ c_{k,\sigma} (b_q + b_{-q}^+) \quad (2.83)$$

Les vertex de l'interaction sont représentés sur la figure 2.5(a). Comme pour le modèle Boson-Fermion, il y a deux lignes de fermions et une ligne de boson, mais ils diffèrent par le fait que les phonons ne sont pas des particules chargées (leur potentiel chimique est nul). La self-énergie des fermions au second ordre est représentée sur la figure 2.5(b). Son expression est

$$\Sigma(k, \bar{\nu}) = - \sum_q \frac{g_q}{M} \left[\frac{n_B(E_q) + n_F(\epsilon_{k+q})}{i\bar{\nu} - E_q + \epsilon_{k+q}} + \frac{n_B(E_q) + n_F(-\epsilon_{k-q})}{i\bar{\nu} + E_q + \epsilon_{k-q}} \right] \quad (2.84)$$

La largeur, pour la self-énergie retardée est alors donnée par $\Gamma(k, \omega) = -2 \text{Im} \Sigma(k, i\bar{\nu} = -\omega - i\eta)$. A température nulle, pour des phonons sans dispersion $E_q = E_0$ et un couplage constant $g_q = g$ (modèle d'Einstein) on obtient

$$\Gamma(\omega) = 2\pi g^2 [n_F(\omega + E_0) D(\omega + E_0) + n_F(E_0 - \omega) D(\omega - E_0)] \quad (2.85)$$

où la densité d'états est définie par $D(\omega) = M^{-1} \sum_k \delta(\omega - \epsilon_k)$ et commence en $\omega = -\mu$. On a pris $n_B(E_0) = 0$ alors que les fonctions de Fermi se réduisent à $n_F(x) = \theta(-x)$. La largeur $\Gamma(\omega)$ est non nulle pour $\omega \in [-E_0 - \mu; -E_0]$ et $\omega > E_0$ comme le montre schématiquement la figure 2.6. Tant que $|\omega| < E_0$, la fonction spectrale des fermions va être bien définie. La partie réelle de la self-énergie est, dans la limite où l'on se restreint aux deux singularités en $\omega = \pm E_0$ et pour une densité d'états constante, donnée par

$$R(\omega) \simeq g^2 D(0) \text{Ln} \left| \frac{\omega - E_0}{\omega + E_0} \right| \quad (2.86)$$

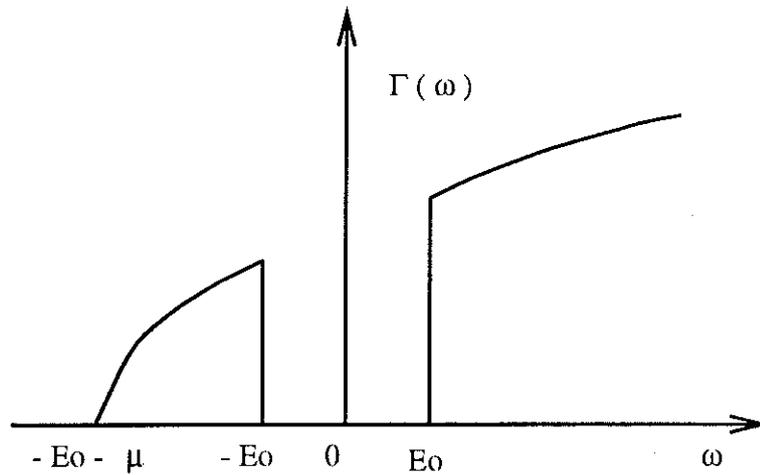


Figure 2.6: Largeur $\Gamma(\omega)$ des électrons pour une interaction électron-phonon. E_0 est la fréquence des phonons pour un modèle d'Einstein.

Dans le cas du couplage électron-phonon, l'énergie E_0 ne dépend pas de la température, alors que dans le modèle Boson-Fermion, on a $E_0 = \Delta_B - 2\mu$ qui varie en fonction de la température et du remplissage du système via le potentiel chimique. D'autre part, dans le modèle Boson-Fermion, le facteur de Bose $n_B(E_q)$ dans la self-énergie peut devenir très grand quand $E_0 \rightarrow 0$, correspondant à la condensation de Bose. Dans ce cas, la self-énergie devient singulière: la théorie des perturbations n'est plus valable. Dans le cas des phonons, il n'a pas de condensation de Bose des phonons, qui ne possèdent pas de potentiel chimique.

2.7 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons essayé d'analyser l'espace de phase du modèle Boson-Fermion. Nous avons d'abord considéré un mélange de fermions et de bosons sans interaction. Nous avons montré que le sous-système des bosons exhibe une condensation de Bose-Einstein, à trois dimensions, si les bosons possèdent un spectre quadratique et si la densité de particules dans le système est supérieure à une densité critique n_{cr} liée au niveau bosonique Δ_B . Le développement à basse température nous a permis de montrer que dans le cas d'une condensation de Bose-Einstein, le sous-système des bosons se comportait pratiquement comme un système indépendant avec une densité effective de bosons $n_{bos} \simeq n - n_{cr}$ alors que le nombre de fermions était pratiquement constant, $n_{fer} \simeq n_{cr}$. Nous avons montré que la nature de la transition n'est pas affectée et nous avons obtenu les premières corrections. Dans un deuxième temps, nous avons pris en compte le couplage dans l'approximation des collisions qui permet d'obtenir le temps de vie des fermions et des bosons dans notre système. Nous avons calculé les self-énergies et obtenu les seuils de collisions. Toujours dans la même approximation, nous avons dérivé les équations de Boltzmann et proposé une solution dans une hypothèse de relaxation diagonale. Nous avons montré que ces solutions possédaient des seuils de collisions que nous avons donnés.

L'esprit de ce chapitre était de donner une vision intuitive du modèle Boson-Fermion. Nous avons tenté de mettre l'accent sur le rôle très important du potentiel chimique et sur l'originalité du vertex Boson-Fermion pour ce modèle. Les dérivations des self-énergies et des équations de Boltzmann à l'aide de la règle d'or de Fermi ont été introduites dans un but purement illustratif. Au chapitre 4 nous proposerons une méthode numérique pour évaluer les self-énergies dans une approche self-consistante.

Chapitre 3

La Phase Superfluide

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'état superfluide du modèle Boson-Fermion et nous appliquons les méthodes standard pour la supraconductivité d'un système de fermions et pour la superfluidité d'un système de bosons [3]. Dans un premier temps, nous considérons l'instabilité supra, c'est-à-dire que nous n'introduisons pas de paramètres d'ordre, mais que nous déterminons la transition comme la divergence d'une susceptibilité [23]. Nous analysons la fonction de Green à une particule pour les fermions et les bosons, ainsi que la fonction de Green à deux particules pour les paires de Cooper. Dans un deuxième temps, nous introduisons explicitement les paramètres d'ordre supra et superfluide pour les fermions et bosons, dans le cadre de la théorie du champ moyen. Nous obtenons les équations self-consistantes de la théorie ainsi que le spectre d'excitation à une particule. Nous calculons alors les excitations collectives par rapport à l'état superfluide pour le système de Bose. Nous analysons ces résultats au moyen du formalisme fonctionnel qui permet d'interpréter de façon claire les résultats obtenus pour la phase superfluide et d'obtenir le spectre physique des excitations collectives. Finalement, nous discutons des travaux de Friedberg et Lee qui ont appliqué le modèle Boson-Fermion pour expliquer la nature localisée des supras à hautes températures critiques.

3.2 Instabilité supra

Dans la théorie BCS-Bogoliubov, la supraconductivité est vue comme une instabilité du liquide de Fermi par rapport à la formation de paires de Cooper à une certaine température T_C . La paire de Cooper de moment \mathbf{q} correspond à l'opérateur $\eta_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}$. Pour une transition de phase du second ordre, le paramètre d'ordre $\langle \eta_{\mathbf{q}} \rangle$ est couplé à un champ extérieur conjugué $h_{\mathbf{q}}$ de sorte que le hamiltonien devient $H - \sum_{\mathbf{q}} (h_{\mathbf{q}}^* \eta_{\mathbf{q}} + \eta_{\mathbf{q}}^* h_{\mathbf{q}})$. La susceptibilité $\chi_{\mathbf{q}}$ caractérisant la réponse à ce champ extérieur (non physique) est alors $\chi_{\mathbf{q}} \sim \langle \eta_{\mathbf{q}} \eta_{\mathbf{q}}^* \rangle$. La formation des paires de Cooper est alors caractérisée par la divergence de cette susceptibilité. C'est le critère de Thouless qui établit que la transition supra est associée au pôle $\mathbf{q} = 0$ et $\omega = 0$ dans la fonction de Green des paires. De même, pour les bosons, la superfluidité est associée à un pôle de la fonction de Green des bosons à une particule, le paramètre d'ordre étant directement l'opérateur de Bose $\langle b_{\mathbf{q}} \rangle$. En ce qui concerne la fonction de Green à une particule des fermions, la théorie standard de la supra ne prévoit pas de modification pour $T \geq T_C$.

Dans ce qui suit, nous analysons les self-énergies à une particule pour les fermions et les bosons, puis nous considérons la fonction de Green à deux particules qui intervient dans le critère de Thouless.

3.2.1 Self-énergie des fermions

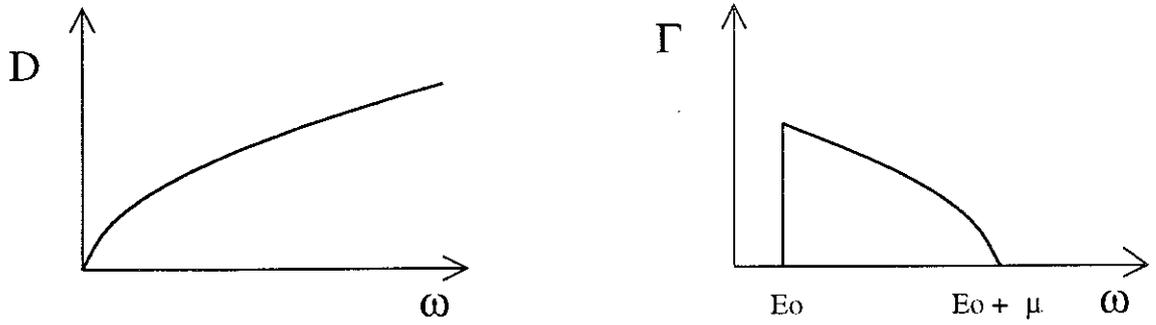
Nous considérons la self-énergie des fermions au second ordre. En l'absence de bosons dans le système, le facteur n_B dans le numérateur de la self-énergie disparaît. Si, de plus, on remplace la relation de dispersion par un seul niveau (bosons parfaitement localisés) alors $E_{\mathbf{q}} = E_0$ et l'expression de la self-énergie se réduit à

$$\Sigma_F(k, \omega) = \Sigma(\omega) = \frac{g^2}{M} \sum_{\mathbf{q}} \frac{n_F(\epsilon_{\mathbf{q}})}{\omega - E_0 + \epsilon_{\mathbf{q}} + i\eta} \quad (3.1)$$

On introduit la largeur $\Gamma(k, \omega) = -2\text{Im} \Sigma(k, \omega)$ et la partie réelle de la self-énergie $R(k, \omega)$. On a alors

$$\begin{aligned} \Gamma(k, \omega) &= 2\pi \frac{g^2}{M} \sum_{\mathbf{q}} n_F(\epsilon_{\mathbf{q}}) \delta(\omega - E_0 + \epsilon_{\mathbf{q}}) \\ &= 2\pi g^2 n_F(E_0 - \omega) D(E_0 - \omega) \end{aligned} \quad (3.2)$$

où $D(\omega)$ est la densité d'états des fermions libres. $D(\omega)$, dans cette définition, est non nulle entre $-\mu$ et $\epsilon_0 - \mu$, où ϵ_0 est la largeur de la bande de fermions et μ est le potentiel chimique. Si $\Gamma(\omega)$ est nulle, alors la durée de vie est infinie. On voit que $\Gamma(\omega)$ est non nulle si $D(E_0 - \omega)$ et $n_F(E_0 - \omega)$ sont tous les deux non nuls. A température nulle, le facteur de Fermi impose d'avoir $\omega > E_0$, et la densité d'états impose d'avoir $\omega < E_0 + \mu$ (l'autre limite $\omega > E_0 - \epsilon_0 + \mu$ est supposée toujours satisfaite). Donc, en première approximation, $\Gamma(\omega)$ est non nulle sur une plage d'énergie $\omega \in [E_0, E_0 + \mu]$. Cela correspond au processus direct où le fermion d'énergie ω s'associe avec un fermion de la mer de Fermi dont l'énergie est comprise entre $-\mu$ et 0 pour donner un boson d'énergie E_0 . La conservation de l'énergie de ce processus donne les limites où

Figure 3.1: Densité d'états et largeur $\Gamma(\omega)$ pour des particules libres.

$\Gamma(\omega)$ est non nulle, c'est-à-dire que le processus de désexcitation est permis. Pour des particules libres, on a la relation de dispersion $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$ et la densité d'états correspondante est

$$D(\omega) = \frac{\Omega m^{3/2} \sqrt{2}}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\mu + \omega} \quad (3.3)$$

La figure 3.1 montre la densité d'états et la largeur $\Gamma(\omega)$ correspondant à cette approximation. La partie réelle de la self-énergie $R(k, \omega)$ est obtenue par transformée de Hilbert de la largeur $\Gamma(\omega)$:

$$R(k, \omega) = PP \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega' \Gamma(k, \omega')}{2\pi \omega - \omega'} \quad (3.4)$$

Comme $\Gamma(\omega)$ est discontinue en E_0 et $E_0 + \mu$, la partie réelle $R(\omega)$ va présenter des discontinuités logarithmiques en ces points. Dans ce qui suit, on illustre ce comportement en prenant une largeur $\Gamma(\omega)$ qui est constante entre E_0 et $E_0 + \mu$. On pose

$$\begin{aligned} \Gamma(\omega) &= 2\pi g^2 \quad \text{si } E_0 < \omega < E_0 + \mu \\ &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned} \quad (3.5)$$

On obtient alors la partie réelle par transformée de Hilbert

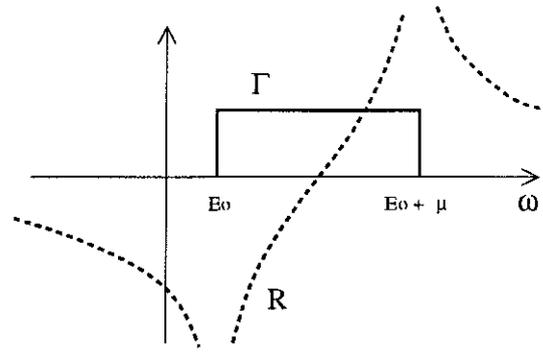
$$R(\omega) = g^2 L n \left| \frac{\omega - E_0}{\omega - E_0 - \mu} \right| \quad (3.6)$$

où l'on a pris une densité d'états constante de largeur unité. La figure 3.2 montre les deux fonctions. La fonction spectrale de l'électron est donnée par

$$A(k, \omega) = \frac{\Gamma(\omega)}{[\omega - \epsilon_k - R(\omega)]^2 + \frac{1}{4}\Gamma(\omega)^2} \quad (3.7)$$

Cette fonction spectrale permet d'évaluer les nombres d'occupation n_k

$$n_k = \langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) A(k, \omega) \quad (3.8)$$

Figure 3.2: Approximation de $\Gamma(\omega)$ et $R(\omega)$.

où $n_F(\omega)$ est la fonction de Fermi. A température nulle, la fonction de Fermi dans l'intégrale est nulle pour $\omega > 0$.

$$n_k = \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega}{2\pi} A(k, \omega) \quad (3.9)$$

Or pour $\omega < 0$, on a toujours $\Gamma(\omega)$ qui est nulle, car le niveau des bosons E_0 est toujours positif. La fonction spectrale est donc une fonction delta pour $\omega < 0$. Il faut alors évaluer

$$n_k = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \delta(\omega - \epsilon_k - R(\omega)) n_F(\omega) \quad (3.10)$$

On utilise la formule usuelle

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - f(x)) g(x) = \sum_j \frac{g(x_j)}{|f'(x_j)|} \quad (3.11)$$

où les x_j vérifient l'équation $x_j - f(x_j) = 0$. On obtient alors

$$n_k = \frac{n_F(\omega_k)}{1 - \left. \frac{dR}{d\omega} \right|_{\omega_k}} \quad (3.12)$$

avec ω_k qui est la solution de l'équation $\omega_k - \epsilon_k - R(\omega_k) = 0$. La figure 3.3 représente la solution graphique de cette équation. On trace la fonction $R(\omega)$ et la droite $y = \omega - \epsilon_k$. Il y a en général plusieurs solutions ω_k , mais comme n_k est proportionnel à $n_F(\omega_k)$, seule la solution $\omega_k < 0$ est prise en compte. On peut remarquer que la fonction spectrale, dans notre exemple, s'écrit

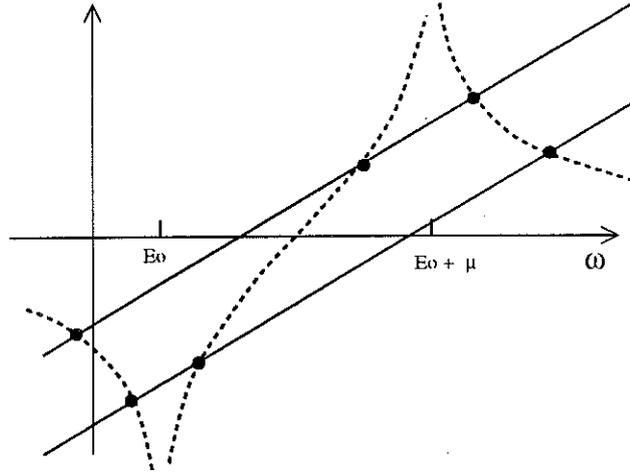
$$A(k, \omega) = Z_k 2\pi \delta(\omega - \omega_k) \quad (3.13)$$

avec

$$Z_k = \frac{1}{1 - \left. \frac{dR}{d\omega} \right|_{\omega_k}} \quad (3.14)$$

Z_k est le *résidu*, ou le poids spectral du pôle. La fonction de Green retardée s'écrit alors

$$G(k, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - \omega_k + i\eta} \quad (3.15)$$

Figure 3.3: Solution graphique de l'équation $\omega - \epsilon_k = R(\omega)$

De même, le nombre d'occupation s'écrit $n_k = Z_k n_F(\omega_k)$ avec la condition $\omega_k < 0$. On voit sur la solution graphique qu'il existe toujours une solution pour $\epsilon_k < \epsilon_p$, c'est-à-dire pour $\omega_k < \omega_p = 0$. Le moment p est donc simplement donné par $\epsilon_p = -R(0)$. On a alors

$$\begin{aligned} \text{si } \epsilon_k < \epsilon_p \text{ alors } \omega_k < 0 \text{ et } n_F(\omega_k) = 1 &\rightarrow n_k \neq 0 \\ \text{si } \epsilon_k > \epsilon_p \text{ alors } \omega_k > 0 \text{ et } n_F(\omega_k) = 0 &\rightarrow n_k = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Pour notre exemple, on obtient explicitement

$$\begin{aligned} \epsilon_p &= g^2 L n \left| \frac{E_0 + \mu}{E_0} \right| \\ \frac{dR}{d\omega} \Big|_0 &= -g^2 \left(\frac{1}{E_0} - \frac{1}{E_0 - \mu} \right) \\ n_p &= \frac{1}{1 + g^2 \left(\frac{1}{E_0} - \frac{1}{E_0 - \mu} \right)} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Le nombre d'occupation n_k est discontinu pour $\epsilon_k = \epsilon_p$, comme dans un liquide de Fermi et ϵ_p correspond à la renormalisation du potentiel chimique par l'interaction $\mu \rightarrow \mu - R(0)$. Dans la limite $E_0 \rightarrow 0$, on voit sur notre exemple que $\epsilon_p \rightarrow \infty$ et $n_p \rightarrow 0$. Il n'y a plus de discontinuité dans les nombres d'occupation. Pour des solutions $\omega_k \simeq 0$ on obtient

$$\omega_k \simeq -\mu e^{-\frac{\epsilon_k}{g^2}} \quad (3.18)$$

Dans cette discussion, nous avons considéré uniquement la solution pour la partie réelle donnée par la construction graphique. Nous verrons dans le chapitre sur la phase normale, une solution numérique de ce modèle pour des pôles complexes.

Si l'on revient à l'expression complète de la self-énergie, on voit que la limite $E_0 \rightarrow 0$ rend singulier le terme $n_B(E_0)$. La partie singulière de la self-énergie est

$$\Sigma(k, \omega) = \frac{g^2}{M} \frac{n_B(E_0)}{\omega - E_0 + \epsilon_k + i\eta} \quad (3.19)$$

dans la limite $E_0 \rightarrow 0$, on doit remplacer la distribution de Bose pour le mode $q = 0$ par le nombre de bosons condensés Mn_0 , où n_0 est la densité du condensat, soit $n_B(q) = n_B(q) + \delta_{q,0}(Mn_0 - n_B(q))$. L'expression devient

$$\Sigma(k, \omega) = \frac{n_0 g^2}{\omega + \epsilon_k + i\eta} \quad (3.20)$$

et la fonction de Green du fermion se réduit à

$$G(k, \omega) = \frac{\omega + \epsilon_k}{\omega^2 - \epsilon_k^2 - n_0 g^2} \quad (3.21)$$

C'est la fonction de Green du modèle BCS avec les deux pôles en $\omega = \pm\gamma_k$ avec $\gamma_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + n_0 g^2}$, le gap BCS étant $\sqrt{n_0 g^2}$. Ce résultat est consistant avec la forme de n_k qui n'est plus discontinu, comme dans le modèle de BCS où l'on a $n_k = \frac{1}{2}(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k})$

Le système de fermion possède une gamme d'énergie où la durée de vie est finie. Cette plage d'énergie commence en $\omega = E_0$ et finit en $\omega = E_0 + \mu$ et correspond au processus direct. Le système est stable dans le sens où tous les pôles d'énergies < 0 (l'énergie de Fermi) sont réels. Quand le bas de la bande de bosons s'annule, $E_0 \rightarrow 0$, alors le système devient instable par rapport à un état supra avec la formation d'un gap supra en $\omega = 0$.

3.2.2 Self-énergie des bosons

Comme pour le cas des fermions, nous considérons la self-énergie des bosons au second ordre. Pour le mode $q = 0$, on obtient

$$\Gamma(\omega) = 2\pi \frac{g^2}{M} \sum_k \tanh \frac{1}{4} \beta \omega \delta(\omega - 2\epsilon_k) \quad (3.22)$$

et

$$R(\omega) = \frac{g^2}{M} PP \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \epsilon_k}{\omega - 2\epsilon_k} \quad (3.23)$$

On voit que Γ est nulle pour $\omega = 0$, ce qui correspond à une durée de vie infinie, et l'équation pour le pôle est

$$E_0 = \frac{g^2}{M} PP \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \epsilon_k}{2 \epsilon_k} \quad (3.24)$$

Cette équation correspond à l'instabilité par rapport à la formation d'un condensat dans le mode $\mathbf{q} = 0$. Elle détermine donc la température critique T_c en fonction du potentiel chimique μ . En première approximation, on obtient $E_0 \simeq \beta g^2 D(0)/4$ où $D(0)$ est la densité d'états des fermions pour l'énergie $\omega = 0$ (par rapport au potentiel chimique avec cette définition).

Pour les modes $\mathbf{q} \neq 0$, le dénominateur de la fonction de Green, à T_c , se met sous la forme $\omega(1 + a) - abq^2$ avec

$$a = \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \epsilon_k}{4 \epsilon_k^2} \quad (3.25)$$



Figure 3.4: Diagrammes pour le propagateur à deux particules

et $b = \hbar^2/2m$. Le spectre des bosons est alors quadratique et le système est capable d'exhiber une condensation de Bose à T_c selon l'argument d'espace de phase (dans le cas d'un système à trois dimensions) dans l'approximation où la partie imaginaire Γ peut être négligée. Remarquons, d'autre part, que le coefficient a est mal défini.

3.2.3 Fonction de Green à deux particules : critère de Thouless

Pour un système de fermions en interaction, l'instabilité supra est une conséquence de l'appariement des électrons en paires de Cooper. Cette instabilité peut être déterminée au moyen du propagateur à deux électrons $F(k, k', q, \sigma)$ défini dans le formalisme en température par

$$F(k, k', q, \sigma) = \langle T[c_{-k\downarrow}(\sigma)c_{k+q\uparrow}(\sigma)c_{k'+q\uparrow}^{\dagger}c_{-k'\downarrow}^{\dagger}] \rangle \quad (3.26)$$

Le propagateur non perturbé est alors donné par

$$F^0(k, q, \mu) = \frac{1}{\beta} \frac{1 - n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{-k+q})}{i\mu + \epsilon_k + \epsilon_{-k+q}} \quad (3.27)$$

Pour évaluer le propagateur, on procède de façon analogue au cas où il y a une interaction à deux corps entre les électrons qui donne des diagrammes en échelle [36]. Dans notre cas, du fait de l'interaction d'échange, les électrons doivent se mettre en paires pour interagir via la formation d'un boson possédant le moment du centre de masse de la paire. On est donc conduit à sommer une série de diagrammes constitués de diagrammes F^0 reliés entre eux par des lignes de bosons de moment q comme le montre la figure 3.4. On obtient alors

$$F(k, k', q, \omega) = \delta_{k,k'} F^0(k, q, \omega) + F^0(k, q, \omega) \frac{g^2 B^0(q, \omega)}{1 - g^2 \bar{F}^0(q, \omega) B^0(q, \omega)} F^0(k', q, \omega) \quad (3.28)$$

avec $\bar{F}^0(q, \omega) = \sum_k F^0(k, q, \omega)$. On peut aussi mettre ce résultat sous la forme

$$F(k, k', q, \omega) = \delta_{k,k'} F^0(k, q, \omega) + g^2 F^0(k, q, \omega) B^0(q, \omega) \sum_p F(p, k', q, \omega) \quad (3.29)$$

Cette forme permet de déduire la matrice T ou le potentiel V qui sont définis par les formes opérationnelles des fonctions de Green

$$F = F^0 + F^0 T F^0 \quad (3.30)$$

$$F = F^0 + F^0 V F \quad (3.31)$$

En faisant la correspondance $F(k, k', q, \omega) = \langle k|F|k' \rangle$, pour q et ω donnés, on obtient ainsi pour la matrice T et le potentiel V :

$$T(q, \omega) = g^2 \frac{B^0(q, \omega)}{1 - g^2 \bar{F}^0(q, \omega) B^0(q, \omega)} \quad (3.32)$$

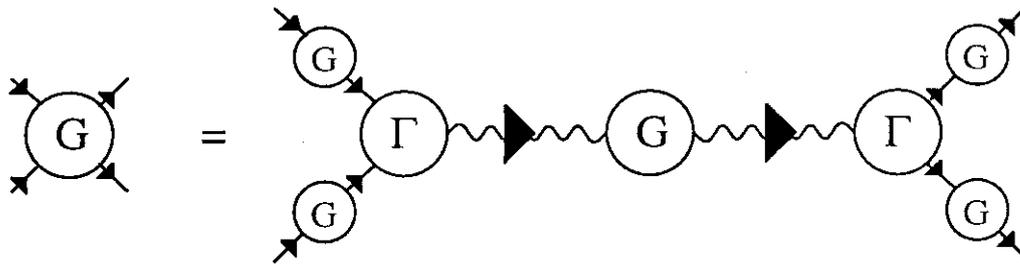


Figure 3.5: Relation entre la fonction de Green de paires et la fonction de Green des bosons

et

$$V(q, \omega) = g^2 B^0(q, \omega) \quad (3.33)$$

On obtient ainsi que le potentiel $V(q, \omega)$ est relié au propagateur nu des bosons, alors que la matrice $T(q, \omega)$ est reliée au propagateur habillé des bosons pour les mêmes types de diagrammes. Pour une énergie nulle (paires à la surface de Fermi), l'interaction est

$$t_q = -\frac{g^2}{E_0 + \Sigma_B(q, 0)} \quad (3.34)$$

On obtient une attraction entre les paires qui est maximum pour $\mathbf{q} = 0$ et qui diverge lorsque le pôle est vérifié. La longueur de corrélation ξ est alors donnée par

$$\xi^2 = \frac{1}{E_0 + \Sigma_B(0, 0)} \frac{\partial \Sigma_B}{\partial q^2} \quad (3.35)$$

Cette longueur de corrélation diverge à T_c . Le critère de Thouless pour avoir une instabilité supra correspond à avoir un pôle pour la fonction de Green des paires en $\omega = 0$ et $\mathbf{q} = 0$. Dans notre cas ce pôle intervient dans la fonction de Green des bosons.

Dans le cas général, la fonction de Green à deux particules et la fonction de Green des bosons possèdent les mêmes pôles. Ces deux fonctions de Green diffèrent par des vertex Γ (l'interaction g renormalisée qui dépend des énergies et des moments). La figure 3.5 montre la relation diagrammatique. Cette relation implique que la supraconductivité des fermions et que la superfluidité des bosons correspondent à la même instabilité dans notre modèle.

Dans l'article de Thouless [36], l'instabilité supra correspond à une divergence du potentiel thermodynamique. Dans la théorie standard de la supra, on considère généralement une interaction électron-électron décrite par un potentiel entre paires. Le potentiel thermodynamique peut alors s'exprimer à l'aide de la fonction de Green à deux particules, via la méthode de la constante du couplage [36, 24]. Dans notre cas, c'est la fonction de Green des bosons qui entre en jeu. Au niveau RPA que l'on a considéré jusqu'ici, on peut aussi évaluer le potentiel Grand Canonique en utilisant la méthode de la constante du couplage décrite en appendice. Dans ce cas, on a

$$\langle \lambda H_1 \rangle = -4 \text{Im} \sum_q \int \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) \frac{\Sigma_B(q, \omega)}{\omega - E_0 - \Sigma_B(q, \omega)} \quad (3.36)$$

et

$$J - J_0 = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda H_1 \rangle \quad (3.37)$$

Du fait qu'au niveau RPA, on a $\Sigma_B \sim \lambda^2$ on obtient

$$J - J_0 = 2 \operatorname{Im} \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} \operatorname{Ln} \left(\frac{\omega - E_0 - \Sigma_B(\mathbf{q}, \omega)}{\omega - E_0 + i\eta} \right) \quad (3.38)$$

L'argument de Thouless est alors de dire que le terme le plus divergent de cette expression est le logarithme pour $\omega = 0$ et $\mathbf{q} = 0$: $\operatorname{Ln}(1 + \Sigma_B/E_0)$ qui est convergent tant que $E_0 + \Sigma_B > 0$.

3.3 La théorie du champ-moyen

Nous appliquons la théorie du champ-moyen au modèle Boson-Fermion pour un état superfluide. Lorsque le bas de la bande des bosons s'annule, c'est-à-dire $E_0 + \Sigma_B(0,0) = 0$, le nombre de bosons dans le mode $\mathbf{q} = 0$ devient infini. Cela signale l'apparition d'un condensat avec $\langle b_{\mathbf{q}=0} \rangle \neq 0$. De même pour les fermions, la divergence de la fonction de Green à deux particules pour les paires de Cooper en $\omega = 0$ et $\mathbf{q} = 0$ signale la formation de paires de Cooper avec des corrélations $\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \neq 0$. La théorie du champ-moyen permet de prendre en compte ces corrélations anormales et de retirer les divergences de façon cohérente en redéfinissant un état du vide où les paramètres d'ordre sont non nuls. Dans notre approche, nous introduisons deux paramètres d'ordre a priori. Un paramètre d'ordre $\langle b_0 \rangle$ pour les bosons condensés dans le mode $\mathbf{q} = 0$ et un paramètre d'ordre $\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle$ pour les paires de Cooper. Dans un premier temps, nous dérivons le hamiltonien champ-moyen H_{CM} obtenu à partir du hamiltonien original en négligeant les fluctuations quadratiques et d'ordre supérieur par rapport aux paramètres d'ordres qui représentent les valeurs moyennes par rapport à notre état superfluide. Dans un deuxième temps, nous diagonalisons le hamiltonien ainsi obtenu qui est essentiellement un modèle BCS réduit pour les fermions et un oscillateur harmonique déplacé pour les bosons. Nous obtenons alors les équations self-consistantes pour la théorie. Enfin, nous donnons quelques résultats numériques obtenus en résolvant les équations self-consistantes pour différentes valeurs des paramètres du modèle.

Dans l'approximation du champ-moyen, les termes d'interaction dans le hamiltonien deviennent

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{q}}^+ c_{-k+\mathbf{q}\downarrow} c_{k\uparrow} &\simeq \delta_{\mathbf{q},0} [\langle b_0^+ \rangle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + b_0^+ \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle - \langle b_0^+ \rangle \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle] \\ c_{k+\mathbf{q}\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ b_{\mathbf{q}} &\simeq \delta_{\mathbf{q},0} [\langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle b_0 + c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \langle b_0 \rangle - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle \langle b_0 \rangle] \end{aligned} \quad (3.39)$$

où l'on a retiré les doubles valeurs moyennes afin de ne pas compter deux fois l'énergie moyenne du terme d'interaction que l'on a découplé. On définit les deux paramètres d'ordre s et x par

$$s = \frac{1}{M} \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \quad \text{et} \quad x = \frac{1}{\sqrt{M}} \langle b_0 \rangle \quad (3.40)$$

On obtient alors le hamiltonien champ-moyen H_{CM}

$$\begin{aligned} H_{CM} &= \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + g \sum_k [x c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ + x^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + g [s b_0^+ + s^* b_0] - g [s^* x + x^* s] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Pour les fermions, on obtient un hamiltonien quadratique qui est diagonalisable par une transformation unitaire sur les opérateurs de fermions, une transformation de Bogoliubov. A ce niveau, pour simplifier les notations, nous choisissons des paramètres d'ordre s et x réels. Nous reviendrons plus tard sur l'intérêt et la signification de considérer des paramètres d'ordres complexes. Dans ce cas, la transformation se réduit à une simple matrice de rotation (avec la

convention de signe BCS) donnée par

$$\begin{pmatrix} \cos \theta_k & \sin \theta_k \\ -\sin \theta_k & \cos \theta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{k\uparrow} \\ \alpha_{-k\downarrow}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^+ \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

Les nouveaux opérateurs $\alpha_{k\sigma}$ sont des opérateurs de fermions qui vérifient les relations d'anti-commutation $\{\alpha_{k\sigma}, \alpha_{k'\sigma'}^+\} = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'}$. L'angle de mélange θ_k est donné par

$$\tan 2\theta_k = -\frac{g x}{\epsilon_k} \quad (3.43)$$

et nous choisissons la convention telle que

$$\cos 2\theta_k = \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \quad \text{et} \quad \sin 2\theta_k = -\frac{g x}{\gamma_k} \quad (3.44)$$

avec $\gamma_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + g^2 x^2}$. Le hamiltonien pour la partie fermionique

$$H_{fer} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + g x \sum_k [c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ + c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}] \quad (3.45)$$

s'écrit

$$H_{fer} = \sum_{k\sigma} \gamma_k \alpha_{k\sigma}^+ \alpha_{k\sigma} + \sum_k [\epsilon_k - \gamma_k] \quad (3.46)$$

Il est alors loisible de poser $x = \sqrt{n_0}$ où n_0 est la densité de bosons condensés, $u_k = \cos \theta_k$ et $v_k = \sin \theta_k$ avec

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \right) \quad , \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \right) \quad \text{et} \quad u_k v_k = -\frac{g \sqrt{n_0}}{2 \gamma_k} \quad (3.47)$$

L'état fondamental $|0\rangle$ de ce hamiltonien est défini comme le vide des excitations qui vérifie $\alpha_{k\sigma} |0\rangle = 0$. Cet état peut être construit de façon explicite [17]

$$|0\rangle = \prod_k \alpha_{-k\downarrow} \alpha_{k\uparrow} |vide\rangle \quad (3.48)$$

qui est l'état variationnel, à la norme près, de BCS

$$|BCS\rangle = \prod_k \left(u_k + v_k c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \right) |vide\rangle \quad (3.49)$$

Du fait que les opérateurs $\alpha_{k\sigma}$ sont des opérateurs de fermions, on obtient toutes les propriétés du système comme celles d'un système de fermions libres avec les énergies d'excitation γ_k , notamment que $\langle \alpha_{k\sigma}^+ \alpha_{k'\sigma'} \rangle = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} n_F(\gamma_k)$. On en déduit alors les valeurs moyennes habituelles de la théorie BCS

$$\langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k \right) \quad (3.50)$$

$$\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = -\frac{g \sqrt{n_0}}{2 \gamma_k} \tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k \quad (3.51)$$

avec $\gamma_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + g^2 n_0}$. Le système de fermions est donc décrit par le modèle BCS réduit avec un gap $\Delta_{BCS} = \sqrt{g^2 n_0}$ où g est la constante de couplage du modèle et n_0 la densité de bosons condensés.

Pour les bosons, le hamiltonien que l'on considère est

$$H_{bos} = \sum_q E_q b_q^\dagger b_q + g s [b_0^\dagger + b_0] \quad (3.52)$$

Seul le mode $\mathbf{q} = 0$ est affecté et correspond à un oscillateur harmonique déplacé. On considère donc la transformation

$$\begin{cases} b_0 = a_0 - x_0 \\ b_q = a_q \text{ pour } \mathbf{q} \neq 0 \end{cases} \quad (3.53)$$

avec $x_0 = gs/E_0$. Les opérateurs a_q sont des opérateurs de bosons qui vérifient les relations de commutation $[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{q,q'}$. Le hamiltonien s'écrit alors

$$H_{bos} = \sum_q E_q a_q^\dagger a_q - E_0 x_0^2 \quad (3.54)$$

On obtient un nouveau système de bosons dont le spectre d'excitation n'est pas modifié. L'état fondamental $|0\rangle$ du système est alors défini comme le vide des excitations de bosons qui vérifie $a_q|0\rangle = 0$. Cela correspond à l'état cohérent pour le mode $\mathbf{q} = 0$ dont la forme explicite est donnée par

$$|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}x_0^2} e^{-x_0 b_0^\dagger} |vide\rangle \quad (3.55)$$

On obtient alors les valeurs moyennes

$$\begin{aligned} \langle b_0 \rangle &= -gs/E_0 \\ \langle a_q^\dagger a_q \rangle &= n_B(E_q) \end{aligned} \quad (3.56)$$

Le hamiltonien total champ-moyen du système se met alors sous la forme

$$H_{CM} = \sum_{k\sigma} \gamma_k \alpha_{k\sigma}^\dagger \alpha_{k\sigma} + \sum_q E_q a_q^\dagger a_q + \mathcal{E} \quad (3.57)$$

où \mathcal{E} est l'énergie de l'état fondamental du système donnée par

$$\mathcal{E} = \sum_k [\epsilon_k - \gamma_k] - \frac{g^2 s^2}{E_0} - 2gs\sqrt{n_0} \quad (3.58)$$

Les deux équations self-consistantes pour les paramètres d'ordre sont

$$s = -g\sqrt{n_0} \frac{1}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2}\beta\gamma_k}{2\gamma_k} \quad (3.59)$$

et

$$\sqrt{n_0} = -\frac{g}{E_0} s \quad (3.60)$$

On note que les deux paramètres d'ordre sont proportionnels et l'on combine les deux équations en une seule: l'équation du gap, par analogie au modèle BCS

$$E_0 = \Delta_B - 2\mu = \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k}{2 \gamma_k} \quad (3.61)$$

L'énergie de l'état fondamental se met alors sous la forme

$$\mathcal{E} = n_0 E_0 + \sum_k [\epsilon_k - \gamma_k] \quad (3.62)$$

On vérifie que la minimisation de \mathcal{E} par rapport à n_0 redonne l'équation du gap à température nulle. En fait, on voit que l'on aurait pu se contenter de n'introduire qu'un seul paramètre variationnel n_0 , puis de minimiser l'énergie. C'est l'approche de Hugenholtz et Pines [12] pour un système de bosons en interaction et, plus généralement, cela correspond au formalisme fonctionnel où l'on développe l'action autour d'une configuration de champs classiques. Dans ce dernier cas, l'équation du gap correspond à la condition de stationnarité pour l'action [25, 23]. La densité totale de particules dans le système est définie par

$$n = \frac{1}{2M} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \rangle + \frac{1}{M} \sum_q \langle b_q^\dagger b_q \rangle \quad (3.63)$$

On obtient alors

$$n = n_0 + \frac{1}{M} \sum_k \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k \right) + \frac{1}{M} \sum_q n_B(E_q) \quad (3.64)$$

En résumé, les équations pour la théorie du champ-moyen sont les équations (3.61) et (3.64). Elles permettent de déterminer le potentiel chimique μ et la densité de bosons condensés n_0 . A température nulle, ces équations se réduisent à

$$n = n_0 + \frac{1}{M} \sum_k \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \right) \quad (3.65)$$

et

$$E_0 = \Delta_B - 2\mu = \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{1}{2 \gamma_k} \quad (3.66)$$

La température critique T_c est obtenue lorsque le paramètre d'ordre n_0 s'annule. Les équations qui permettent d'obtenir T_c et le potentiel chimique sont

$$n = \frac{1}{M} \sum_k n_F(\epsilon_k) + \frac{1}{M} \sum_q n_B(E_q) \quad (3.67)$$

et

$$E_0 = \Delta_B - 2\mu = \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \epsilon_k}{2 \epsilon_k} \quad (3.68)$$

On remarque que l'équation pour T_c est la même que celle donnée par le critère de Thouless ou par le pôle de la fonction de Green de Bose. Néanmoins, au niveau du champ-moyen, le

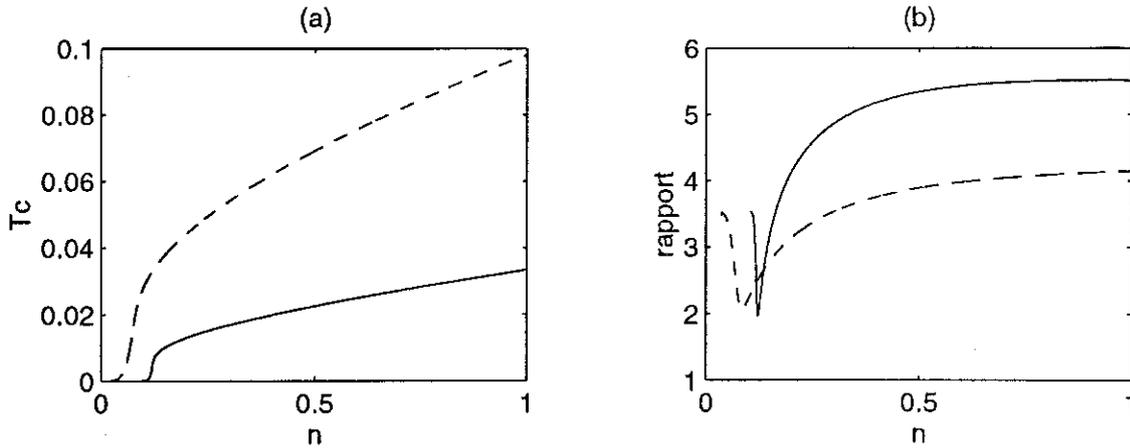


Figure 3.6: Solutions numériques des équations champ-moyen. La figure (a) montre T_c en fonction du remplissage n , et la figure (b) montre le rapport $2\Delta_{BCS}/T_c$ pour deux couplages, $g^2 = 0.01$ (-) et $g^2 = 0.05$ (- -).

spectre des bosons n'est pas affecté et T_c est déterminée en utilisant les relations de dispersion non renormalisées.

Nous considérons maintenant la solution numérique de ces équations pour différentes valeurs des paramètres Δ_B , g et γ du modèle. Nous utilisons une densité d'états parabolique de largeur de bande unité et de surface unité

$$D(\epsilon) = \frac{8}{\pi} \sqrt{\epsilon(1-\epsilon)} \quad (3.69)$$

La densité critique n_{cr} pour cette densité d'états est donnée par

$$n_{cr} = \frac{8}{\pi} \left[\frac{\theta}{4} - \frac{1}{16} \sin 4\theta \right] \quad \text{avec} \quad \theta = \arcsin \sqrt{\Delta_B/2} \quad (3.70)$$

ce qui correspond à $n_{cr} = 0.142$ pour $\Delta_B = 0.4$.

La figure Fig. 3.6 montre la température critique T_c et le rapport $2\Delta_{BCS}/T_c$ en fonction du remplissage. Nous avons considéré deux couplages, $g^2 = 0.01$ et $g^2 = 0.05$ et pris $\Delta_B = 0.4$ pour le niveau bosonique et une masse infinie pour les bosons $\gamma_B = 0$. Lorsque le couplage tend vers zéro, on retrouve qu'il y a un remplissage critique pour avoir une phase superfluide. Ce remplissage critique tend vers zéro quand on augmente le couplage. Pour de très faibles densités de bosons, on retrouve la limite *BCS* avec le rapport 3.5 caractéristique.

3.4 Excitations collectives dans l'état supra

La théorie du champ-moyen a permis de déterminer l'état fondamental du système dans la phase superfluide, c'est-à-dire en présence d'un paramètre d'ordre n_0 non nul qui représente la densité de bosons condensés. Elle a aussi fourni un spectre d'excitation à une particule pour les fermions qui est le spectre de BCS avec un gap en énergie Δ_{BCS} . Le spectre initial des bosons E_q quant à lui n'a pas été modifié. Cela vient du fait que le spectre des bosons n'est pas un spectre à une particule comme celui des fermions, mais qu'il décrit les fluctuations du paramètre d'ordre. Cela est cohérent avec le fait que la transition superfluide, dans la phase normale, est déterminée par le pôle $E_0 + \Sigma_B(0, 0) = 0$ de la fonction de Green à une particule des bosons. Dans la théorie du champ-moyen, nous avons introduit des fluctuations a_q et λ_q autour des paramètres d'ordre $\langle b_0 \rangle$ et $\langle \eta_0 \rangle$ selon

$$\begin{aligned} b_q &= \delta_{q,0} \langle b_0 \rangle + a_q \\ \eta_q &= \delta_{q,0} \langle \eta_0 \rangle + \lambda_q \end{aligned} \quad (3.71)$$

avec $\eta_q = M^{-1/2} \sum_k c_{-k+q\downarrow} c_{k\uparrow}$, ce qui permet d'écrire le hamiltonien du système sous la forme

$$H = H_{CM} + g \sum_q \left[a_q^\dagger \lambda_q + \lambda_q^\dagger a_q \right] \quad (3.72)$$

où H_{CM} est le hamiltonien champ-moyen que nous avons diagonalisé, alors que le second terme correspond aux fluctuations que nous avons négligées. Si l'on évalue ce dernier terme sur l'état superfluide, on trouve effectivement qu'il est nul, et plus précisément que chaque fluctuation $\langle a_q \rangle$, $\langle \lambda_q \rangle$ est nulle. Du fait qu'il n'y a qu'un seul paramètre d'ordre pour le système, on se contente d'étudier les fluctuations a_q . Nous voulons calculer la fonction de Green des fluctuations pour l'état superfluide. Pour ce faire, on utilise la technique RPA. Nous commençons par réécrire le hamiltonien H en fonction des opérateurs $\alpha_{k\sigma}$ et a_q qui décrivent l'état superfluide, puis nous écrivons les équations couplées pour les fonctions de Green des bosons et nous évaluons les self-énergies dans l'approximation RPA. Le hamiltonien champ-moyen est maintenant le hamiltonien non perturbé que l'on note H_0

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \gamma_k \alpha_{k\sigma}^\dagger \alpha_{k\sigma} + \sum_q E_q a_q^\dagger a_q + \mathcal{E} \quad (3.73)$$

Il permet de définir les fonctions de Green pour la théorie libre. Pour les fermions, on définit

$$G(k, \tau) = \langle T[\alpha_{k\uparrow}(\tau) \alpha_{k\uparrow}^\dagger] \rangle \quad \text{avec} \quad G^0(k, i\bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \gamma_k} \quad (3.74)$$

et

$$\tilde{G}(k, \tau) = \langle T[\alpha_{-k\downarrow}^\dagger(\tau) \alpha_{-k\downarrow}] \rangle \quad \text{avec} \quad \tilde{G}_0(k, i\bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \quad (3.75)$$

De même, pour les bosons, le hamiltonien H_0 permet de définir les deux fonctions de Green

$$B_1(q, \tau) = \langle T[a_q(\tau) a_q^\dagger] \rangle \quad \text{avec} \quad B_1^0(q, i\bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + E_q} \quad (3.76)$$

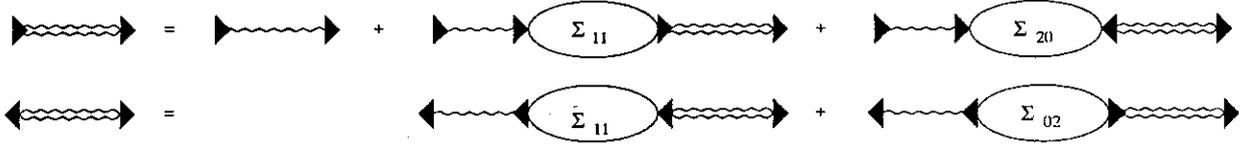


Figure 3.7: Equations diagrammatiques couplées pour l'approximation RPA

et

$$B_4(q, \tau) = \langle T[a_{-q}^+(\tau) a_{-q}] \rangle \quad \text{avec} \quad B_4^0(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{-1}{i\bar{\mu} - E_q} \quad (3.77)$$

Le terme d'interaction que l'on note H_1 s'écrit

$$H_1 = \frac{g}{\sqrt{M}} \sum_{k,q} \left[\begin{aligned} & - u_{k+q} v_k a_q^+ \alpha_{k\uparrow}^+ \alpha_{k+q\uparrow} \\ & - v_{k+q} v_k a_q^+ \alpha_{k\uparrow}^+ \alpha_{-k-q\downarrow}^+ \\ & + u_{k+q} u_k a_q^+ \alpha_{-k\downarrow} \alpha_{k+q\downarrow} \\ & - v_{k+q} u_k a_q^+ \alpha_{-k-q\downarrow}^+ \alpha_{-k\downarrow} \\ & - u_{k+q} v_k a_q \alpha_{k+q\uparrow}^+ \alpha_{k\uparrow} \\ & + u_{k+q} u_k a_q \alpha_{k+q\uparrow}^+ \alpha_{-k\downarrow}^+ \\ & - v_{k+q} v_k a_q \alpha_{-k-q\downarrow} \alpha_{k\uparrow} \\ & - v_{k+q} u_k a_q \alpha_{-k\downarrow}^+ \alpha_{-k-q\downarrow}^+ \end{aligned} \right] \quad (3.78)$$

Le hamiltonien H_1 contient maintenant 8 vertex. On définit la fonction de Green anormale B_3 pour les bosons par

$$B_3(q, \tau) = \langle T[a_q(\tau) a_{-q}] \rangle \quad \text{avec} \quad B_3^0(q, \bar{\mu}) = 0 \quad (3.79)$$

la figure 3.7 montre alors les équations diagrammatiques couplées de l'approximation RPA. Les équations algébriques correspondantes pour les fonctions de Green B_1 et B_3 s'écrivent

$$\begin{cases} B_1(q, \bar{\mu}) = B_1^0(q, \bar{\mu}) - \beta B_1^0(q, \bar{\mu}) \Sigma_{11}(q, \bar{\mu}) B_1(q, \bar{\mu}) - \beta B_1^0(q, \bar{\mu}) \Sigma_{20}(q, \bar{\mu}) B_3(q, \bar{\mu}) \\ B_3(q, \bar{\mu}) = -\beta B_4^0(q, \bar{\mu}) \bar{\Sigma}_{11}(q, \bar{\mu}) B_3(q, \bar{\mu}) - \beta B_4^0(q, \bar{\mu}) \Sigma_{02}(q, \bar{\mu}) B_1(q, \bar{\mu}) \end{cases} \quad (3.80)$$

Il existe des équations similaires pour les deux autres fonctions de Green des bosons, mais il n'est pas indispensable d'en tenir compte. Nous avons adopté la notation standard pour les self-énergies des bosons: $\Sigma_{i,j}$ est la self-énergie avec i lignes de bosons entrantes et j lignes de bosons sortantes. Ces équations sont valables pour tout système de bosons et sont exactes [25, 19, 3]. Par symétrie, on a $\bar{\Sigma}_{11}(q, \bar{\mu}) = \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu})$ alors que $\Sigma_{02}(q, \bar{\mu})$ et $\Sigma_{20}(q, \bar{\mu})$ sont égales lorsque

la phase du paramètre d'ordre est prise nulle. La solution du système d'équation est alors donnée par

$$B_1(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{i\bar{\mu} + E_q - \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu})}{[i\bar{\mu} + E_q + \Sigma_{11}(q, \bar{\mu})][i\bar{\mu} - E_q - \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu})] + \Sigma_{02}(q, \bar{\mu}) \Sigma_{20}(q, \bar{\mu})} \quad (3.81)$$

et

$$B_3(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{\Sigma_{02}(q, \bar{\mu})}{[i\bar{\mu} + E_q + \Sigma_{11}(q, \bar{\mu})][i\bar{\mu} - E_q - \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu})] + \Sigma_{02}(q, \bar{\mu}) \Sigma_{20}(q, \bar{\mu})} \quad (3.82)$$

Rappelons que les fonctions de Green retardées s'obtiennent à partir des fonctions de Green en Matsubara selon $G(q, \omega) = -\beta G(q, i\bar{\mu} = -\omega - i\eta)$ alors que pour les self-énergies, la recette est $\Sigma(q, \omega) = \Sigma(q, i\bar{\mu} = -\omega - i\eta)$. On évalue ensuite les quatre self-énergies à l'aide du développement de Feynman Dyson à l'ordre deux. Chaque self-énergie comporte quatre termes du fait de la forme de H_1 . Après avoir effectué la somme sur les fréquences de Matsubara des fermions, on obtient

$$\Sigma_{11}(q, i\bar{\mu}) = \frac{g^2}{M} \sum_k \left\{ \begin{array}{l} v_k^2 u_{k+q}^2 \frac{n_F(-\gamma_k) - n_F(-\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} + \gamma_{k+q} - \gamma_k} \\ + v_k^2 u_{k+q}^2 \frac{n_F(-\gamma_k) - n_F(\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} - \gamma_{k+q} - \gamma_k} \\ + u_k^2 u_{k+q}^2 \frac{n_F(\gamma_k) - n_F(-\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} + \gamma_{k+q} + \gamma_k} \\ + u_k^2 v_{k+q}^2 \frac{n_F(\gamma_k) - n_F(\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} - \gamma_{k+q} + \gamma_k} \end{array} \right. \quad (3.83)$$

$$\Sigma_{02}(q, i\bar{\mu}) = \frac{g^2}{M} \sum_k u_k v_k u_{k+q} v_{k+q} \left\{ \begin{array}{l} \frac{n_F(-\gamma_k) - n_F(-\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} + \gamma_{k+q} - \gamma_k} \\ - \frac{n_F(-\gamma_k) - n_F(\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} - \gamma_{k+q} - \gamma_k} \\ - \frac{n_F(\gamma_k) - n_F(-\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} + \gamma_{k+q} + \gamma_k} \\ + \frac{n_F(\gamma_k) - n_F(\gamma_{k+q})}{i\bar{\mu} - \gamma_{k+q} + \gamma_k} \end{array} \right. \quad (3.84)$$

A température nulle, ces expressions se simplifient considérablement. La forme retardée obtenue en posant $i\bar{\mu} = -\omega - i\eta$ est alors

$$\Sigma_{11}(q, \omega) = \frac{g^2}{M} \sum_k \left(-\frac{v_k^2 v_{k+q}^2}{\omega + \gamma_k + \gamma_{k+q} + i\eta} + \frac{u_k^2 u_{k+q}^2}{\omega - \gamma_k - \gamma_{k+q} + i\eta} \right) \quad (3.85)$$

$$\Sigma_{02}(q, \omega) = \frac{g^2}{M} \sum_k \left(+\frac{u_k v_k u_{k+q} v_{k+q}}{\omega + \gamma_k + \gamma_{k+q} + i\eta} - \frac{u_k v_k u_{k+q} v_{k+q}}{\omega - \gamma_k - \gamma_{k+q} + i\eta} \right) \quad (3.86)$$

La partie réelle de Σ_{02} est paire, et sa partie imaginaire est impaire.

Pour $q = 0$, la partie imaginaire de Σ_{11} et de Σ_{02} fait intervenir $\delta(\omega \pm \gamma_k)$. Comme γ_k est toujours supérieure à l'énergie du gap $\sqrt{g^2 n_0}$, on en déduit que les self-énergies sont réelles pour

$|\omega| < 2\sqrt{n_0 g^2}$. Pour $\mathbf{q} = 0$ et $\omega = 0$, on obtient

$$\Sigma_{11} = -\frac{g^2}{M} \sum_k \frac{u_k^4 + v_k^4}{2\gamma_k} \quad \text{et} \quad \Sigma_{02} = \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{2u_k^2 v_k^2}{2\gamma_k} \quad (3.87)$$

Pour $\mathbf{q} = 0$ et $\omega = 0$, le dénominateur des fonctions de Green vaut $(E_0 + \Sigma_{11})^2 - \Sigma_{02}^2$. Or la condition de superfluidité, c'est-à-dire l'équation du gap donnée par la théorie du champ-moyen s'écrit $E_0 = \Sigma_{02} - \Sigma_{11}$. Il y a donc un pôle réel en $q = 0$ et $\omega = 0$. L'égalité reliant le potentiel chimique des bosons aux self-énergies, est un résultat général pour un liquide de Bose superfluide. Pour une interaction à deux corps, c'est le théorème de Hugenholtz et Pines [12] qui établit $\mu_B = \Sigma_{11} - \Sigma_{02}$. Le spectre pour $q \rightarrow 0$ peut alors être obtenu en effectuant le développement en $q = 0$ et $\omega = 0$ pour le dénominateur de la fonction de Green [3]

$$\Sigma_{11}(q, \omega) = \Sigma_{11} + \omega \frac{\partial \Sigma_{11}}{\partial \omega} + \frac{1}{2} \omega^2 \frac{\partial^2 \Sigma_{11}}{\partial \omega^2} + z \frac{\partial \Sigma_{11}}{\partial z} \quad (3.88)$$

$$\Sigma_{11}(-q, -\omega) = \Sigma_{11} - \omega \frac{\partial \Sigma_{11}}{\partial \omega} + \frac{1}{2} \omega^2 \frac{\partial^2 \Sigma_{11}}{\partial \omega^2} + z \frac{\partial \Sigma_{11}}{\partial z} \quad (3.89)$$

$$\Sigma_{02}^2(q, \omega) = \Sigma_{02}^2 + \omega \frac{\partial \Sigma_{02}^2}{\partial \omega} + \frac{1}{2} \omega^2 \frac{\partial^2 \Sigma_{02}^2}{\partial \omega^2} + z \frac{\partial \Sigma_{02}^2}{\partial z} \quad (3.90)$$

avec $z = q^2$. Le dénominateur s'écrit alors

$$\begin{aligned} & \omega^2 \left[\left(1 - \frac{\partial \Sigma_{11}}{\partial \omega} \right)^2 - \Sigma_{02} \frac{\partial^2 \Sigma_{11}}{\partial \omega^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Sigma_{02}^2}{\partial \omega^2} \right] \\ & + z \left[-2 \frac{\partial E_q}{\partial z} \Sigma_{02} - 2 \Sigma_{02} \frac{\partial \Sigma_{11}}{\partial z} + \frac{\partial \Sigma_{02}^2}{\partial z} \right] \\ & + \omega \left[\frac{\partial \Sigma_{02}^2}{\partial \omega} \right] \end{aligned} \quad (3.91)$$

Si l'on évalue le terme en ω , on trouve qu'il est nul, car Σ_{02} est une fonction paire de ω . Le dénominateur s'écrit comme $\omega^2 - c^2 q^2$. Les excitations sont donc de la forme $\omega = cq$ pour $q \rightarrow 0$. On retrouve un spectre linéaire pour un liquide de Bose superfluide.

A T_C , le paramètre d'ordre n_0 s'annule. Les self-énergies Σ_{02} et Σ_{20} sont nulles. La vitesse superfluide qui est reliée directement à Σ_{02} est nulle aussi. La fonction de Green des bosons devient

$$B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + E_q + \Sigma_{11}(q, \bar{\mu})} \quad (3.92)$$

La fonction de Green possède un pôle $\omega = 0$ pour $\mathbf{q} = 0$, l'équation pour ce pôle correspond à l'équation qui détermine la température critique, $E_0 + \Sigma_{11}(0, 0) = 0$.

3.5 Action effective

Dans les sections précédentes, nous avons considéré l'état superfluide du modèle Boson-Fermion dans l'approximation du champ moyen et les excitations collectives dans l'approximation RPA. Dans cette section, nous considérons le formalisme des intégrales fonctionnelles qui permet de donner une plus grande signification physique aux résultats précédents. Dans ce formalisme, les variables de fermions représentent les *variables rapides* qui peuvent être intégrées, alors que les variables des bosons (renormalisées par les interactions) représentent les *variables lentes* qui décrivent la physique des basses énergies et des grandes longueurs d'ondes. L'utilisation d'une action effective permet de donner une signification précise de l'état superfluide, du paramètre d'ordre lié à la brisure de symétrie, des excitations collectives liées au mode de Goldstone ou du mode de Higgs en présence d'un champ magnétique.

Action effective

Nous commençons par introduire les opérateurs de champ $\hat{\Psi}_\sigma(r)$ pour les fermions et $\hat{\Phi}(r)$ pour les bosons.

$$\hat{\Psi}_\sigma(r) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k e^{ikr} c_{k\sigma} \quad (3.93)$$

et

$$\hat{\Phi}(r) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q e^{iqr} b_q \quad (3.94)$$

qui vérifient les relations d'anticommutation

$$\{\hat{\Psi}_\sigma(r), \hat{\Psi}_{\sigma'}^+(r')\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{r,r'} \quad (3.95)$$

et les relations de commutation

$$[\hat{\Phi}(r), \hat{\Phi}^+(r')] = \delta_{r,r'} \quad (3.96)$$

Le hamiltonien s'écrit en fonction de ces opérateurs de champs

$$\begin{aligned} H = & \int d^3r d^3r' \hat{\Psi}_\sigma^+(r) H_F(r-r') \hat{\Psi}_\sigma(r') + \int d^3r \hat{\Phi}^+(r) E_0 \hat{\Phi}(r) \\ & + g \int d^3r [\hat{\Phi}^+(r) \hat{\Psi}_\downarrow(r) \hat{\Psi}_\uparrow(r) + hc] \end{aligned} \quad (3.97)$$

Pour pouvoir écrire la fonction de partition Z du système, on introduit les états cohérents de fermions $|F\rangle$ et de bosons $|B\rangle$ tels que

$$\hat{\Psi}_\sigma(r) |F\rangle = \Psi_\sigma(r) |F\rangle \quad \text{et} \quad \langle F | \hat{\Psi}_\sigma^+(r) = \langle F | \bar{\Psi}_\sigma(r) \quad (3.98)$$

et

$$\hat{\Phi}(r) |B\rangle = \Phi(r) |B\rangle \quad \text{et} \quad \langle B | \hat{\Phi}^+(r) = \langle B | \Phi^*(r) \quad (3.99)$$

Les variables $\Psi, \bar{\Psi}$ sont des variables de Grassmann qui anticommulent, et les variables Φ, Φ^* sont des nombres complexes qui commutent.

La fonction de partition $Z = \text{Tr}\{exp(-\beta H)\}$ s'écrit alors comme une intégrale fonctionnelle [23], en utilisant les états cohérents $|F, B\rangle = |F\rangle \otimes |B\rangle$.

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\Psi} \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi e^{-S[\bar{\Psi}, \Psi, \Phi^*, \Phi]} \quad (3.100)$$

L'action euclidienne S est donnée par

$$\begin{aligned} S = \int_0^\beta d\tau \int d^3r \{ & \bar{\Psi}_\sigma(x) [\delta(x-x') \partial_\tau + \delta(\tau-\tau') H_F(r-r')] \Psi_\sigma(x') \\ & + \Phi^*(x) [\partial_\tau + E_0] \Phi(x) \\ & + g [\Phi^*(x) \Psi_\downarrow(x) \Psi_\uparrow(x) + hc] \} \end{aligned} \quad (3.101)$$

avec $x = (r, \tau)$. Les conditions aux limites pour les fermions sont $\Psi(r, \beta) = -\Psi(r, 0)$ et pour les bosons $\Phi(r, \beta) = \Phi(r, 0)$. On introduit les fréquences de Matsubara $\bar{\nu} = \pi T(2n+1)$ pour les fermions et $\bar{\mu} = 2\pi Tn$ pour les bosons. On a alors la décomposition suivante

$$\Psi_\sigma(r, \tau) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k \sum_{\bar{\nu}} e^{ikr} e^{i\bar{\nu}\tau} \Psi_\sigma(k, \bar{\nu}) \quad (3.102)$$

et

$$\Phi(r, \tau) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q \sum_{\bar{\mu}} e^{iqr} e^{i\bar{\mu}\tau} \Phi(q, \bar{\mu}) \quad (3.103)$$

L'action euclidienne s'écrit alors

$$\begin{aligned} S = \beta \sum_{k, \bar{\nu}} \bar{\Psi}_\sigma(k, \bar{\nu}) [i\bar{\nu} + \epsilon_k] \Psi_\sigma(k, \bar{\nu}) + \sum_{q, \bar{\mu}} \Phi^*(q, \bar{\mu}) [i\bar{\mu} + E_0] \Phi(q, \bar{\mu}) \\ + \beta \frac{g}{\sqrt{M}} \sum_{k, q} \sum_{\bar{\nu}, \bar{\mu}} [\bar{\Psi}_\uparrow(k+q, \bar{\nu} + \bar{\mu}) \bar{\Psi}_\downarrow(-k, -\bar{\nu}) \Phi(q, \bar{\mu}) + hc] \end{aligned} \quad (3.104)$$

L'action S est bilinéaire pour les opérateurs de fermions; on peut alors effectuer l'intégrale gaussienne. Il est loisible d'introduire les opérateurs de Nambu Ψ et Ψ^+ dans l'espace des x et des k par

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} \Psi_\uparrow(x) \\ \bar{\Psi}_\downarrow(x) \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \Psi(k) = \begin{bmatrix} \Psi_\uparrow(k) \\ \bar{\Psi}_\downarrow(-k) \end{bmatrix} \quad (3.105)$$

La partie de l'action contenant les variables de fermions s'écrit alors

$$\begin{aligned} \beta \sum_{k, \bar{\nu}} \bar{\Psi}(k) [i\bar{\nu} + \tau_3 \epsilon_k] \Psi(k) + \beta \sum_k \epsilon_k \\ + \beta \frac{g}{\sqrt{M}} \sum_{k, \bar{\nu}} \sum_{k', \bar{\nu}'} \bar{\Psi}(k) \left[\frac{\tau_+}{2} \Phi(k-k') + \frac{\tau_-}{2} \Phi^*(k'-k) \right] \Psi(k') \end{aligned} \quad (3.106)$$

où les τ_i sont les matrices de Pauli définies par

$$\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.107)$$

Cela permet d'intégrer sur les fermions en utilisant la formule

$$\int \mathcal{D}\bar{\Psi} \mathcal{D}\Psi e^{-\int d^4x \int d^4x' \bar{\Psi}(x) M(x,x') \Psi(x')} = \det M \quad (3.108)$$

et l'identité $\det M = \exp(\text{Tr} \text{Ln} M)$. On obtient alors la fonction de partition comme une intégrale fonctionnelle uniquement sur les variables des bosons.

$$Z = \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi e^{-S[\Phi^*, \Phi]} \quad (3.109)$$

avec

$$S[\Phi^*, \Phi] = \int d^4x \Phi^*(x) [\partial_\tau + E_0] \Phi(x) - \text{Tr} \text{Ln} M(\Phi^*, \Phi) + \beta \sum_k \epsilon_k \quad (3.110)$$

La matrice M est définie par ses éléments de matrice

$$\begin{aligned} M(k, \bar{\nu}; k', \bar{\nu}') &= \delta_{k,k'} \delta_{\bar{\nu}, \bar{\nu}'} [i\bar{\nu} + \tau_3 \epsilon_k] \\ &+ \frac{g}{\sqrt{M}} \frac{\tau_+}{2} \Phi(k - k', \bar{\nu} - \bar{\nu}') + \frac{g}{\sqrt{M}} \frac{\tau_-}{2} \Phi^*(k' - k, \bar{\nu}' - \bar{\nu}) \end{aligned} \quad (3.111)$$

alors que la trace d'un opérateur A est définie par

$$\text{Tr} A = \sum_{k, \bar{\nu}} \text{Tr}_{22} A(k, \bar{\nu}; k, \bar{\nu}) \quad (3.112)$$

où Tr_{22} représente la trace sur les matrices 2×2 . La matrice M correspond à l'inverse de la fonction de Green à une particule des fermions. On note $G = M^{-1}$. Il est loisible de poser $M = M_0 + \delta M$ et $G_0 = M_0^{-1}$ où G_0 est la fonction de Green ne dépendant plus des variables des bosons. On a alors

$$G = \frac{G_0}{1 + G_0 \delta M} \quad (3.113)$$

On obtient alors l'action S comme un développement en puissance de δM .

$$\begin{aligned} S[\Phi^*, \Phi] &= \beta \sum_{q, \bar{\mu}} \Phi^*(q, \bar{\mu}) [i\bar{\mu} + E_0] \Phi(q, \bar{\mu}) + \beta \sum_k \epsilon_k + \text{Tr} \text{Ln} G_0 \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n} \text{Tr} [G_0 \delta M]^n \end{aligned} \quad (3.114)$$

Jusqu'à présent, nous n'avons fait aucune approximation. L'action $S[\Phi^*, \Phi]$ décrit le même système que l'action initiale $S[\bar{\Psi}, \Psi, \Phi^*, \Phi]$. Ce que l'on a obtenu est un système de bosons en interaction. Cependant, il y a un nombre infini de termes d'interaction où les bosons interagissent entre eux, via les propagateurs libres G_0 des fermions. Le but d'obtenir une action ne dépendant que des variables de bosons, est que les excitations de basses énergies du système sont bosoniques et que les propriétés physiques du système vont être décrites par les modes $q \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$ des champs de bosons $\Phi(q, \omega)$ qui vont se comporter comme des champs

classiques. Pour cela, on définit une action classique, ou action effective qui dépend des champs classiques. On considère la fonction de partition en présence de sources J et J^*

$$Z[J^*, J] = \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi e^{-S[\Phi^*, \Phi]} e^{-\int d^4x [J^*(x)\Phi(x) + \Phi^*(x)J(x)]} \quad (3.115)$$

La présence des sources permet de définir les valeurs moyennes $\langle \Phi(x) \rangle$ et $\langle \Phi^*(x) \rangle$ en présence des sources, que l'on note $\Phi_c(x)$ et $\Phi_c^*(x)$ et qui sont les champs classiques.

$$\Phi_c(x) = \frac{\delta W}{\delta J^*(x)} \quad \text{et} \quad \Phi_c^*(x) = \frac{\delta W}{\delta J(x)} \quad (3.116)$$

avec $W[J^*, J] = -Ln Z[J^*, J]$. L'action effective est définie par une transformée de Legendre

$$\Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c] = -W[J^*, J] + \int d^4x [\Phi_c^*(x)J(x) + J^*(x)\Phi_c(x)] \quad (3.117)$$

et ne dépend que des champs classiques, alors que W ne dépend que des sources. On obtient alors

$$J(x) = \frac{\delta \Gamma}{\delta \Phi_c^*(x)} \quad \text{et} \quad J^*(x) = \frac{\delta \Gamma}{\delta \Phi_c(x)} \quad (3.118)$$

Lorsque l'on fait tendre les sources vers zéro, on voit que l'action effective Γ est extrémale par rapport aux champs classiques que l'on note alors $\Phi_0(x)$ et $\Phi_0^*(x)$. On recherche donc les champs classiques qui rendent l'action effective extrémale. A partir de $S[\Phi^*, \Phi]$ de l'équation (3.110) à laquelle on rajoute les termes de sources, on obtient deux équations de stationnarité

$$(\partial_\tau + E_0) \Phi_c(x) - Tr \left\{ \frac{\delta M_c}{\delta \Phi_c^*(x)} G_c \right\} + J(x) = 0 \quad (3.119)$$

et

$$(-\partial_\tau + E_0) \Phi_c^*(x) - Tr \left\{ \frac{\delta M_c}{\delta \Phi_c(x)} G_c \right\} + J^*(x) = 0 \quad (3.120)$$

où G_c est la fonction de Green des fermions avec les champs classiques. On peut alors faire le changement de variables

$$\Phi \rightarrow \Phi + \Phi_c \quad \text{et} \quad \Phi^* \rightarrow \Phi^* + \Phi_c^* \quad (3.121)$$

et compte tenu des équations de stationnarité, on obtient

$$S[\Phi^*, \Phi] = S[\Phi_c^*, \Phi_c] + \frac{1}{2} \int d^4x d^4y \Phi_i(x) \frac{\delta^2 S}{\delta \Phi_i(x) \delta \Phi_j(y)} \Phi_j(y) + \dots \quad (3.122)$$

avec $\Phi_i(x) = \Phi(x), \Phi^*(x)$. On obtient ainsi un développement autour des champs classiques. L'action effective est alors

$$\Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c] = -S[\Phi_c^*, \Phi_c] + Ln \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi e^{-\frac{1}{2}\Phi^+ S'' \Phi} + \dots \quad (3.123)$$

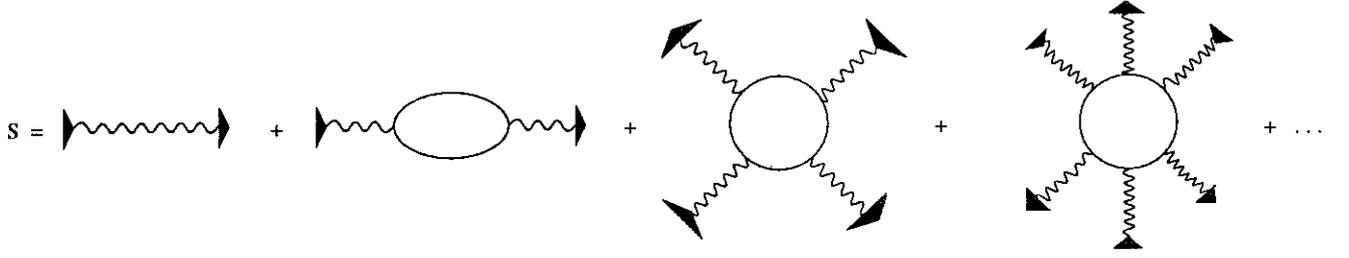


Figure 3.8: Développement diagrammatique de l'action dans la phase normale

Phase normale

La phase normale est caractérisée par $\langle \Phi_0 \rangle = 0$. La fonction de Green des fermions G_0 est celle des fermions libres. Elle est donnée par

$$G^0(k, \bar{\nu}; k', \bar{\nu}') = \delta_{k,k'} \delta_{\bar{\nu},\bar{\nu}'} \frac{1}{\beta} \begin{pmatrix} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i\bar{\nu} - \epsilon_k} \end{pmatrix} \quad (3.124)$$

La partie libre de l'action correspondant aux fermions du développement (3.114) S_F^0 est

$$S_F^0 = \beta \sum_k \epsilon_k + Tr Ln G_0 \quad (3.125)$$

on trouve

$$S_F^0 = -2Ln2 - 2Ln [1 - e^{-\beta\epsilon_k}] \quad (3.126)$$

C'est le résultat habituel pour un système de fermions avec le facteur 2 lié au spin. La figure 3.8 montre le développement diagrammatique de l'action S qui comporte un nombre infini de termes avec un nombre pair de lignes de bosons. On obtient ainsi, pour les premiers termes,

$$\begin{aligned} S = S_F^0 + \beta \sum_{q, \bar{\mu}} \Phi^*(q, \bar{\mu}) [i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_B(q, \bar{\mu})] \Phi(q, \bar{\mu}) \\ + \frac{1}{2} \beta \sum \Gamma_2(q_1, \bar{\mu}_1; q_2, \bar{\mu}_2; q, \bar{\mu}) \Phi^*(q_1 + q, \bar{\mu}_1 + \bar{\mu}) \Phi^*(q_2 - q, \bar{\mu}_2 - \bar{\mu}) \Phi(q_2, \bar{\mu}_2) \Phi(q_1, \bar{\mu}_1) \\ + \dots \end{aligned} \quad (3.127)$$

avec

$$\Sigma_B(q, \bar{\mu}) = \beta \frac{g^2}{M} \sum_{k, \bar{\nu}} G_{11}^0(k + q, \bar{\nu} + \bar{\mu}) G_{22}^0(k, \bar{\nu}) \quad (3.128)$$

et

$$\begin{aligned} \Gamma_2(q_1, \bar{\mu}_1; q_2, \bar{\mu}_2; q, \bar{\mu}) = \\ \beta^3 \frac{g^4}{M} \sum_{k, \bar{\nu}} G_{11}^0(k + q_2, \bar{\nu} + \bar{\mu}_2) G_{22}^0(k, \bar{\nu}) G_{11}^0(k + q + q_1, \bar{\nu} + \bar{\mu} + \bar{\mu}_1) G_{22}^0(k + q, \bar{\nu} + \bar{\mu}) \end{aligned} \quad (3.129)$$

où Σ_B est la self-énergie des bosons, et Γ_2 est le potentiel à deux particules qui évalué pour toutes les énergies nulles et tous les moments nuls, est répulsif, ce qui est une condition nécessaire pour avoir un état superfluide. On obtient explicitement

$$\Sigma_B(0) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2}\beta\epsilon_k}{2\epsilon_k} \quad (3.130)$$

et

$$\Gamma_2(0,0,0) = \frac{g^4}{M^2} \sum_k \left[\frac{\tanh \frac{1}{2}\beta\epsilon_k}{4\epsilon_k^3} - \frac{\beta}{8\epsilon_k^2 \cosh^2 \frac{1}{2}\beta\epsilon_k} \right] \quad (3.131)$$

On obtient le potentiel effectif en posant $\Phi(q, \bar{\mu}) = \sqrt{M}\Phi_0$

$$V_{eff} = a |\Phi_0|^2 + \frac{1}{2} b |\Phi_0|^4 \quad (3.132)$$

avec

$$a = E_0 + \Sigma_B(0) \quad \text{et} \quad b = M \Gamma_2(0,0,0) \quad (3.133)$$

La densité d'énergie libre de Ginsburg Landau pour un champ constant est alors égale au potentiel effectif. La transition est définie lorsque le paramètre a s'annule, ce qui correspond au pôle de la fonction de Green des bosons. On remarque alors que l'on peut écrire le paramètre a sous la forme

$$a = \frac{g^2}{M} \sum_k \tanh \left[\frac{1}{2}\epsilon_k \left(\frac{T - T_c}{TT_c} \right) \right] \left[1 - \tanh \frac{1}{2}\beta\epsilon_k \tanh \frac{1}{2}\beta_c\epsilon_k \right] \quad (3.134)$$

ce qui montre que a est du signe de $(T - T_c)$. Néanmoins, le potentiel chimique varie pour $T \neq T_c$ et la dépendance en température de a n'est pas triviale.

L'énergie libre de Ginsburg Landau est donnée par

$$\mathcal{F}_{GL} = \mathcal{F}_N + \int d^3r \left[a |\Phi_0|^2 + \frac{1}{2} b |\Phi_0|^4 \right] \quad (3.135)$$

où \mathcal{F}_N correspond à l'état normal. La minimisation par rapport à Φ_0 donne deux solutions: une solution nulle pour $a > 0$ correspondant à l'état normal, et une solution $\Phi_0 = [-a/b]^{-1/2}$ pour $a < 0$ correspondant à $T < T_c$. En présence d'un champ magnétique extérieur $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$, le champ Φ_0 dépend de la position, et l'énergie libre, invariante de jauge, s'écrit

$$\mathcal{F}_{GL} = \mathcal{F}_N + \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m_\Phi} (\vec{\nabla} - \frac{2ie}{\hbar}\vec{A})\Phi^*(\vec{r}) (\vec{\nabla} + \frac{2ie}{\hbar}\vec{A})\Phi(\vec{r}) + V_{eff} + \frac{B^2}{2\mu_0} \right] \quad (3.136)$$

La masse m_Φ est donnée par le développement de la self-énergie en q

$$\Sigma_B(q) = \Sigma_B(0) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\Phi} + \dots \quad (3.137)$$

si l'on néglige le facteur de renormalisation $[1 - \partial\Sigma/\partial\omega]^{-1}$. La variation par rapport aux champs Φ et par rapport à A donne les deux équations de GL. Cette énergie libre permet entre autres de définir dimensionnellement deux longueurs ξ pour les champs et λ pour le potentiel vecteur

$$\frac{\hbar^2}{2m_\Phi} \frac{1}{\xi^2} = a \quad (3.138)$$

et

$$\frac{\hbar^2}{2m_\Phi} \left(\frac{2e}{\hbar}\right)^2 |\Phi_0|^2 = \frac{1}{2\mu_0} \frac{1}{\lambda^2} \quad (3.139)$$

La masse du champ \vec{A} , $M_A^{-2} = \mu_0 \lambda^2$ est associée à la brisure de la symétrie de jauge initiale:

$$\Phi \rightarrow e^{-i\frac{2e}{\hbar}\chi} \Phi \quad \text{et} \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \chi \quad (3.140)$$

De façon explicite, on peut poser par exemple

$$\Phi = (\Phi_0 + R(\vec{r})) e^{i\frac{2e}{\hbar}\chi} \quad (3.141)$$

On obtient alors pour la densité d'énergie libre

$$f = \frac{\hbar^2}{2m_\Phi} (\vec{\nabla} R)^2 + 2b|\Phi_0|^2 R^2 + \frac{B^2}{2\mu_0} + \frac{\hbar^2}{2m_\Phi} \left(\frac{2e}{\hbar}\right)^2 |\Phi_0|^2 \vec{V}^2 + \dots \quad (3.142)$$

où l'on a posé $\vec{V} = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$ avec maintenant $\vec{B} = \text{rot} \vec{V}$. La phase χ du champ est partie de la densité d'énergie. Le potentiel vecteur est devenu massif. C'est le mécanisme de Higgs.

Phase superfluide

Dans la phase superfluide, on pose $\Phi_0(x) = |\Phi_0| e^{i\alpha}$ où $|\Phi_0|$ et α sont des constantes réelles. La fonction de Green des fermions est donnée par

$$M^0(k, \bar{\nu}; k', \bar{\nu}') = \delta_{k,k'} \delta_{\bar{\nu}, \bar{\nu}'} \beta \begin{pmatrix} i\bar{\nu} + \epsilon_k & g\Phi_0 \\ g\Phi_0^* & i\bar{\nu} - \epsilon_k \end{pmatrix} \quad (3.143)$$

ce qui correspond avec les notations standard, et $n_0 = \Phi_0^* \Phi_0$

$$G_{11}^0(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{u_k^2}{i\bar{\nu} + \gamma_k} + \frac{v_k^2}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \right] \quad (3.144)$$

$$G_{22}^0(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{v_k^2}{i\bar{\nu} + \gamma_k} + \frac{u_k^2}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \right] \quad (3.145)$$

$$G_{12}^0(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{u_k v_k}{i\bar{\nu} + \gamma_k} - \frac{u_k v_k}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \right] e^{+i\alpha} \quad (3.146)$$

$$G_{21}^0(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{u_k v_k}{i\bar{\nu} + \gamma_k} - \frac{u_k v_k}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \right] e^{-i\alpha} \quad (3.147)$$

Les équations de stationnarité sont

$$E_0 \Phi_0 - \frac{g}{M} \sum_{k, \bar{\nu}} Tr_{22} \left\{ \frac{\tau^-}{2} G^0(k, \bar{\nu}) \right\} = 0 \quad (3.148)$$

et

$$E_0 \Phi_0^* - \frac{g}{M} \sum_{k, \bar{\nu}} Tr_{22} \left\{ \frac{\tau^+}{2} G^0(k, \bar{\nu}) \right\} = 0 \quad (3.149)$$

Les équations de stationnarité se réduisent alors à l'équation du gap de BCS

$$E_0 = \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k}{2 \gamma_k} \quad (3.150)$$

Le terme de l'action qui correspond aux fermions, est donné par

$$S_F^0 = \beta \sum_k \epsilon_k + Tr Ln G^0 \quad (3.151)$$

on trouve

$$S_F^0 = \beta \sum_k (\epsilon_k - \gamma_k) - 2 \sum_k Ln (1 + e^{-\beta \gamma_k}) \quad (3.152)$$

Sans les fluctuations, on obtient l'action correspondant au champ moyen (*tree level*)

$$S[\Phi_0^*, \Phi_0] = \beta M E_0 \Phi_0^* \Phi_0 + \beta \sum_k (\epsilon_k - \gamma_k) - 2 \sum_k Ln (1 + e^{-\beta \gamma_k}) \quad (3.153)$$

et le potentiel effectif correspondant

$$V_{eff}^{tree} = E_0 \Phi_0^* \Phi_0 + \frac{1}{M} \sum_k (\epsilon_k - \gamma_k) - \frac{2}{\beta M} \sum_k Ln (1 + e^{-\beta \gamma_k}) \quad (3.154)$$

On retrouve l'approximation du champ moyen, qui revient à sommer tous les diagrammes pour les champs bosoniques constants. Les fluctuations quadratiques sont alors données par

$$S_2 = \beta \sum_{q, \bar{\mu}} \Phi^*(q, \bar{\mu}) [i\bar{\mu} + E_0] \Phi(q, \bar{\mu}) + \frac{1}{2} Tr [G^0 \delta M G^0 \delta M] \quad (3.155)$$

avec

$$\delta M(k, \bar{\nu}; k', \bar{\nu}') = \beta \frac{g}{\sqrt{M}} \begin{pmatrix} 0 & \Phi(k - k', \bar{\nu} - \bar{\nu}') \\ \Phi^*(k' - k, \bar{\nu}' - \bar{\nu}) & 0 \end{pmatrix} \quad (3.156)$$

La partie quadratique se met alors sous la forme

$$S_2 = \frac{1}{2} \sum_{q, \bar{\mu}} \tilde{\Phi}^+(q, \bar{\mu}) K(q, \bar{\mu}) \tilde{\Phi}(q, \bar{\mu}) \quad (3.157)$$

avec

$$\tilde{\Phi}(q, \bar{\mu}) = \begin{bmatrix} \Phi(+q, +\bar{\mu}) \\ \Phi^*(-q, -\bar{\mu}) \end{bmatrix} \quad (3.158)$$

La matrice K est donnée par

$$K(q, \bar{\mu}) = \beta \begin{pmatrix} i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_{11}(q, \bar{\mu}) & \Sigma_{02}(q, \bar{\mu}) \\ \Sigma_{20}(q, \bar{\mu}) & -i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu}) \end{pmatrix} \quad (3.159)$$

Les self-énergies sont données par

$$\Sigma_{11}(q, \bar{\mu}) = \frac{g^2}{M} \beta \sum_{k, \bar{\nu}} G_{22}(k, \bar{\nu}) G_{11}(k + q, \bar{\mu} + \bar{\nu}) \quad (3.160)$$

$$\Sigma_{02}(q, \bar{\mu}) = \frac{g^2}{M} \beta \sum_{k, \bar{\nu}} G_{12}(k, \bar{\nu}) G_{12}(k + q, \bar{\mu} + \bar{\nu}) \quad (3.161)$$

$$\Sigma_{20}(q, \bar{\mu}) = \frac{g^2}{M} \beta \sum_{k, \bar{\nu}} G_{21}(k, \bar{\nu}) G_{21}(k + q, \bar{\mu} + \bar{\nu}) \quad (3.162)$$

On a utilisé la symétrie particule-antiparticule $G_{22}(-k, -\bar{\nu}) = -G_{11}(k, \bar{\nu})$ pour obtenir l'expression des self-énergies. Notons que l'on a aussi la symétrie $\Sigma_{11}^*(q, \bar{\mu}) = \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu})$. Du fait que Σ_{02} et Σ_{20} ne diffèrent que par le facteur de phase α du paramètre d'ordre, on pose

$$\Sigma_{02}(q, \bar{\mu}) = \bar{\Sigma}_{02}(q, \bar{\mu}) e^{2i\alpha} \quad (3.163)$$

et

$$\Sigma_{20}(q, \bar{\mu}) = \bar{\Sigma}_{02}(q, \bar{\mu}) e^{-2i\alpha} \quad (3.164)$$

Les expressions de Σ_{11} et $\bar{\Sigma}_{02}$ ont déjà été calculées précédemment pour la valeur $n_0 g^2 = g^2 |\Phi_0|^2$. Rappelons que la condition de stationnarité est donnée par la relation

$$\Sigma_{11}(0, 0) + E_0 = \bar{\Sigma}_{02}(0, 0) \quad (3.165)$$

Le calcul précédent est équivalent au calcul RPA pour la fonction de Green des bosons, avec le paramètre d'ordre $|\Phi_0|$ et les fonctions de Green de BCS pour les fermions. L'action effective S_2 donne directement la fonction de Green des bosons $B(q, \bar{\mu})$ qui correspond à la forme quadratique dans l'exponentielle.

$$B^{-1}(q, \bar{\mu}) = \beta \begin{pmatrix} i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_{11}(q, \bar{\mu}) & \bar{\Sigma}_{02}(q, \bar{\mu}) e^{+2i\alpha} \\ \bar{\Sigma}_{02}(q, \bar{\mu}) e^{-2i\alpha} & -i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_{11}(-q, -\bar{\mu}) \end{pmatrix} \quad (3.166)$$

Les pôles de $B(q, \omega) = -\beta B(q, i\bar{\mu} = -\omega - i\eta)$ donnent un spectre linéaire $\omega = v_s q$ pour les grandes longueurs d'ondes où v_s est la vitesse du son.

Mode de Goldstone

Le résultat RPA, donne un spectre linéaire pour $q \rightarrow 0$ et qui commence à une énergie nulle (mode de masse nulle). On montre comment le théorème de Goldstone, ou l'identité de Ward qui lui est associée permet d'identifier le mode de masse nulle de la phase superfluide et de retrouver le théorème de Hugenholtz et Pines qui établit l'identité $\Sigma_{11} + E_0 = \bar{\Sigma}_{02}$. Dans le cas de la superfluidité, la brisure de symétrie spontanée concerne, en l'absence de champs électromagnétiques, la symétrie $U(1)$ globale, c'est-à-dire les transformations de phases. L'action de départ $S[\bar{\Psi}, \Psi, \Phi^*, \Phi]$ est invariante par les transformations de phases globales

$$\Psi_\sigma(x) \rightarrow e^{ie\alpha} \Psi_\sigma(x) \quad , \quad \bar{\Psi}_\sigma(x) \rightarrow e^{-ie\alpha} \bar{\Psi}_\sigma(x) \quad (3.167)$$

pour les fermions, et

$$\Phi(x) \rightarrow e^{i2e\alpha} \Phi(x) \quad , \quad \Phi^*(x) \rightarrow e^{-i2e\alpha} \Phi^*(x) \quad (3.168)$$

pour les bosons où e est la charge d'un fermion ($2e$ la charge d'un boson) et α est une constante arbitraire. Cette symétrie reflète la conservation globale de la charge. Dans l'état supra, la phase α du paramètre d'ordre prend une valeur arbitraire. Du fait que $Z[J^*, J]$ ou que $W[J^*, J]$ est invariante par cette transformation, alors le potentiel effectif $\Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]$ est lui aussi invariant par cette transformation. La transformation est donnée par

$$\begin{bmatrix} \Phi_c(x) \\ \Phi_c^*(x) \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_c(x) \\ \Phi_c^*(x) \end{bmatrix} \quad (3.169)$$

soit encore en utilisant les spineurs à deux composantes

$$\tilde{\Phi}_c(x) \rightarrow e^{i\alpha\tau_3} \tilde{\Phi}_c(x) \quad (3.170)$$

pour une transformation infinitésimale, on obtient

$$\tilde{\Phi}_c(x) \rightarrow 1 + i\alpha\tau_3 \tilde{\Phi}_c(x) \quad (3.171)$$

L'invariance du potentiel effectif est

$$\Gamma[\tilde{\Phi}_c(x) + i\alpha\tau_3 \tilde{\Phi}_c(x)] = \Gamma[\tilde{\Phi}_c(x)] \quad (3.172)$$

ce qui donne

$$\Gamma[\Phi_c(x) + i\alpha\Phi_c(x), \Phi_c^* - i\alpha\Phi_c^*(x)] = \Gamma[\Phi_c(x), \Phi_c^*(x)] \quad (3.173)$$

et en développant au premier ordre

$$\int d^4x \frac{\delta\Gamma}{\delta\Phi_c(x)} \Phi_c(x) - \int d^4x \frac{\delta\Gamma}{\delta\Phi_c^*(x)} \Phi_c^*(x) = 0 \quad (3.174)$$

On obtient deux identités de Ward en dérivant selon $\Phi_c(x')$ pour la première

$$\int d^4x \frac{\delta^2\Gamma}{\delta\Phi_c(x')\delta\Phi_c(x)} \Phi_c(x) + \int d^4x \frac{\delta\Gamma}{\delta\Phi_c(x)} \delta(x-x') - \int d^4x \frac{\delta^2\Gamma}{\delta\Phi_c(x')\delta\Phi_c^*(x)} \Phi_c^*(x) = 0 \quad (3.175)$$

et selon $\Phi_c^*(x')$ pour la seconde

$$\int d^4x \frac{\delta^2\Gamma}{\delta\Phi_c^*(x')\delta\Phi_c(x)} \Phi_c(x) - \int d^4x \frac{\delta^2\Gamma}{\delta\Phi_c^*(x')\delta\Phi_c^*(x)} \Phi_c^*(x) - \int d^4x \frac{\delta\Gamma}{\delta\Phi_c^*(x)} \delta(x-x') = 0 \quad (3.176)$$

soit

$$\int d^4x \Gamma_{21}(x', x) \Phi_c(x) - \int d^4x \Gamma_{22}(x', x) \Phi_c^*(x) = J^*(x') \quad (3.177)$$

et

$$\int d^4x \Gamma_{11}(x', x) \Phi_c(x) - \int d^4x \Gamma_{12}(x', x) \Phi_c^*(x) = -J(x') \quad (3.178)$$

Sous forme matricielle, on obtient

$$\int d^4x \Gamma(x' - x) \tau_3 \tilde{\Phi}_c(x) = -\tau_3 \tilde{J}(x) \quad (3.179)$$

Lorsque l'on annule les sources, $J(x) \rightarrow 0$, alors $\Phi_c(x) \rightarrow \Phi_0(x)$. Pour une solution constante, on obtient $\Gamma(q=0) \tau_3 \bar{\Phi}_0 = 0$ quand on passe en Fourier, soit encore

$$B^{-1}(q=0) \tau_3 \bar{\Phi}_0 = 0 \quad (3.180)$$

De façon explicite, l'équation à résoudre est

$$\begin{pmatrix} E_0 + \Sigma_{11} & \bar{\Sigma}_{02} e^{i2\alpha} \\ \bar{\Sigma}_{02} e^{-i2\alpha} & E_0 + \Sigma_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Phi_0| e^{i\alpha} \\ |\Phi_0| e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = 0 \quad (3.181)$$

La première valeur propre donne la condition de Hugenholtz et Pines, $E_0 + \Sigma_{11} = \bar{\Sigma}_{02}$ alors que l'autre vecteur propre de $B^{-1}(q=0)$ est Φ_0 avec la valeur propre $2\bar{\Sigma}_{02}$.

Mode de Higgs

Du fait que les champs des bosons sont chargés, le mode de Goldstone n'est pas réalisé. Il est absorbé par le mode de Higgs. Le spectre des bosons va être poussé à la fréquence plasmon et le champ magnétique va devenir massif, l'inverse de cette masse correspondant à la longueur de London. Les fluctuations quadratiques sont décrites par une fonction de Green de la forme

$$G(q, \omega) = \frac{1}{\rho_s (\omega^2 - v_s^2 q^2)} \quad (3.182)$$

où v_s est la vitesse superfluide et ρ_s est la raideur superfluide. L'action correspondante est

$$S = \frac{\rho_s}{2} \int d^4x \Phi^*(x) \left[\partial_t^2 - v_s^2 \nabla^2 \right] \Phi(x) \quad (3.183)$$

en présence d'un champ magnétique $\vec{B}(\vec{r}) = \text{rot } \vec{A}(\vec{r})$, on remplace le gradient par

$$\vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla} - \frac{2ie}{\hbar} \vec{A} \quad (3.184)$$

et l'on rajoute la densité d'énergie magnétique $B^2/2\mu_0$ à l'action. Dans ce cas, le champ \vec{A} , qui possède initialement le spectre $\omega = cq$ (où c est la vitesse de la lumière) devient massif dans la phase superfluide. La longueur de London est

$$\frac{1}{\lambda_L^2} = \mu_0 (2e)^2 |\Phi_0|^2 \rho_s v_s^2 \quad (3.185)$$

Notons que dans le cas du gaz de Bose dilué (où l'on néglige la dépendance en moment et en énergie des self-énergies) avec une masse m , on obtient $1/\lambda_L^2 = \mu_0 (2e)^2 |\Phi_0|^2 / m$. De même, le spectre des bosons commence alors à la fréquence plasmon ω_p donnée par

$$\omega_p^2 = \frac{(2e)^2 |\Phi_0|^2 \mu_0}{c^2} \rho_s v_s^2 \quad (3.186)$$

3.6 L'approche de Friedberg et Lee

Le modèle Boson-Fermion a été largement utilisé à partir de 1989 par Friedberg et Lee dans le contexte des supras à hautes températures critiques [10]. Le choix de ce modèle est basé sur l'hypothèse que dans les hauts T_c , la transition supra correspond à une condensation de Bose-Einstein de paires d'électrons déjà formées dans la phase normale. C'est le modèle de Schafroth (1954) de la supraconductivité [6]. Les bosons sont supposés être des paires d'électrons avec une température de dissociation très supérieure à la température de condensation. L'hypothèse de Friedberg et Lee s'appuie sur le fait que dans les hauts T_c , la longueur de cohérence, qui est censée mesurer la taille des paires, est très faible, de l'ordre de 10 à 20 Å. C'est une utilisation phénoménologique du modèle Boson-Fermion qui ne fait aucune hypothèse sur l'origine physique des paires. La démarche de Lee et Friedberg est de prendre des bosons avec un spectre quadratique (renormalisé) qui permet d'obtenir une transition de Bose-Einstein, puis dans la phase superfluide, d'obtenir un gap dans les excitations électroniques à l'aide du champ-moyen [10, 11]. La transition superfluide correspond donc à la condensation de Bose-Einstein des bosons, dont la température de Bose est à trois dimensions

$$T_{BE} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_B k_B} \left(\frac{1}{2.612} \frac{N_B}{\Omega} \right)^{2/3} \quad (3.187)$$

Si l'on prend les données standard d'un composé type comme $YBaCuO$, $n \simeq 10^{21} \text{cm}^3$ et $T_c \simeq 100K$, on obtient $m_B \simeq 100m_e$, ce qui est une très grande masse pour les bosons. Si l'on considère des systèmes plus réalistes à deux dimensions ou anisotropes, on obtient des masses plus raisonnables.

Du fait que le spectre E_q n'est pas modifié au niveau du champ-moyen, on obtient le même spectre dans la phase superfluide. Dans ce cas, l'énergie libre de Ginzburg Landau s'écrit en fonction des champs de bosons

$$\mathcal{F}_{GL} = \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_B} \left(\vec{\nabla} + \frac{i2e}{\hbar} \vec{A} \right) \Phi^* \left(\vec{\nabla} - \frac{i2e}{\hbar} \vec{A} \right) \Phi + a|\Phi|^2 + \frac{1}{2}b|\Phi|^4 + \frac{1}{2} \frac{|\vec{B}|^2}{\mu_0} \right\} \quad (3.188)$$

Le potentiel pour la brisure de symétrie défini par les constantes a et b est obtenu à l'aide de l'énergie de l'état fondamental

$$\mathcal{E} = \Omega n_0 E_0 + \sum_k (\epsilon_k - \gamma_k) \quad (3.189)$$

On obtient alors

$$a = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial n_0} = E_0 + \Sigma_{11} \quad (3.190)$$

et

$$b = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial n_0^2} = \Sigma_{02}/n_0 \quad (3.191)$$

On obtient alors immédiatement la longueur de cohérence $\xi = 2m_B n_0 b / \hbar^2$ et la longueur de London, $\lambda_L^{-2} = (2e)^2 n_0 \mu_0 / m_B$. Le critère pertinent avancé par Friedberg et Lee, est que le

rapport λ_T/d , la longueur d'onde thermique divisée par la distance entre bosons est un rapport universel: il vaut 1.4 pour des bosons libres et 1.6 pour $H_e - II$. Pour obtenir ce rapport pour les hauts T_c , Friedberg et Lee utilisent la loi empirique (*Uemera Plot*) $T_c \cdot \lambda_T^{-2}(T=0) = 2.810^{-12} SI$. En utilisant $n_B = 1/d^2 c$ avec $c \simeq 10 \text{ \AA}$ et la définition de la longueur thermique à T_c

$$\lambda_T = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_B k_B T_c} \right)^{1/2} \quad (3.192)$$

on obtient alors $\lambda_T/d = 2.9$, dans l'hypothèse où le nombre total de bosons ne varie pas entre 0 et T_c .

Dans ce qui suit nous résolvons les équations du champ-moyen pour une masse de bosons finie. Comme exemple, nous prenons $m_B = 10m$, (au sens des liaisons fortes), et toujours $\Delta_B = 0.4$. La figure 3.9 montre les remplissages pour les fermions, les bosons et le condensat pour $T \leq T_c$, ainsi que le potentiel chimique pour deux valeurs de T_c pour un couplage $g^2 = 0.01$. On observe schématiquement que le nombre de fermions est fixe, avec une légère variation du potentiel chimique, alors que les bosons se comportent comme un gaz de Bose pour $T \leq T_{BB}$. La figure 3.10 montre la variation du condensat pour ces deux valeurs de T_c . On observe que l'on s'éloigne du comportement du gaz libre en $[1 - (T/T_{BB})^{3/2}]$ lorsque le nombre de bosons n'est pas très supérieur au nombre de fermions. Notons que le gap des fermions est simplement $\Delta_{BCS}(T) = \sqrt{g^2 n_0(T)}$, et subit donc le même comportement en température. Enfin, la figure 3.11 montre T_c en fonction du nombre de bosons pour deux couplages différents ainsi que pour le couplage nul. Pour le couplage nul, on trouve que $T_c \sim n_{bos}^{0.6}$, qui est un peu différent du $2/3$ du gaz libre, mais la relation est toujours une loi de puissance. Pour un couplage non nul, on perd cette relation en loi de puissance. La température critique est fortement augmentée par le couplage. L'espace de phase semble jouer un rôle beaucoup moins important.

Ces quelques résultats numériques, montrent qu'il est difficile de concilier un couplage non nul, nécessaire pour le gap d'excitations des électrons et une transition due uniquement à une condensation de Bose-Einstein. Par contre, on voit que dans la phase superfluide, on retrouve beaucoup de similitudes avec le mélange libre.

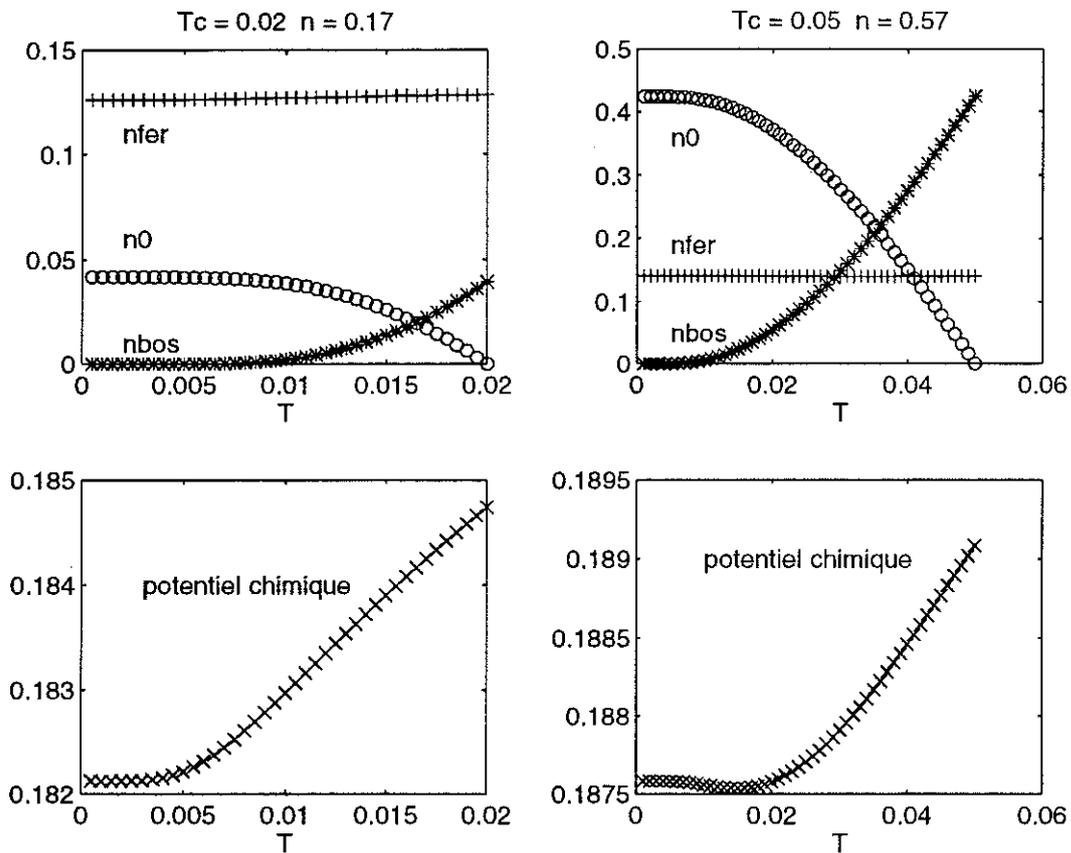


Figure 3.9: Solution des équations champ-moyen pour des bosons de masse finie, $m_B = 10m$, avec $\Delta_B = 0.4$ et $g^2 = 0.01$. La somme sur \mathbf{k} est remplacée par une intégrale sur l'énergie avec une densité d'états en $\sqrt{x(1-x)}$. Les figures de gauche montrent les densités de particules et le potentiel chimique pour un $T_c = 0.02$ correspondant à un remplissage de $n = 0.17$ alors que les figures de droite sont pour un $T_c = 0.05$ correspondant à un remplissage de $n = 0.57$.

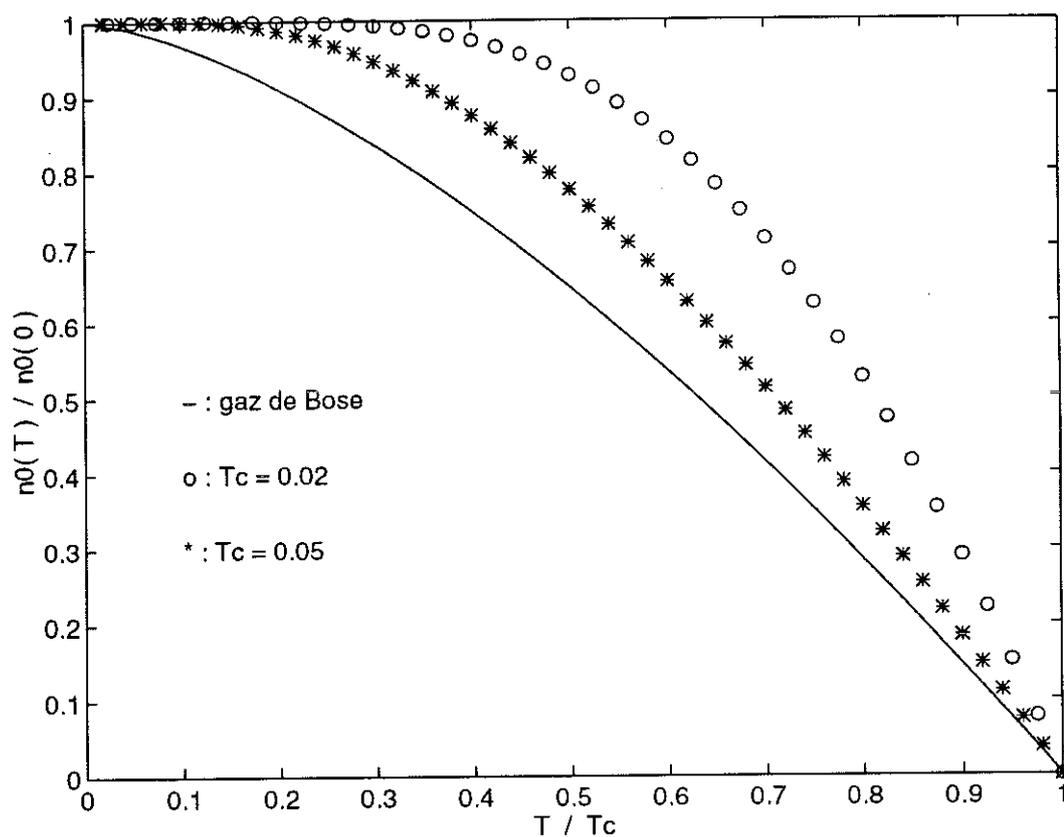


Figure 3.10: Solution des équations champ-moyen pour des bosons de masse finie, $m_B = 10m$, avec $\Delta_B = 0.4$ et $g^2 = 0.01$. La figure montre le rapport $n_0(T)/n_0(0)$ en fonction de T/T_c . La somme sur k est remplacée par une intégrale sur l'énergie avec une densité d'états en $\sqrt{x(1-x)}$.

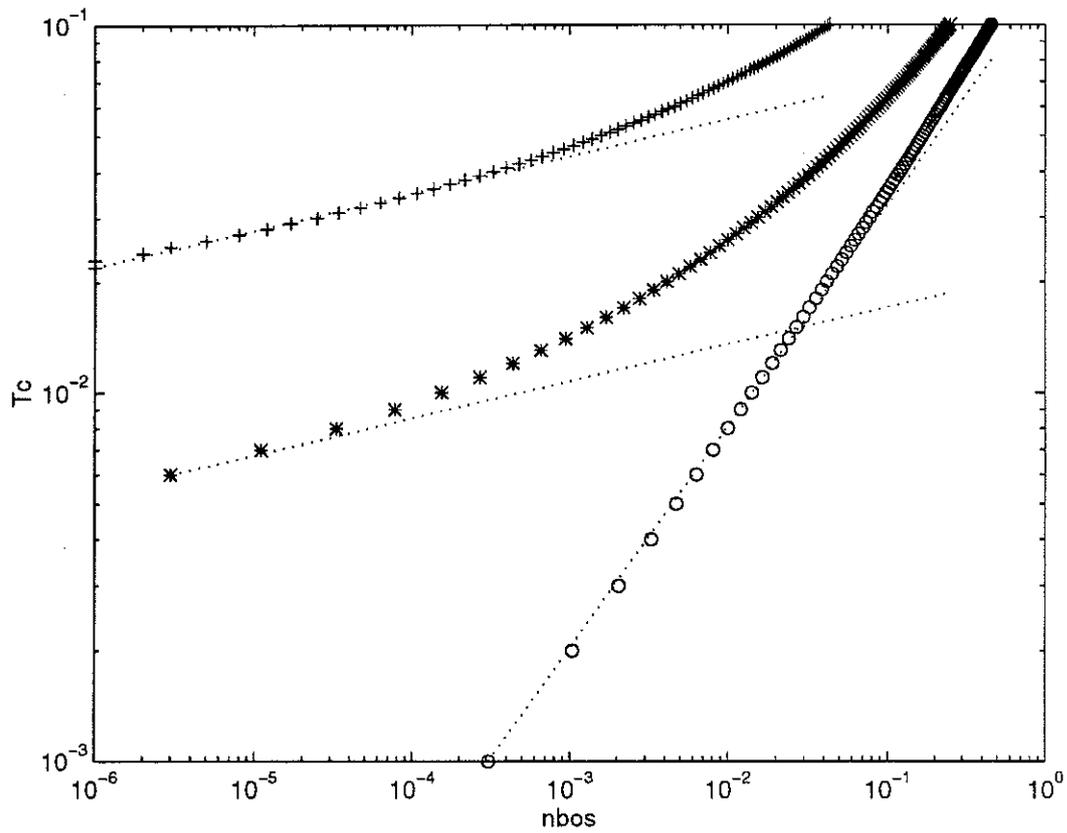


Figure 3.11: Solution des équations champ-moyen à T_c pour des bosons de masse finie, $m_B = 10m$, avec $\Delta_B = 0.4$. La figure montre T_c en fonction du nombre de bosons n_{bos} pour plusieurs couplages: $g^2 = 0$ (o), $g^2 = 0.01$ (*) et $g^2 = 0.1$ (+). La somme sur k est remplacée par une intégrale sur l'énergie avec une densité d'états en $\sqrt{x(1-x)}$.

3.7 Conclusion

Dans un premier temps, nous avons étudié les fonctions de Green à une particule pour les fermions et les bosons, ainsi que la fonction de Green à deux particules pour les paires de Cooper au second ordre de la théorie des perturbations (RPA). Nous avons obtenu que la transition superfluide des bosons et que la transition supra des fermions correspondent à la même transition. Nous avons montré dans l'étude de la self-énergie des bosons, que le spectre des bosons, initialement sans dispersion devenait quadratique en moment à T_C , $\omega_q \sim q^2$ qui est la condition nécessaire pour obtenir une condensation de Bose-Einstein dans un système de bosons libres. Nous avons obtenu le critère d'instabilité qui donne l'expression de la température critique. Dans un deuxième temps, nous avons appliqué la théorie du champ-moyen pour la phase superfluide. Nous avons identifié les paramètres d'ordre et montré qu'il n'y avait en fait qu'un seul paramètre d'ordre superfluide commun pour le modèle Boson-Fermion. Nous avons obtenu les équations self-consistantes du champ-moyen, et nous les avons résolues numériquement pour une large gamme de paramètres. Dans la limite des très faibles densités, nous avons retrouvé les résultats de la théorie standard de la supra adiabatique, notamment, le rapport $2\Delta_{BCS}/T_C = 3.5$. Le formalisme fonctionnel nous a permis d'identifier les excitations collectives des bosons aux excitations de basses énergies qui gouvernent la thermodynamique du système. Nous obtenons que dans la phase superfluide, les excitations sont les même que pour la supraconductivité conventionnelle décrite par la théorie de Ginzburg Landau. Cependant, le modèle Boson-Fermion est très dépendant par rapport à la concentration des bosons dans le système. Le potentiel chimique joue un rôle primordial dans ce modèle. Finalement, nous avons discuté l'approche de Friedberg et Lee. La théorie du champ-moyen qu'ils proposent n'est pas suffisante pour décrire les excitations dans l'état superfluide. L'identification d'une condensation de Bose-Einstein pour la transition superfluide, n'est pas cohérente avec le critère d'instabilité et avec l'existence d'excitations fermioniques possédant un gap.

La nature de la transition est un problème compliqué. Il n'existe pas de formalisme identique à celui de Ginzburg Landau pour des bosons superfluides capable de décrire la transition λ .

Chapitre 4

La Phase Normale

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous reportons des résultats numériques pour la phase normale du modèle Boson-Fermion, dans l'approximation des équations diagrammatiques couplées. Dans cette approximation, on considère uniquement les self-énergies pour les bosons et les fermions obtenues diagrammatiquement au second ordre de la théorie des perturbations, mais on remplace les propagateurs nus par les propagateurs habillés que l'on veut précisément calculer. On a ainsi des équations couplées pour les propagateurs des fermions et des bosons.

4.1.1 Equations couplées

Nous travaillons dans la représentation de Matsubara. Les fonctions de Green pour les fermions et les bosons sont définies par

$$G_F(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k + \Sigma_F(k, \bar{\nu})} \quad (4.1)$$

et

$$G_B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_B(q, \bar{\mu})} \quad (4.2)$$

Dans l'approximation diagrammatique, les self-énergies sont données par

$$\Sigma_F(k, \bar{\nu}) = + \frac{g^2}{M} \sum_q \sum_{\bar{\mu}} G_F(-k + q, -\bar{\nu} + \bar{\mu}) G_B(q, \bar{\mu}) \quad (4.3)$$

et

$$\Sigma_B(q, \bar{\mu}) = - \frac{g^2}{M} \sum_k \sum_{\bar{\nu}} G_F(-k + q, -\bar{\nu} + \bar{\mu}) G_F(k, \bar{\nu}) \quad (4.4)$$

Le principe du calcul est de partir de $G = G^0$ puis de calculer itérativement tour à tour les self-énergies et les fonctions de Green. Une fois que l'on a obtenu une solution qui ne varie plus d'une itération à l'autre, on a la solution self-consistante des équations. On définit l'erreur du

système d'équations comme étant le maximum entre les fonctions de Green et celles obtenues en itérant le système une fois supplémentaire. L'erreur du système pour n itérations est alors

$$\max_{i=B,F;k;m} |G_i^{(n)}(k, m) - G_i^{(n-1)}(k, m)| \quad (4.5)$$

4.1.2 Calcul sur réseau

Pour pouvoir effectuer les sommes $\vec{k} + \vec{q}$, nous travaillons sur des réseaux hypercubiques de dimensions $d = 1$ et $d = 2$. Les réseaux à trois dimensions sont en fait les plus intéressants dans notre problème, mais ils nécessitent des temps de calcul beaucoup trop longs pour nos moyens. Nous considérons une relation de dispersion ϵ_k du type liaison forte pour les fermions

$$\epsilon_k = \sum_{\alpha=1}^d [2t - 2t \cos k_\alpha] - \mu \quad (4.6)$$

La largeur de la bande des fermions $4t \times d$ sert d'unité d'énergie dans nos calculs. Nous incluons tous les processus Umklapp dans nos calculs. Toutes les fonctions $f(\vec{k})$ qui interviennent dans notre problème ont les mêmes propriétés de symétrie que ϵ_k . Pour $d = 1$, on calcule les self-énergies sur la moitié de la zone de Brillouin, alors que pour $d = 2$, on se contente du huitième.

4.1.3 Somme sur les fréquences de Matsubara

Du fait que les fonctions en représentation de Matsubara ne sont pas périodiques, on a des problèmes lorsque l'on effectue les convolutions pour calculer les self-énergies. Pour obtenir un résultat correct sur les 10 premières Matsubara, par exemple, on est contraint de prendre un nombre 100 ou 1000 fois plus grand, ce qui n'est malheureusement pas accessible en temps de calcul et en taille mémoire. Pour retrouver un bon comportement des self-énergies, avec des moyens plus modestes, nous avons adopté deux prescriptions. La première consiste à prendre un nombre pair de fréquences pour les fermions et impair pour les bosons. De cette façon, on respecte la symétrie par rapport à l'axe réel. La deuxième prescription consiste à écrire les fonctions de Green $G = G^0 + \delta G$, où G^0 sont les fonctions de Green non perturbées et δG est une quantité plus ou moins petite devant G^0 . La convolution pour le calcul d'une self-énergie s'écrit alors

$$\Sigma = G_1^0 G_2^0 + G_1^0 \delta G_2 + \delta G_1 G_2^0 + \delta G_1 \delta G_2 \quad (4.7)$$

Pour le premier terme, la somme sur les Matsubara peut être calculée analytiquement. On note cette somme Σ^0 . La self-énergie s'écrit alors sous la forme $\Sigma = \Sigma^0 + \delta \Sigma$. En utilisant l'expression analytique de Σ^0 on peut alors corriger la somme Σ . Nous avons obtenu des résultats très satisfaisants avec cette méthode. Pratiquement tous les problèmes de bords pour les convolutions sur les Matsubara sont absorbés dans Σ^0 : pour 100 fréquences de Matsubara, seules les deux ou trois dernières sont douteuses. On peut encore améliorer la méthode en considérant les termes croisés, mais cela n'a pas été nécessaire. Le prix à payer pour cette correction, est que Σ^0 dépend des fonctions de Fermi et de Bose qui peuvent induire des erreurs

à basses températures. Enfin, rappelons que pour les self-énergies, la partie réelle est paire, et la partie imaginaire impaire. Il suffit de calculer uniquement les fréquences de Matsubara positives, ou nulles.

4.1.4 Potentiel chimique

Les paramètres (physiques) du modèle que l'on met dans les équations sont assez nombreux. Explicitement, nous avons la constante de couplage g et le niveau bosonique Δ_B qui doivent être reliés subtilement aux quantités observables, puis nous avons la température T et le potentiel chimique μ . La température est un paramètre dont on saisit assez le sens et que l'on peut garder. Pour le potentiel chimique, on préfère l'évincer au profit de la densité de particules n . Les fonctions de Green permettent d'obtenir directement les nombres d'occupation n_k^F pour les fermions et n_q^B pour les bosons

$$n_k^F = +\frac{1}{2} - \sum_{\bar{\nu}} G_F(k, \bar{\nu}) \quad , \quad n_q^B = -\frac{1}{2} + \sum_{\bar{\mu}} G_B(q, \bar{\mu}) \quad (4.8)$$

On sait donc calculer à tout instant la densité de particules $n = n_{fer} + n_{bos}$ pour le système

$$n = \frac{1}{M} \sum_k n_k^F + \frac{1}{M} \sum_q n_q^B \quad (4.9)$$

Si l'on veut travailler à densité constante quand on varie un autre paramètre, il faut calculer le potentiel chimique qui vérifie cette équation. Là encore, on ne calcule pas directement n_k , mais on effectue les corrections en utilisant les expressions analytiques $n_F(\epsilon_k)$ et $n_B(E_0)$ pour les sommes sur les fonctions de Green nues.

4.1.5 Continuations analytiques

Les avantages de travailler dans la représentation de Matsubara sont multiples:

- (i) on effectue des sommes discrètes pour le calcul des self-énergies, alors qu'en représentation ω il faut effectuer des intégrales sur des fonctions presque singulières.
- (ii) les fonctions de Green n'ont pas de grandes variations et décroissent en $1/\bar{m}$ pour $\bar{m} \rightarrow \infty$, alors qu'en représentation ω , les fonctions de Green sont des sommes de fonctions delta, difficiles à représenter.
- (iii) on travaille loin de l'axe réel ce qui permet de prendre peu de vecteurs \vec{k} pour discrétiser la zone de Brillouin par exemple.

Le prix à payer est qu'il est difficile de revenir sur l'axe réel, c'est-à-dire faire les continuations analytiques pour obtenir les fonctions retardées

$$G^R(\omega) = -\beta G(i\bar{\nu}, i\bar{\mu} = -\omega - i\eta) \quad (4.10)$$

pour les fonctions de Green et

$$\Sigma^R(\omega) = \Sigma(i\bar{\nu}, i\bar{\mu} = -\omega - i\eta) \quad (4.11)$$

pour les self-énergies. Pour cela, nous avons utilisé un approximant de Padé à N points qui consiste à interpoler N valeurs de G ou Σ pour N fréquences de Matsubara par une fraction rationnelle $F(z)$

$$F(z) = \frac{a_1}{1 + \frac{a_2(z - z_1)}{1 + \frac{a_3(z - z_2)}{1 + \frac{a_4(z - z_3)}{1 + \dots 1 + a_N(z - z_{N-1})}}}} \quad (4.12)$$

Une fois que l'on a déterminé les N coefficients de la fraction continue, on peut l'évaluer en $z = \omega + i\eta$ pour obtenir les fonctions retardées.

Cette technique de continuation analytique, quoique assez incertaine et capricieuse, a été largement développée, et il existe des algorithmes assez fiables [35]. Dans nos calculs, nous avons obtenu de très bons résultats en vérifiant les deux points suivants. Le premier est de prendre le plus petit nombre possible de fréquences de Matsubara, entre 50 et 100 afin de limiter les erreurs de calcul dans les coefficients de la fraction continue. Le deuxième point est de fournir de bonnes données à l'algorithme. Pour cela on impose que l'erreur sur les fonctions de Green soit inférieure à 10^{-12} - 10^{-15} dans le calcul self-consistant. Notons que cette erreur diminue exponentiellement en fonction du nombre d'itérations dans nos calculs.

4.1.6 Organisation des calculs

L'objectif de ces calculs numériques était de déterminer les propriétés spectrales des fermions et des bosons près de la transition superfluide, c'est-à-dire lorsque $E_0 + \Sigma_B(0, 0) \rightarrow 0$. Pour des réseaux à une et deux dimensions, on ne s'attend pas à avoir une transition superfluide. Néanmoins, on espère pouvoir s'approcher suffisamment près de la singularité (le pôle des bosons) pour pouvoir comprendre le comportement du système près de la transition, c'est-à-dire pour $T \rightarrow 0$. Les questions auxquelles nous voulons répondre sont

1. comment le couplage va-t-il délocaliser les bosons? Est-ce que les bosons vont devenir des *bonnes quasiparticules* avec une relation de dispersion quadratique?
2. est-ce que les fermions restent de bonnes quasiparticules comme dans la théorie BCS jusqu'à T_c ?
3. quelle est la nature de la transition? Est-ce une transition du troisième ordre comme dans le cas de la condensation de Bose-Einstein, une transition du second ordre comme pour la supra classique décrite par Ginsburg Landau ou une transition du type λ ?

Dans un premier temps, nous regardons comment se comporte le système lorsque l'on augmente le couplage, pour T et n fixes. Dans un deuxième temps, nous regardons le comportement du système en présence du couplage lorsque l'on varie le remplissage n . Enfin la majorité des calculs se portera sur l'évolution du système en fonction de la température, pour un remplissage et un couplage constants.

Pour un réseau à une dimension, on obtient de *bons résultats* pour 100 vecteurs \vec{k} dans la zone de Brillouin et 100 fréquences de Matsubara. Le temps de calcul d'une itération est alors de $10mn$. Le nombre d'itérations varie de 10 à 150 dans nos résultats. A deux dimensions, on obtient des *résultats moyens* pour un réseau 31×31 , toujours avec 100 fréquences de Matsubara. Le temps de calcul d'une itération passe alors à $90mn$. En fait, c'est à partir de taille 41×41 que l'on arrive à retrouver presque toutes les singularités dans les fonctions spectrales. En raison de ces temps de calculs énormes, nous avons limité notre étude en fixant a priori un certain nombre de paramètres. Ainsi, dans tous nos calculs, nous avons pris $\Delta_B = 0.4$ et presque toujours $g^2 = 0.01$. De même, nous avons considéré le cas d'un demi remplissage, $n = 0.5$, qui est très supérieur à la densité critique, $n_{cr} = 0.20$ pour $d = 1$ et $n_{cr} = 0.14$ pour $d = 2$.

4.1.7 Autres calculs numériques

Nous reportons uniquement les résultats numériques obtenus pour les équations diagrammatiques couplées dans la représentation de Matsubara. Nous avons, d'autre part, considéré ces équations dans la représentation spectrale. Dans cette représentation, on est obligé d'introduire un résidu η non nul afin de pouvoir représenter les fonctions delta par des Lorentziennes de largeur η . On a la contrainte de prendre η au mieux égal à quelque fois la résolution en fréquence $\delta\omega$ que l'on se donne pour discrétiser l'énergie. Qualitativement, on obtient les mêmes résultats que pour la représentation en Matsubara, mais lorsque l'on essaye d'avoir des résultats quantitatifs, on est confronté à des problèmes insurmontables. Si l'on impose d'avoir une bonne résolution en énergie, il faut prendre $\delta\omega \rightarrow 0$ et $\eta \rightarrow 0$, mais dans ce cas, cela impose d'augmenter le nombre de vecteurs \vec{k} dans la zone de Brillouin pour avoir des sommes sur \vec{k} qui aient un sens (limite continue). Même pour les réseaux à une dimension, il n'est pas possible de reproduire des résultats de même qualité qu'en Matsubara.

Nous avons aussi essayé de résoudre les équations RPA équivalentes décrites en appendice. Dans ce cas, on peut aussi utiliser la représentation en Matsubara, mais avec la possibilité de faire directement la continuation analytique. Nous avons alors rencontré des problèmes pour la convergence des équations couplées. Notamment, les solutions sont discontinues lorsque l'on varie continuellement un des paramètres du problème, et le système peut ne plus converger du tout pour une variation petite d'un des paramètres. Il semble que cette approximation RPA ne soit pas capable de décrire le système convenablement.

4.2 Etude de la transition

Afin d'essayer de caractériser le système, qui dépend de nombreux paramètres, nous commençons par donner le comportement des valeurs statiques pour le réseau à une dimension et à deux dimensions, lorsque l'on fait varier la température, le couplage ou le nombre de particules dans le système. Dans les figures suivantes, nous donnons le pôle des bosons $E_{0R} = E_0 + \Sigma_B(0, 0)$ qui est notre mesure pour l'instabilité superfluide, le potentiel chimique μ que l'on calcule de façon self-consistante pour obtenir le remplissage constant ($n = 0.5$ dans tous nos résultats, sauf exceptions), la corrélation entre proches voisins des bosons $t_B = \langle b_{j+\delta}^+ b_j \rangle$ (qui est une mesure de la délocalisation des bosons) que l'on calcule selon

$$t_B = \frac{1}{2} \frac{1}{d} \frac{1}{M} \sum_q \left(\sum_{\alpha=1}^d \cos(q_\alpha) \right) \langle b_q^+ b_q \rangle \quad (4.13)$$

le nombre de bosons n_{bos} , et la longueur de corrélation ξ (qui est une mesure de l'ordre à longue portée des bosons) que l'on calcule en fittant les nombres d'occupation des bosons selon

$$\langle b_q^+ b_q \rangle \simeq \frac{a}{1 + \xi^2 q^2} \quad (4.14)$$

pour les petites valeurs de q . Rappelons que l'on travaille en unité de largeur de bande pour l'énergie ($2zt = 1$) et donc l'intégrale de saut pour les fermions vaut $t = 0.25$ pour $d = 1$ et $t = 0.125$ pour $d = 2$. La figure 4.1 montre ces paramètres en fonction de la température pour le réseau à $1d$. On peut alors fitter le pôle des bosons et la longueur de corrélation selon les formules

$$E_{0R} \sim (T - T_c)^\alpha \quad \text{et} \quad \xi \sim (T - T_c)^{-\nu} \quad (4.15)$$

On obtient alors $\alpha \simeq 2.4$ et $\nu \simeq 1.1$ pour une température critique T_c nulle. Notons que ces grandeurs statiques varient à moins de 1% dès que la taille du réseau est supérieure à 101. D'autre part, la valeur des exposants critiques ne doit pas être prise très au sérieux, du fait que l'on a travaillé à très basses températures, même si l'on obtient une T_c nulle propre à un système à une dimension.

La figure 4.2 montre les résultats analogues pour le réseau à deux dimensions. On remarque le même comportement des paramètres statiques en fonction de la température. Dans ce cas, on trouve pour les exposants critiques $\alpha \simeq 2.7$, $\nu \simeq 1.25$ alors que $T_c \simeq 0.0054$. Là encore, il est difficile de conclure sur les exposants critiques et surtout sur une T_c non nulle.

La figure 4.3 représente ces mêmes paramètres statiques pour le réseau à deux dimensions, en fonction du couplage g^2 pour une température donnée. On retrouve que l'effet d'augmenter le couplage est similaire à celui de diminuer la température, c'est-à-dire de se rapprocher de la transition.

Enfin, la figure 4.4 montre les paramètres en fonction du remplissage du système pour un couplage donné et une température donnée. L'effet d'augmenter n est le même que celui de diminuer T .

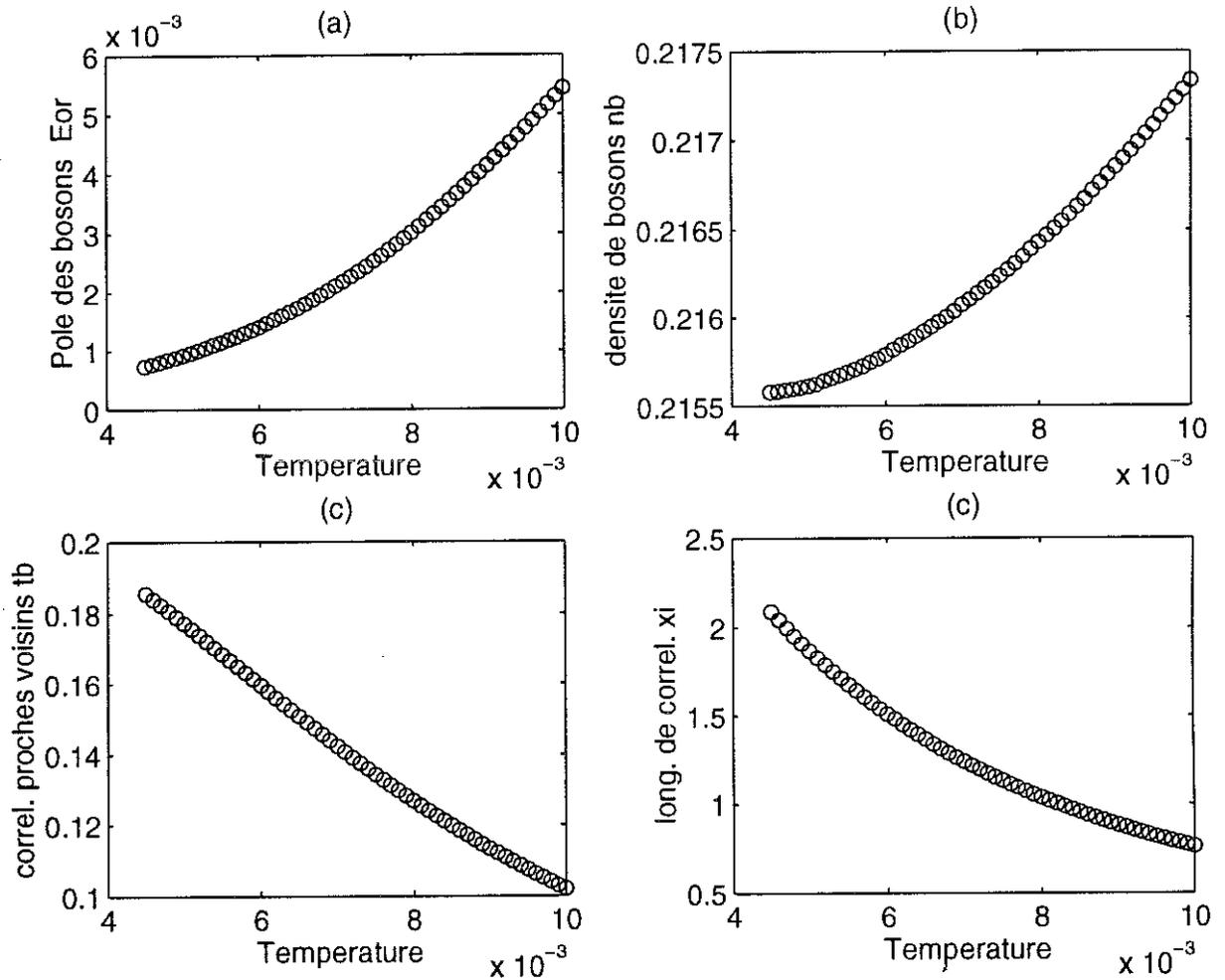


Figure 4.1: Paramètres statiques pour le réseau à $1d$, 101×101 , avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$, $n = 0.5000$ en fonction de la température. (a) représente le pôle des bosons renormalisé E_{0R} , (b) la densité de bosons, (c) le hopping des bosons t_b et (d) la longueur de corrélation ξ . Les énergies sont en unité de la largeur de bande.

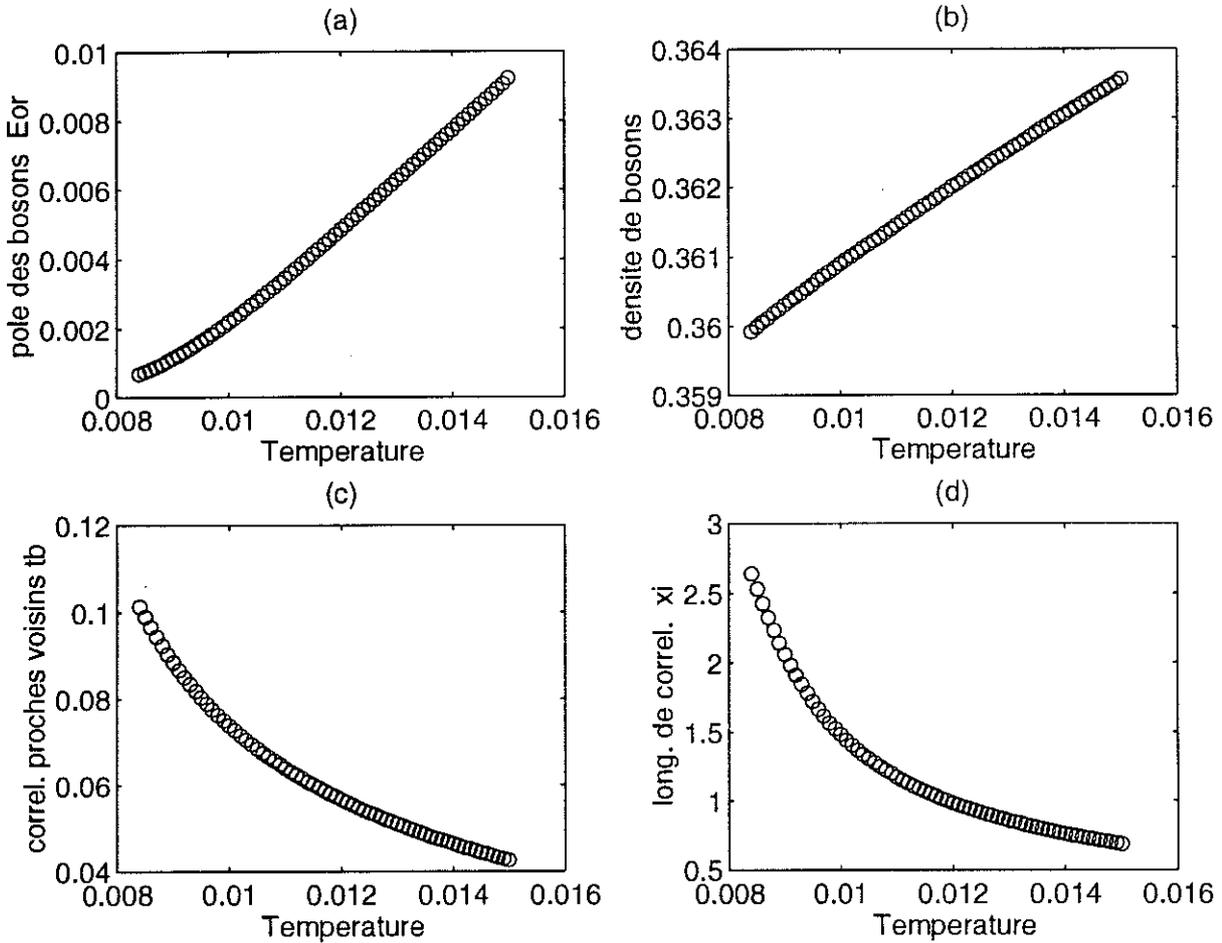


Figure 4.2: Paramètres statiques pour le réseau à $2d$, $21 \times 21 \times 51$, avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$, $n = 0.5000$ en fonction de la température. (a) représente le pôle des bosons renormalisé E_{0R} , (b) la densité de bosons, (c) le hopping des bosons t_B et (d) la longueur de corrélation ξ . Les énergies sont en unité de la largeur de bande.

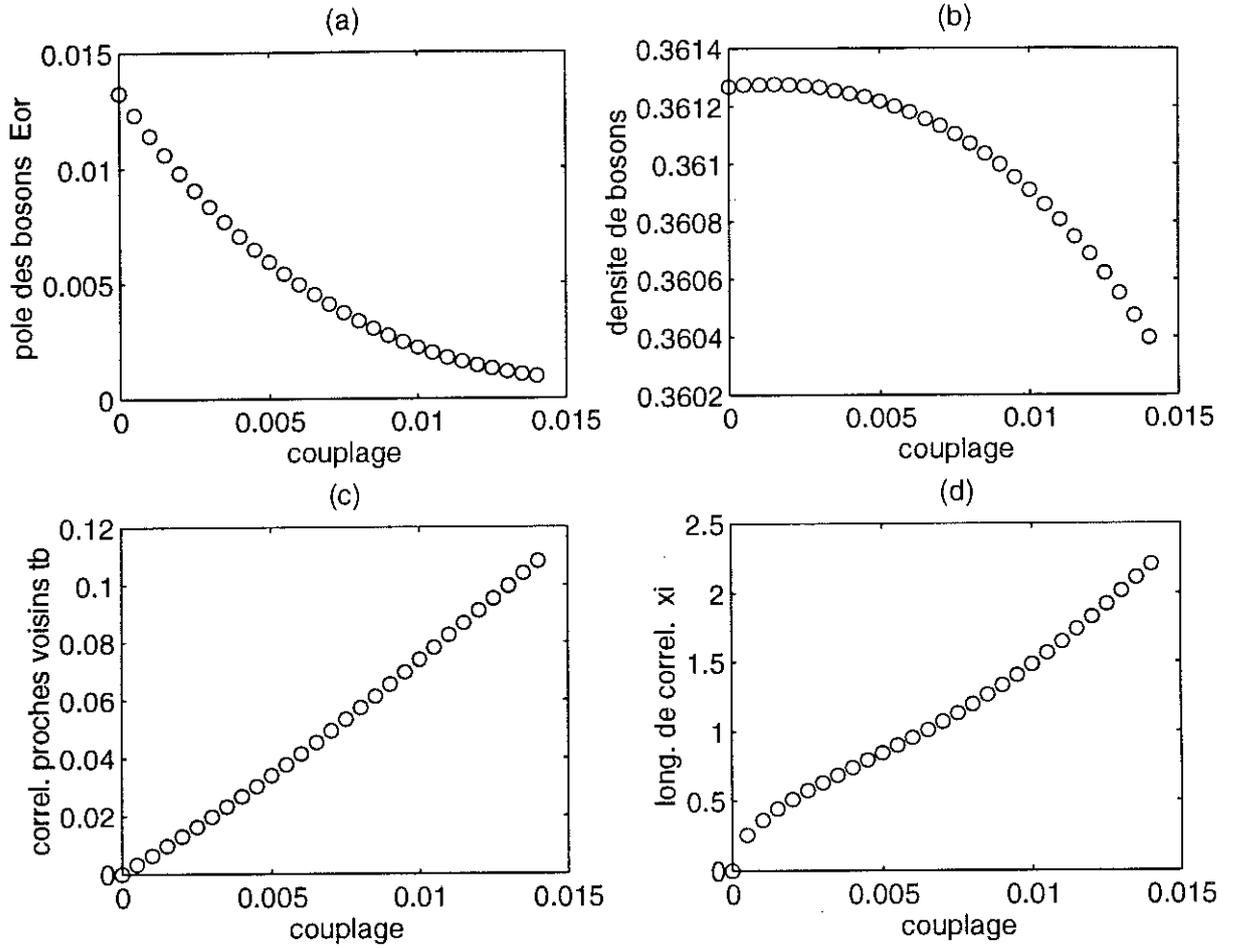


Figure 4.3: Paramètres statiques pour le réseau à $2d$, $21 \times 21 \times 51$, avec $\Delta_B = 0.4$, $T = 0.01$, $n = 0.5000$ en fonction du couplage. (a) représente le pôle des bosons renormalisé E_{0R} , (b) la densité de bosons, (c) le hopping des bosons t_B et (d) la longueur de corrélation ξ . Les énergies sont en unité de la largeur de bande.

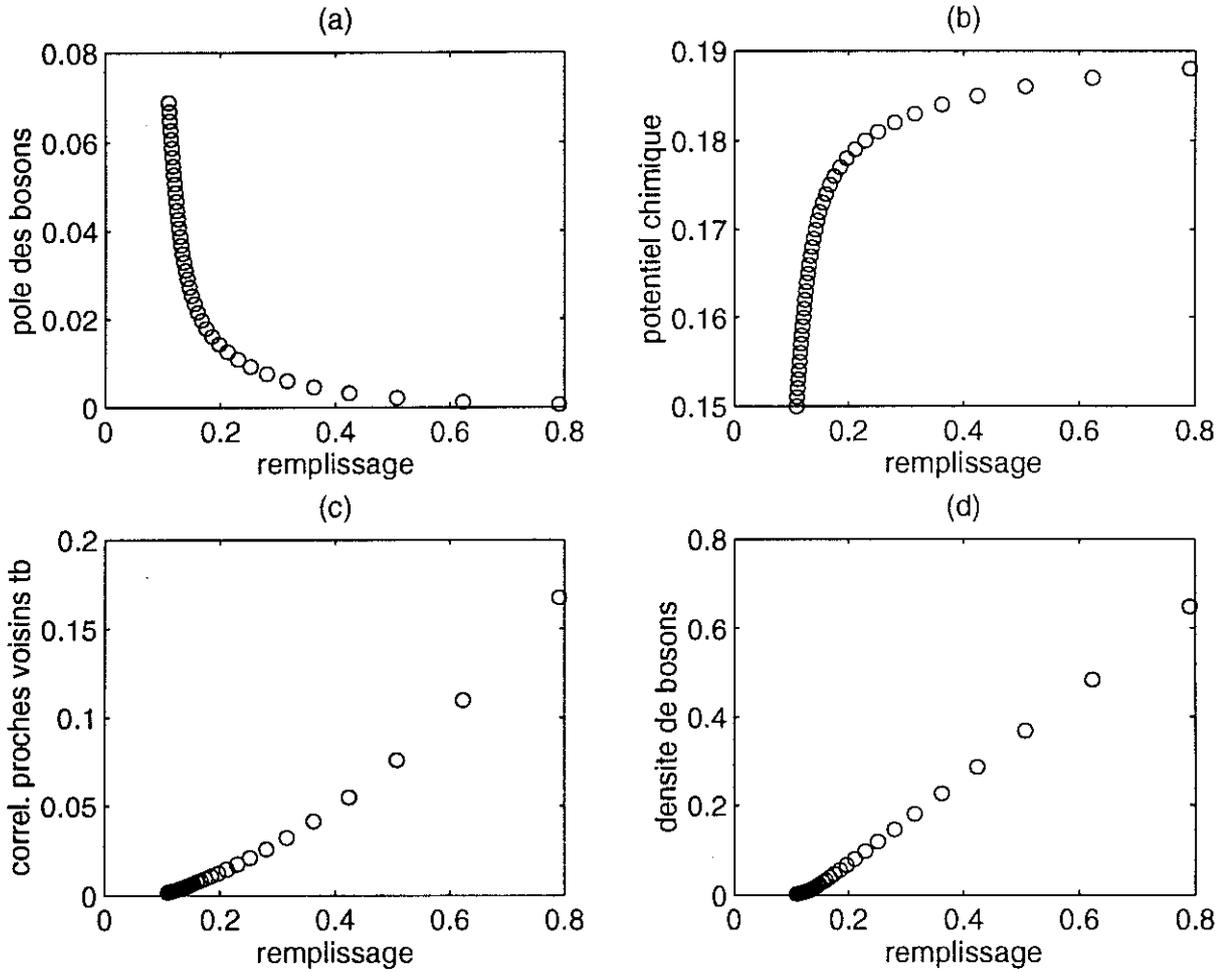


Figure 4.4: Paramètres statiques pour le réseau à $2d$, $21 \times 21 \times 51$, avec $\Delta_B = 0.4$, $T = 0.01$, $g = 0.01$ en fonction du remplissage. (a) représente le pôle des bosons renormalisé E_{0R} , (b) le potentiel chimique μ , (c) le hopping des bosons t_B , et (d) la densité de bosons.

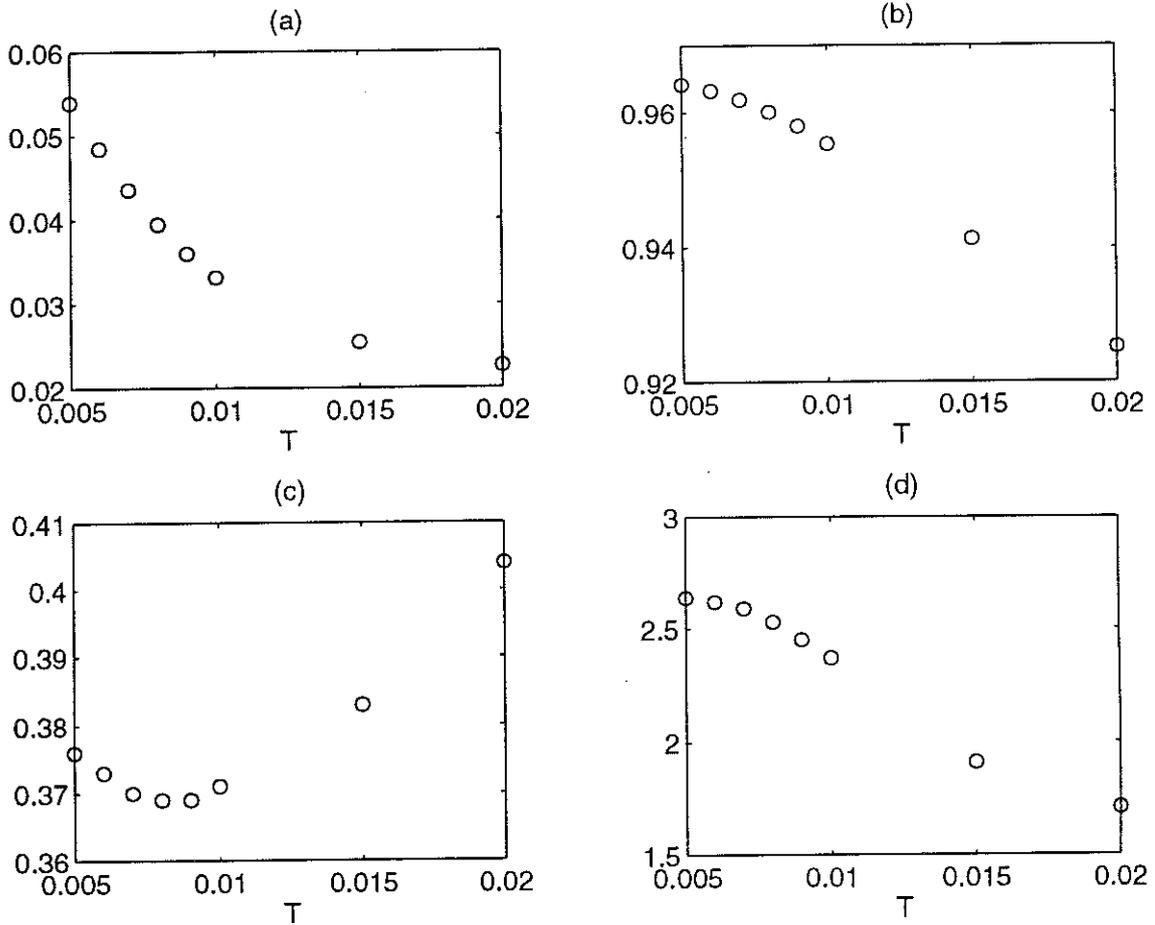


Figure 4.5: Durée de vie à la surface de Fermi: largeur Γ_f (a), moment k_f (b), N_{k_f} (c) et dérivée de N_k en $k = k_f$. Réseau 1d 201×101 pour $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.5000$.

4.3 Spectre des fermions

4.3.1 Etude de la surface de Fermi

A partir des self-énergies, nous avons déterminé la durée de vie pour des excitations à la surface de Fermi, c'est-à-dire pour $\omega = 0$. Les continuations analytiques permettent d'obtenir les self-énergies retardées pour les fermions $\Sigma(k, \omega)$. On note $\Sigma(k, \omega) = R(k, \omega) - i\Gamma(k, \omega)/2$. On détermine alors le vecteur de Fermi k_f en résolvant l'équation $\epsilon_k + R(k, \omega = 0) = 0$ pour $k = k_f$. On obtient alors $\Gamma_f = \Gamma(k_f, \omega = 0)$. La figure Fig. 4.5 montre les résultats obtenus pour un réseau à une dimension 201×101 pour $g^2 = 0.01$ et $\Delta_B = 0.4$ en fonction de la température. La figure Fig 4.5 .a montre Γ_f qui augmente fortement quand on diminue la température. Cela indique qu'il n'y a pas de quasiparticules à la surface de Fermi quand $T \rightarrow 0$. On a un résultat complètement opposé à celui d'un liquide de Fermi où $\Gamma_f \rightarrow 0$ lorsque

l'on annule la température. Un simple fit, donne

$$\Gamma_f \sim (T - 0.0008)^{-0.60} \quad (4.16)$$

De même, la figure Fig 4.5 .d montre la dérivée du nombre d'occupation n_k^F en $k = k_f$. On observe que la dérivée tend vers une limite finie quand la température tend vers zéro, contrairement au liquide de Fermi où l'on s'attend à une discontinuité pour les nombres d'occupation et donc une dérivée infinie.

4.3.2 Etude des pôles de la fonction de Green

Lorsque l'on calcule l'approximant de Padé pour la fonction de Green, on obtient une approximation de la fonction de Green $G(k, z)$ pour toutes les valeurs de z . On peut donc évaluer les pôles de $G(k, z)$ dans le plan complexe. Rappelons que la fonction de Green obtenue pour les fréquences de Matsubara est

$$G(k, i\bar{\nu}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\beta} \frac{A(k, \omega)}{i\bar{\nu} + \omega} \quad (4.17)$$

L'approximant de Padé permet alors d'obtenir une approximation pour

$$G(k, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(k, \omega)}{z - \omega} \quad (4.18)$$

Le cas particulier $z = \omega + i\eta$ permet d'obtenir la fonction de Green retardée. Nous considérons alors les pôles de $G(k, z)$ dans le demi-plan complexe inférieur sous la forme $z = \omega - i\gamma/2$. Du fait que l'approximant de Padé correspond au rapport de polynômes de degrés $N/2$, on voit qu'il existe $N/2$ pôles pour chaque vecteur \mathbf{k} . La classification des pôles se fait alors en fonction de la partie imaginaire, qui doit être petite par rapport à la partie réelle pour avoir une quasiparticule, et par rapport au résidu qui, dans le concept de quasiparticule correspond à la probabilité que la particule reste dans l'état \mathbf{k} . Notre approche a été de calculer les principaux pôles, c'est-à-dire avec les résidus les plus importants, et qui vérifient approximativement la règle de somme pour les résidus

$$\sum_{\alpha} Z_{\alpha} = 1 \quad (4.19)$$

où Z_{α} est le $\alpha^{\text{ième}}$ résidu. Cette règle de somme se démontre en intégrant $G(z)$ dans le plan complexe comme le montre la figure 4.6. Lorsque l'on effectue l'intégrale, on obtient pour la fonction de Green retardée

$$G^R(t) = -i \sum_{\alpha} Z_{\alpha} e^{-i\omega_{\alpha}t} e^{-\gamma_{\alpha}t/2} \quad (4.20)$$

Puis comme $G^R(t = 0^+) = -i$, on obtient la règle de somme. Les résidus sont calculés en intégrant numériquement dans le plan complexe

$$Z_{\alpha} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_{\alpha}} dz G(z) \quad (4.21)$$

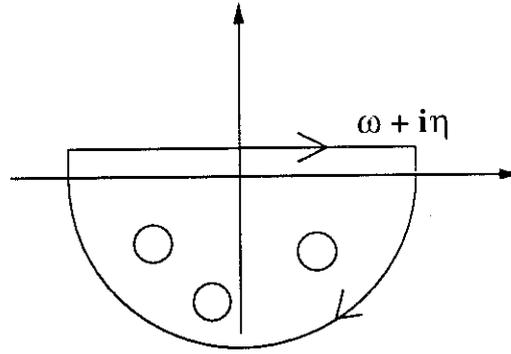


Figure 4.6: Contour dans le plan complexe pour obtenir la fonction de Green retardée $G^R(t)$ en fonction des pôles et des résidus.

où C_α est chemin qui entoure le pôle z_α . Pratiquement on choisit un contour circulaire de rayon r de sorte que

$$z = z_\alpha + re^{i\theta} \quad \text{et} \quad dz = i r e^{i\theta} d\theta \quad (4.22)$$

Dans tous les cas, on vérifie que l'intégrale est stable, quand on varie r sur plusieurs ordres de grandeurs. La figure 4.7 montre les résultats obtenus pour le modèle à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ pour $T = 0.0085$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.5$, qui exhibe un pseudo gap dans la densité d'états. Nous avons essentiellement obtenu trois branches principales qui correspondent au spectre initial (o), à la singularité en $E_{0R} \simeq 0$ (*) et à la singularité en $E_{0R} + \mu \simeq 0.18625$ (x). Lorsque $k \rightarrow k_F$ d'après la définition ci-dessus, on obtient deux ou trois pôles supplémentaires avec un résidu important, mais avec une grande partie imaginaire. En dehors de cette gamme d'énergie, qui correspond au processus direct, on trouve que le résidu pour le spectre initial est proche de l'unité, alors qu'il est très faible pour les deux autres branches. De même, la partie imaginaire est petite pour la première branche et grande pour les deux autres. Dans la région du processus direct, nous obtenons donc le résultat qu'il n'y a pas de pôles avec $\gamma \rightarrow 0$. Si l'on regarde la branche principale, on observe que l'on obtient des résidus supérieurs à l'unité. Nous ne pouvons plus interpréter le résidu de façon habituelle.

Afin de comprendre l'origine de ces résidus exceptionnels, supérieurs à l'unité, nous avons considéré le modèle simplifié pour le processus direct à $T = 0$ introduit lors de l'étude de la self-énergie des fermions et qui consiste à prendre $\Gamma(k, \omega)$ constant. Dans ce cas, nous considérons la fonction de Green correspondante, dans le plan complexe

$$G(k, z) = \frac{1}{z - \epsilon_k - \Sigma(z)} \quad (4.23)$$

Dans notre modèle simplifié, $\Gamma(\omega)$ est non nulle uniquement entre E_0 et $E_0 + \mu$, avec la valeur $2\pi g^2$. On obtient alors

$$\Sigma(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Gamma(\omega)}{z - \omega} \quad (4.24)$$

ce qui donne pour la partie réelle

$$\Sigma^{\text{Re}}(z) = \frac{g^2}{2} \text{Ln} \frac{(\omega - a)^2 + \gamma^2/4}{(\omega - b)^2 + \gamma^2/4} \quad (4.25)$$

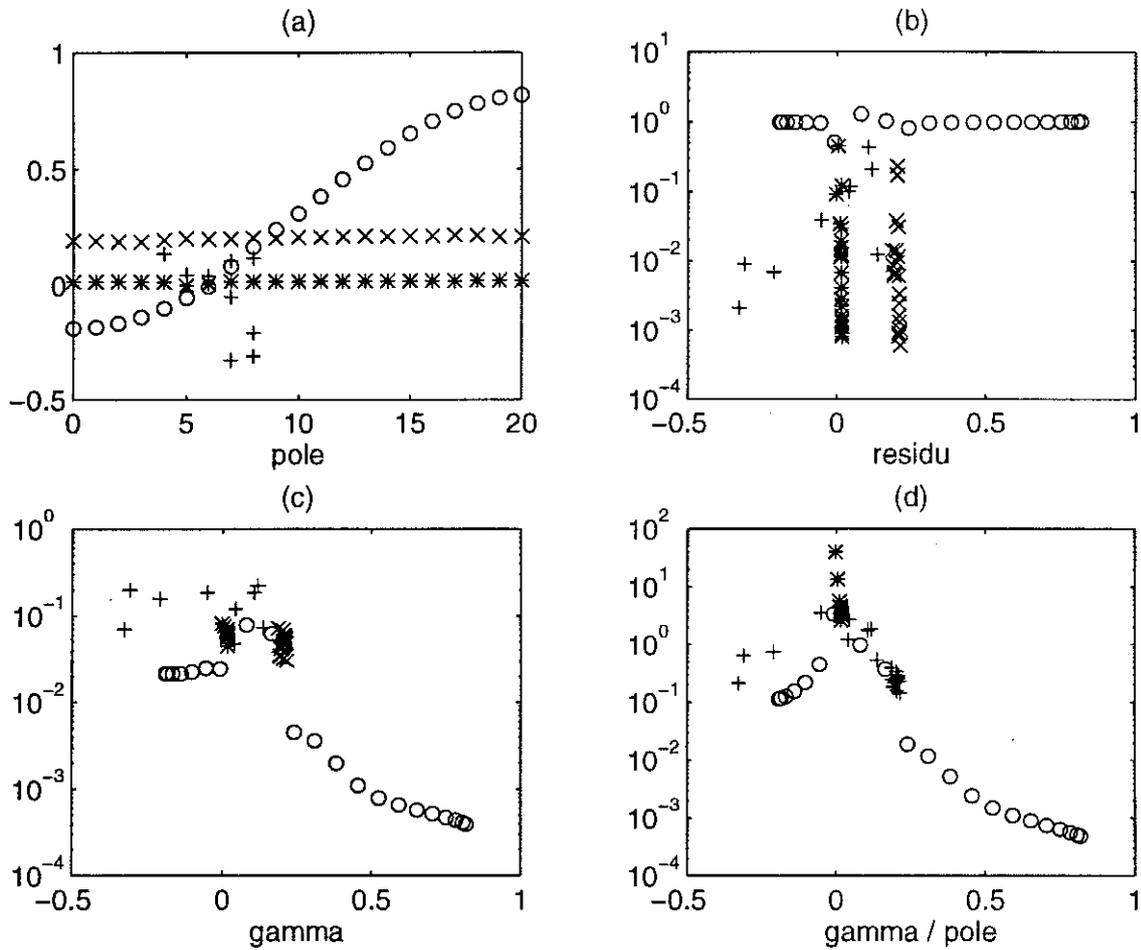


Figure 4.7: Pôles complexes pour le réseau à deux dimensions 41×41 pour tous les vecteurs \mathbf{k} de la diagonale de 0 à 20. La figure (a) montre la partie réelle en fonction de $k = (k, k) \times 2\pi/41$, la figure (b) la valeur absolue du résidu en fonction de la partie réelle, la figure (c) la partie imaginaire γ et la figure (d) le rapport γ/ω .

et pour la partie imaginaire

$$\Sigma^{Im}(z) = g^2 \arctan\left(\frac{\omega - b}{\gamma/2}\right) - g^2 \arctan\left(\frac{\omega - a}{\gamma/2}\right) \quad (4.26)$$

avec $z = \omega - i\gamma/2$, $a = E_0$ et $b = E_0 + \mu$. Les deux équations à résoudre sont alors $\omega = \epsilon_k + \Sigma^{Re}$ et $\gamma = 2\Sigma^{Im}$. Le résidu est alors donné par

$$\mathcal{Z}^{-1} = 1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial z} \quad (4.27)$$

soit, de façon explicite

$$\mathcal{Z}^{-1} = 1 - g^2 \left[\frac{\omega - a + i\gamma/2}{(\omega - a)^2 + \gamma^2/4} - \frac{\omega - b + i\gamma/2}{(\omega - b)^2 + \gamma^2/4} \right] \quad (4.28)$$

Nous avons alors résolu numériquement ces équations pour la branche principale avec les paramètres renormalisés pour μ et E_0 , c'est-à-dire $E_0 \rightarrow E_0 + \Sigma_B(0,0)$ obtenu dans le calcul self-consistant des équations couplées. La figure 4.8 montre le résultat pour la branche principale. Nous retrouvons le même comportement pour le résidu du pôle, mais un comportement beaucoup trop simple pour la partie imaginaire γ . Ce modèle simplifié permet néanmoins d'identifier le processus donnant une grande partie imaginaire et des résidus supérieurs à l'unité.

4.3.3 Nombre d'occupation

Les nombres d'occupation pour les fermions, $\langle c_k^\dagger c_k \rangle$ sont des fonctions de corrélation importantes dans l'étude des systèmes de fermions comme nous l'avons déjà mentionné dans l'étude de la surface de Fermi. Nous donnons les résultats obtenus pour le réseau à une et deux dimensions.

La figure 4.9 montre les nombres d'occupation pour un réseau à deux dimensions pour différentes températures. Sur la partie (a) de la figure, on note que la distribution varie très peu en fonction de la température. La partie (b) de la figure où l'on a tracé la différence par rapport à la distribution à la plus haute température montre que la variation en température est seulement effective pour le *vecteur de Fermi*. Dans cette région, la distribution augmente fortement lorsque l'on diminue la température. La figure 4.10 montre les résultats obtenus pour un réseau à une dimension. On obtient un comportement tout à fait similaire à celui du réseau à deux dimensions. Notons aussi que les nombres d'occupation restent inférieurs à l'unité lorsque $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

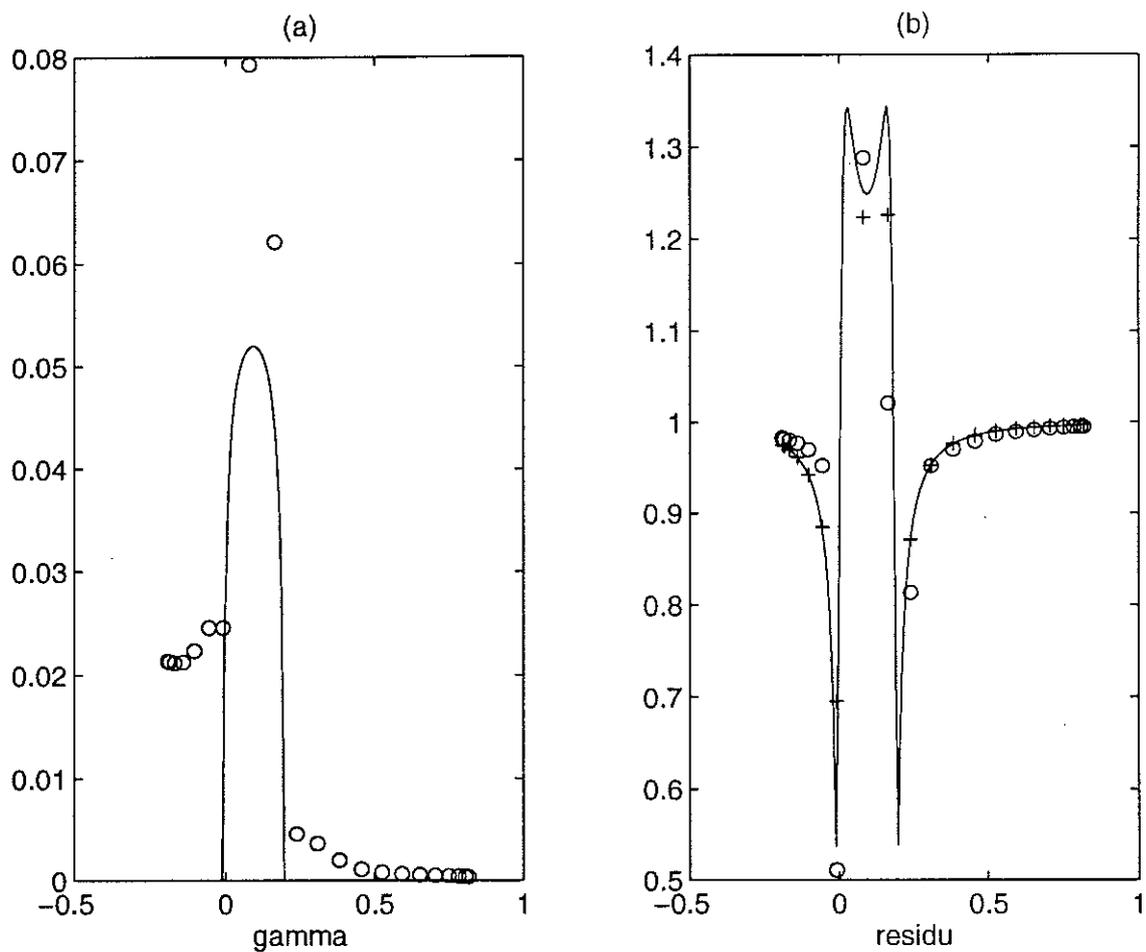


Figure 4.8: Partie imaginaire (a) et résidu (b) pour la branche principale, pour les équations couplées (o) et pour le modèle simplifié de processus direct (-). Les croix correspondent au résidu obtenu en mettant le pôle des équations couplées dans la formule du résidu du modèle simplifié.

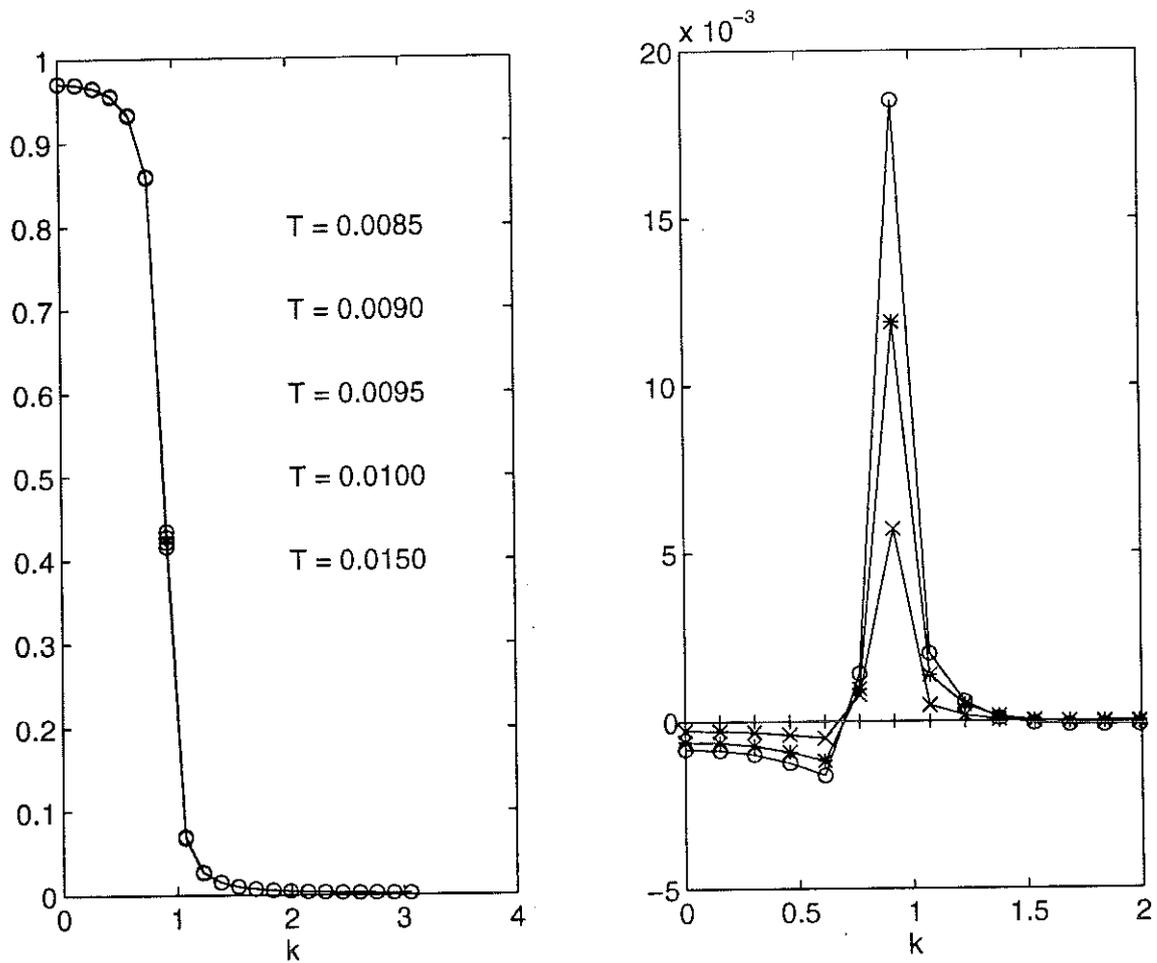


Figure 4.9: Nombres d'occupation des fermions $\langle c_k^\dagger c_k \rangle$ pour le réseau à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$ pour différentes températures. Les vecteurs k sont sur la diagonale. La partie (a) montre les distributions obtenues pour 5 températures et la partie (b) montre la différence des distributions par rapport à la distribution à $T = 0.015$, pour $T = 0.0085$ (o), $T = 0.0090$ (*), $T = 0.0095$ (x) et $T = 0.01$ (+).

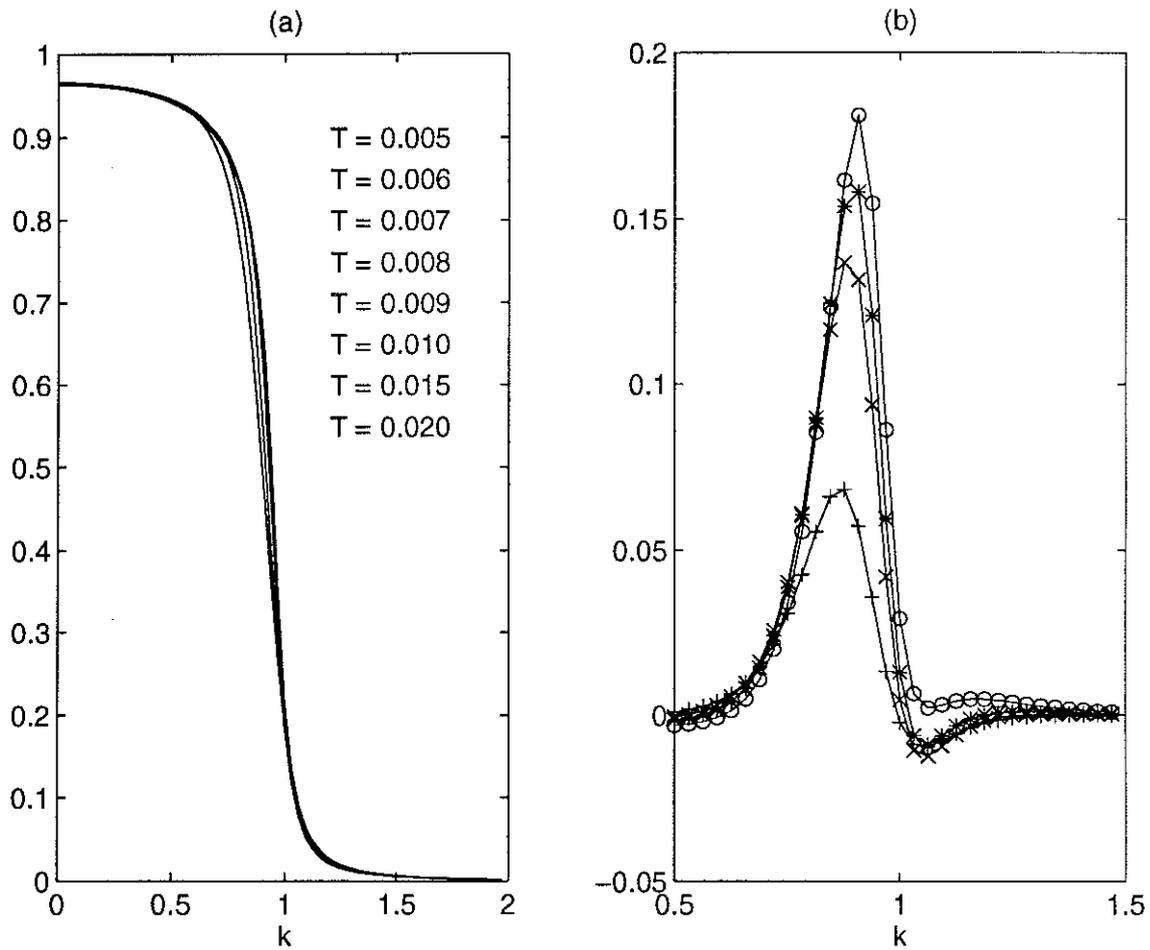


Figure 4.10: Nombres d'occupation des fermions $\langle c_k^\dagger c_k \rangle$ pour le réseau à une dimension 201×101 avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$ pour différentes températures. La partie (a) montre les distributions obtenues et la partie (b) montre la différence des distributions par rapport à la distribution à $T = 0.02$, pour $T = 0.005$ (o), $T = 0.008$ (*), $T = 0.01$ (x) et $T = 0.015$ (+).

4.4 Fonctions spectrales pour les fermions

Les fonctions spectrales $A(k, \omega)$, les largeurs $\Gamma(k, \omega)$ et les densités d'états $D(\omega)$ sont obtenues par continuation analytique. Dans tous les résultats que nous présentons, les règles de sommes sont vérifiées à moins de 1% pour les densités d'états et à moins de 5% pour les fonctions spectrales. En fait, dans la grande majorité des cas, les règles de somme sont vérifiées à moins de 0.1%. Les fonctions spectrales, ou les fonctions de corrélations associées $J_1(k, \omega)$ et $J_2(k, \omega)$ sont directement reliées aux mesures de spectroscopies photo-électroniques (ARPES et ARIPES). De même, la densité d'états est reliée aux mesures de tunneling. Ces fonctions de corrélation sont importantes d'un point de vue expérimental. La figure 4.11 montre les densités d'états pour le réseau à deux dimensions pour différentes températures. Pour les deux plus basses températures de la figure, on observe un pseudo gap à l'énergie de Fermi (correspondant à un pôle en $\omega = 0$). De plus, on remarque la singularité en $\omega \simeq \mu$ dans la densité d'états pour $T = 0.0085$. On retrouve le fait que le pseudo gap indique l'absence de quasiparticules comme l'a montré l'étude du spectre des fermions.

La figure 4.12 montre les fonctions spectrales pour les premiers vecteurs \mathbf{k} sur la diagonale. Les autres fonctions spectrales (pour des \mathbf{k} plus grands sont pratiquement des fonctions delta).

La figure 4.13 montre les largeurs $\Gamma(k, \omega)$ pour tous les vecteurs \mathbf{k} de la diagonale. On peut noter quelques artefacts des continuations analytiques sur la figure (Γ négatifs) mais quand même loin de $\omega \simeq 0$, là où la continuation analytique est censée être la meilleure. On remarque que les largeurs Γ sont assez indépendantes de \mathbf{k} . On distingue bien la partie non nulle entre $\omega \simeq 0$ et $\omega \simeq \mu$ correspondant au processus direct, alors que la partie pour $\omega < 0$ est due à la présence des bosons qui participent au processus indirect. On remarque aussi que pour $\omega \simeq 0$, la largeur Γ est très supérieure à zéro et ne possède pas non plus de minimum.

La figure 4.14 montre $\Gamma(k, \omega)$ pour le vecteur \mathbf{k} à la surface de Fermi pour différentes températures. Un fit simple donne le résultat

$$\Gamma_f \sim (T - 0.0081)^{-0.086} \quad (4.29)$$

De même, la figure 4.15 montre les fonctions spectrales correspondantes.

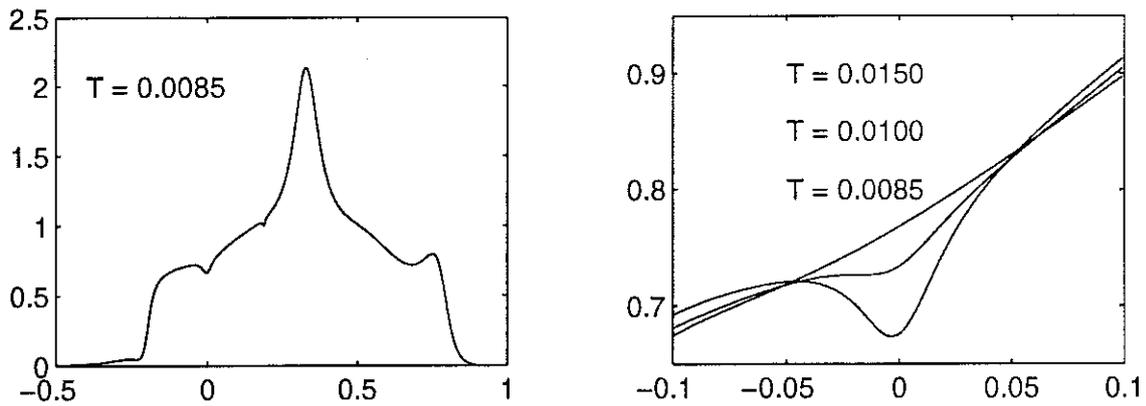


Figure 4.11: Densités d'états $D(\omega)$ pour le réseau à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ pour $n = 0.50$, $g^2 = 0.01$ et $\Delta_B = 0.4$ pour différentes températures.

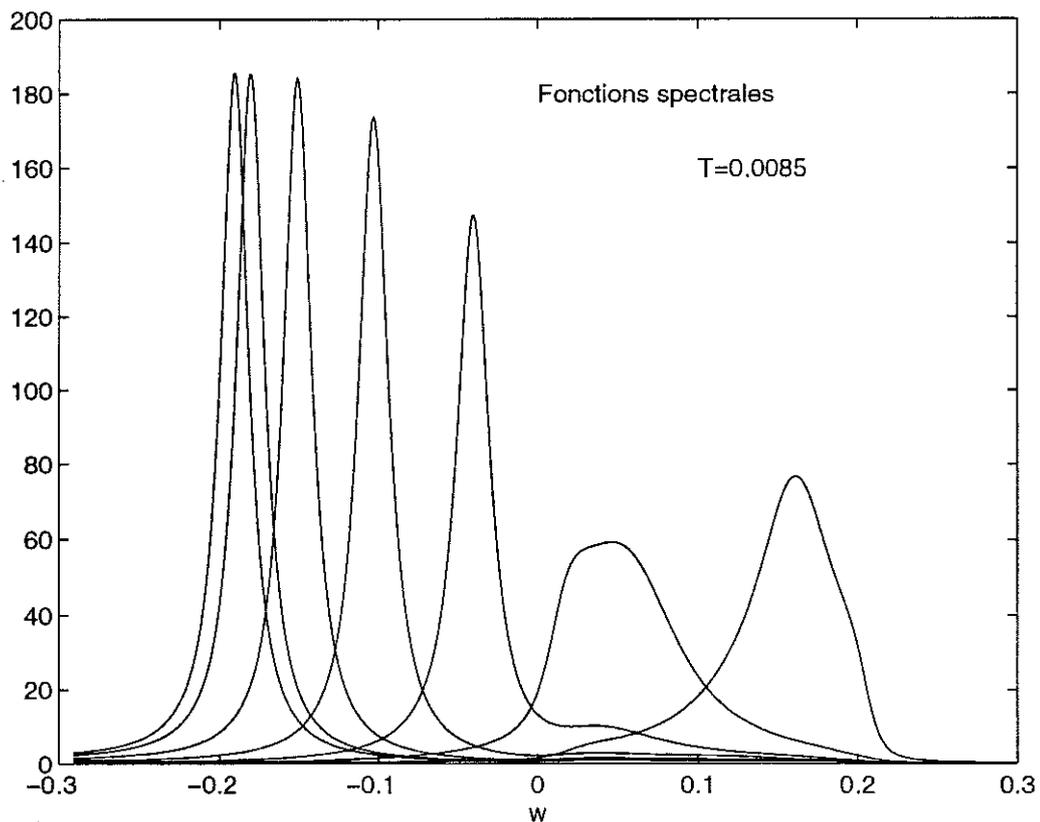


Figure 4.12: Fonctions spectrales $A(k, \omega)$ pour le réseau à deux dimensions $31 \times 31 \times 101$ avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$, $T = 0.0085$ et $n = 0.50$ pour les vecteurs (k, k) sur la diagonale, $k = 0 \dots 2\pi/31 \times 6$.

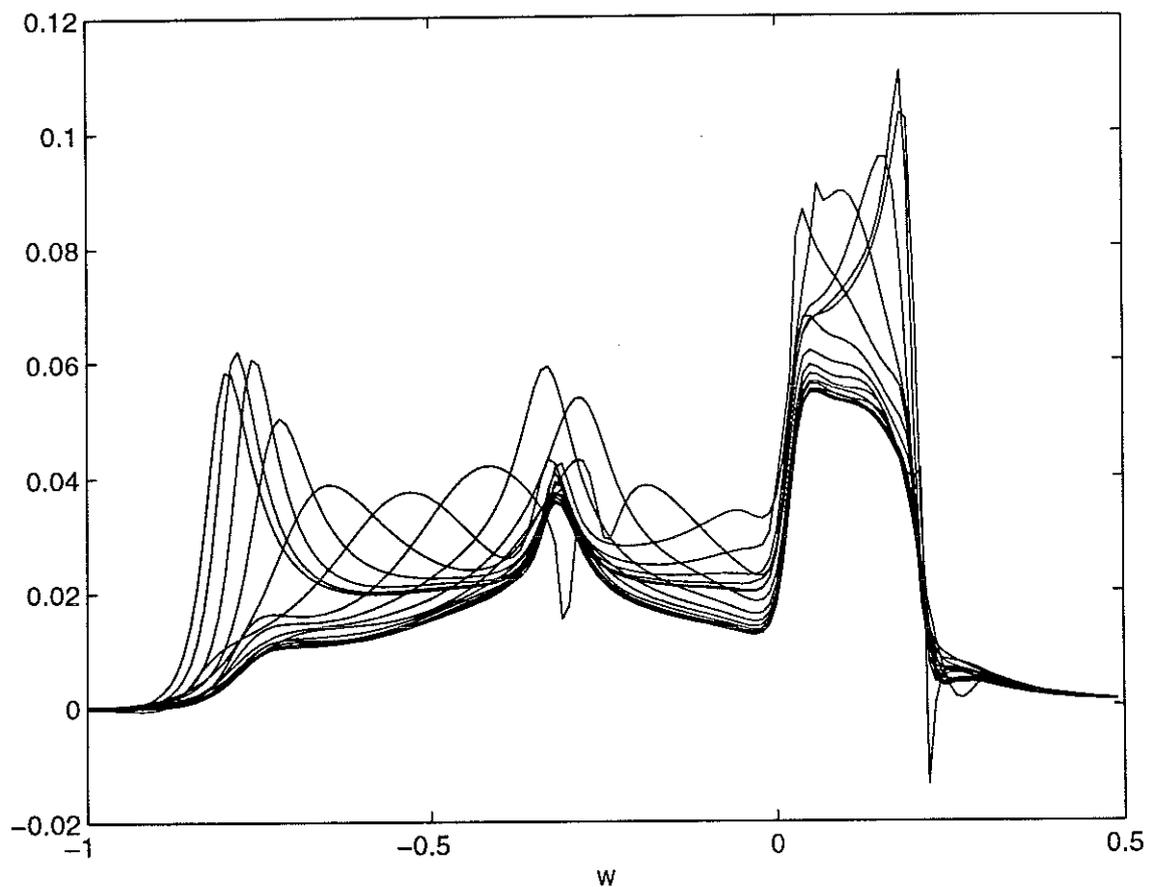


Figure 4.13: Largeurs $\Gamma(k, \omega)$ pour le réseau à deux dimensions $31 \times 31 \times 101$ avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$, $T = 0.0085$ et $n = 0.50$ pour les vecteurs (k, k) sur la diagonale, $k = 0 \dots 2\pi/31 \times 15$.

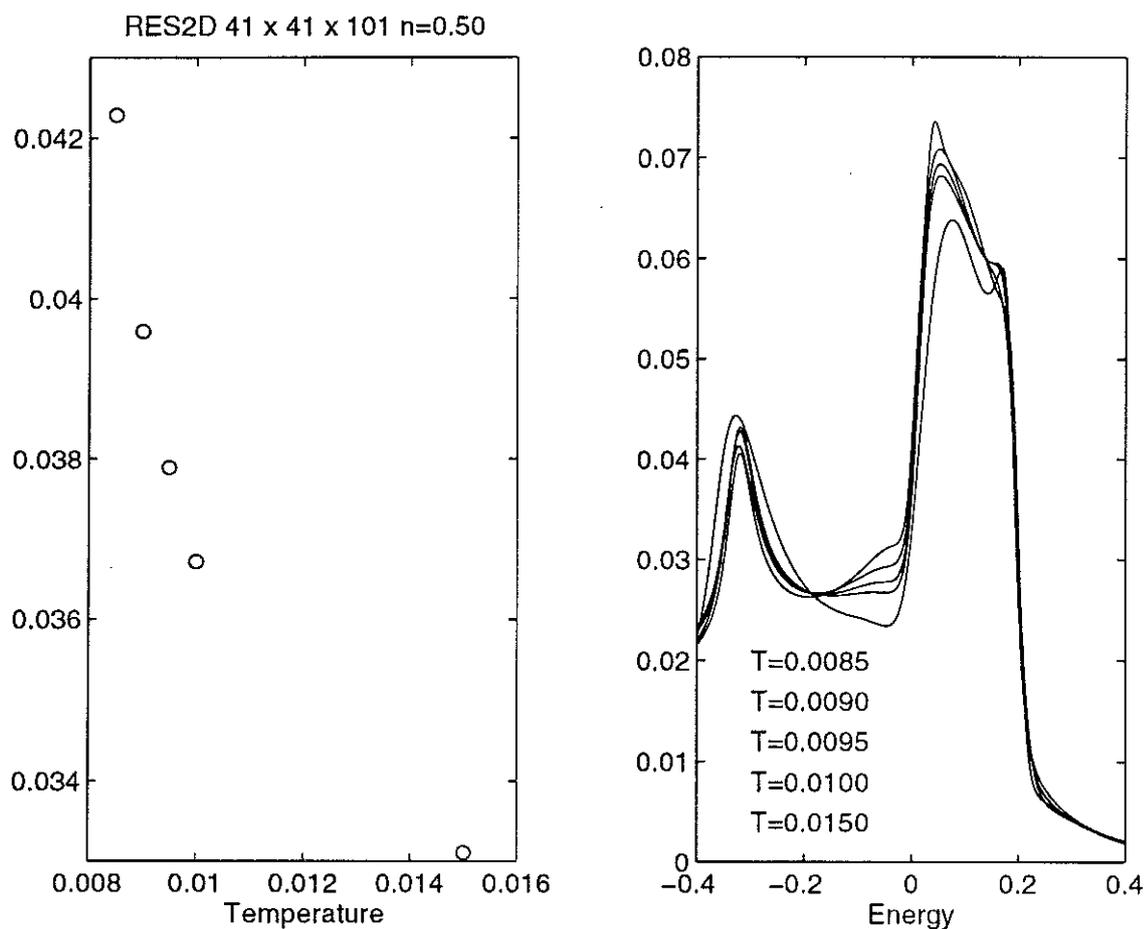


Figure 4.14: Largeur $\Gamma(k, \omega)$ pour \mathbf{k} à la surface de Fermi pour différentes températures, pour le réseau à deux dimensions avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$. La figure de gauche montre Γ_f en fonction de la température.

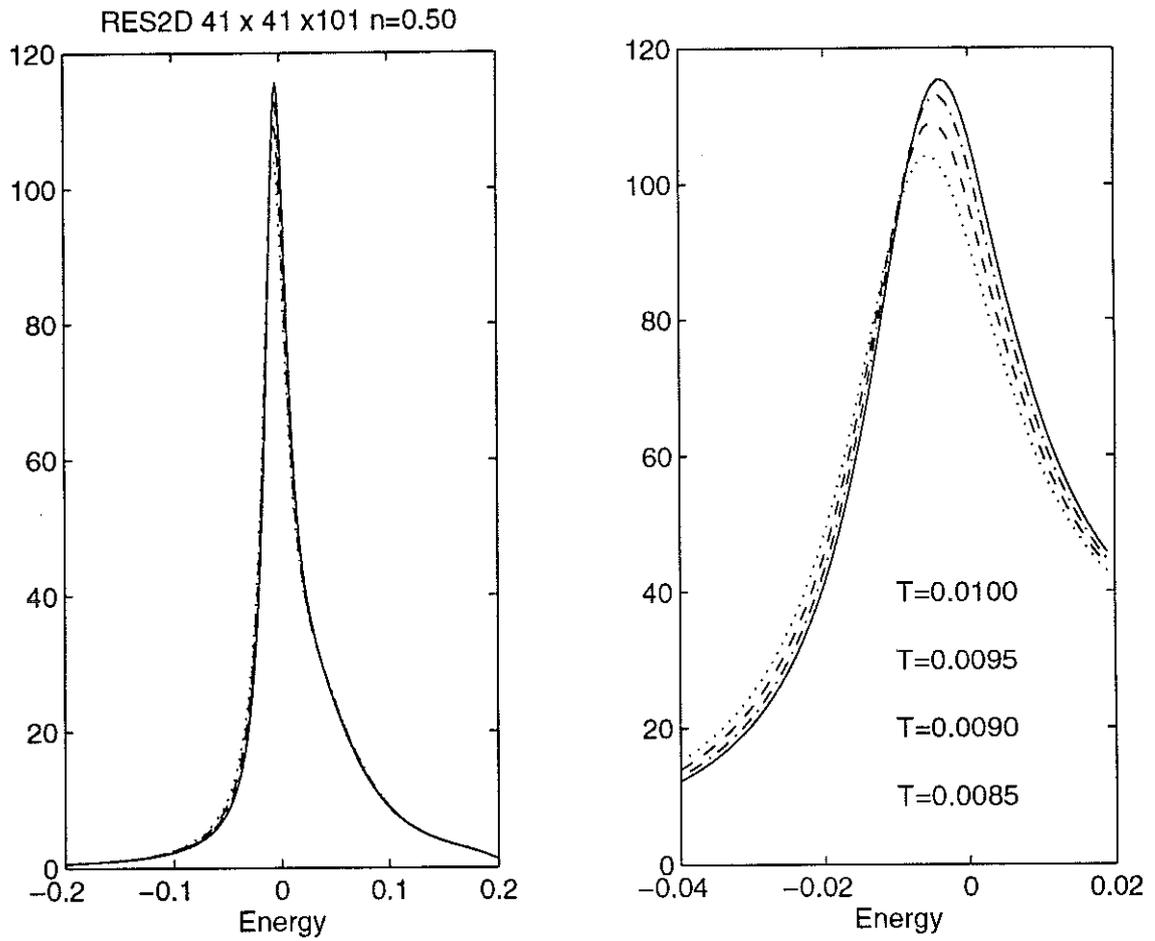


Figure 4.15: $A(k, \omega)$ pour k à la surface de Fermi pour différentes températures, pour le réseau à deux dimensions avec $\Delta_p = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$.

4.5 Spectre des bosons

Pour étudier le spectre des bosons, nous disposons des nombres d'occupation n_q^B obtenus directement à partir des fonctions de Green $G_B(q, \bar{\mu})$ et des fonctions spectrales $A_B(q, \omega)$ obtenues par continuation analytique. Dans tous nos calculs, nous trouvons que les fonctions spectrales peuvent être décrites par des Lorentziennes de la forme

$$A_B(q, \omega) = \frac{\gamma_q}{[\omega - \omega_q]^2 + \gamma_q^2/4} \quad (4.30)$$

où ω_q est le pôle pour le mode \mathbf{q} (centre de la Lorentzienne) et γ_q est l'inverse de la durée de vie (largeur de la lorentzienne). La valeur de ω_q est déterminée en recherchant le maximum de la fonction spectrale, puis γ_q est donnée par quatre fois l'inverse de la hauteur de la fonction spectrale. La figure 4.16 montre le spectre des bosons ω_q pour le réseau à deux dimensions pour différentes températures, ainsi que le spectre obtenu à partir des nombres d'occupation des bosons $\langle b_q^+ b_q \rangle$, en fittant par la distribution de Bose

$$\langle b_q^+ b_q \rangle \simeq (\exp(\beta\omega_q) - 1)^{-1} \quad (4.31)$$

On remarque que l'on trouve un bon accord entre le spectre obtenu à partir des fonctions spectrales et celui obtenu en utilisant la distribution pour des bosons indépendants, et que l'accord est d'autant meilleur que l'on se rapproche de la transition. La figure 4.17 montre la partie imaginaire γ_q correspondante, ainsi que le rapport γ_q/ω_q . On trouve que la partie imaginaire diminue avec la température, néanmoins, le rapport lorsque \mathbf{q} devient petit ne tend pas vers zéro et semble peu dépendre de la température. Ce résultat montre que les bosons ne sont pas des bonnes quasiparticules pour le réseau à deux dimensions. Cela est cohérent avec le fait que l'on a trouvé une T_c non nulle pour ce système. Si l'on avait trouvé de bonnes quasiparticules, alors l'argument d'espace de phase de la condensation de Bose-Einstein aurait donné une T_c nul. Là encore il faut nuancer ce résultat avec la petite taille du système.

La figure 4.18 montre les densités d'états des bosons pour le réseau à deux dimensions pour différentes températures. La densité d'états est essentiellement composée de deux pics assez larges et très séparés. Nous avons vérifié que la densité d'états démarre pour $\omega = E_{0R}$, ce qui est un bon test pour la continuité analytique.

La figure 4.19 montre les nombres d'occupation, $\langle b_q^+ b_q \rangle$ pour le réseau à deux dimensions, pour différentes températures, alors que la figure 4.20 montre ces nombres d'occupation pour un réseau à une dimension. Comme nous l'avons déjà mentionné, on obtient une distribution à la Bose-Einstein, qui diverge en $\mathbf{q} = 0$ lorsque $E_{0R} \rightarrow 0$. Nous remarquons aussi que le comportement est très similaire pour le réseau à une dimension et pour le réseau à deux dimensions, cette remarque étant d'ailleurs valable pour l'ensemble des résultats obtenus.

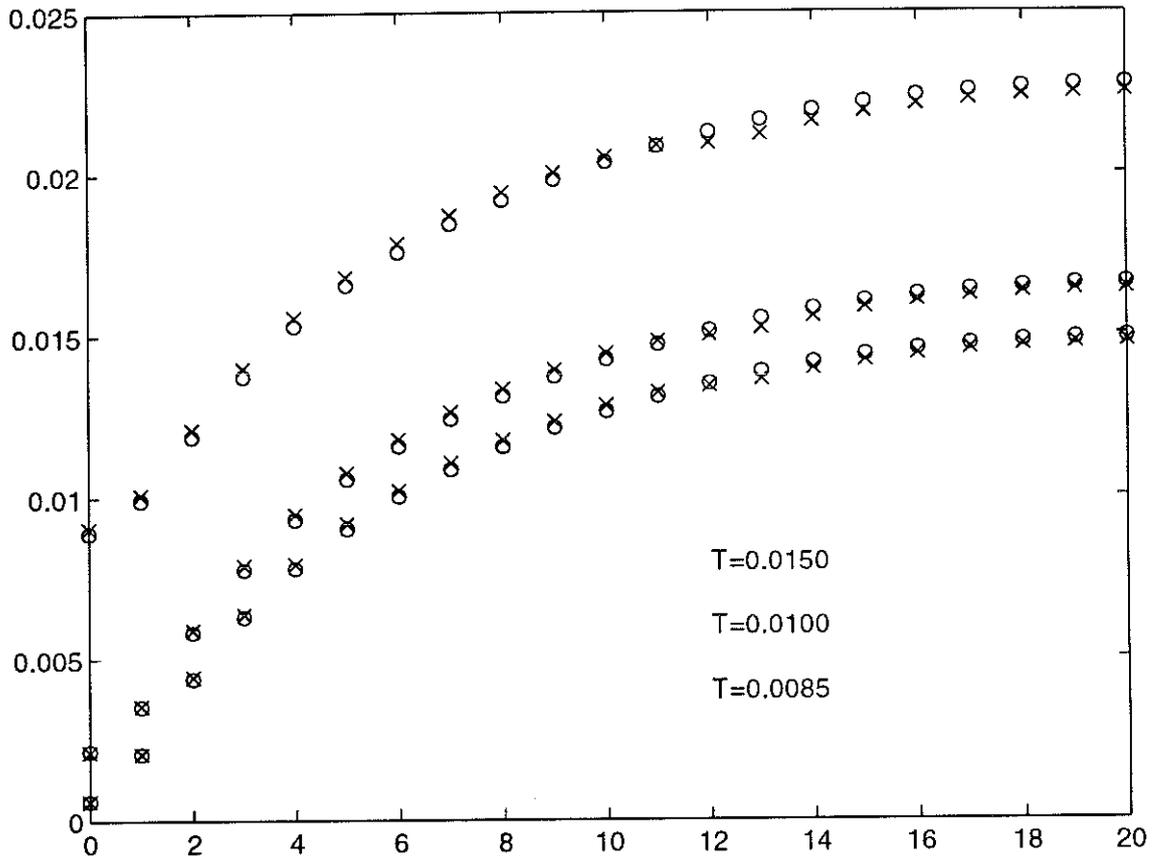


Figure 4.16: Pôles des bosons $\omega_{\mathbf{q}}$ pour le réseau à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$, pour différentes températures. Les vecteurs \mathbf{q} sont sur la diagonale du réseau, en unité de $2\pi/41$. Les ronds correspondent aux pôles obtenus à partir des fonctions spectrales alors que les croix correspondent aux énergies obtenues en fittant les nombres d'occupation par une formule de Bose-Einstein.

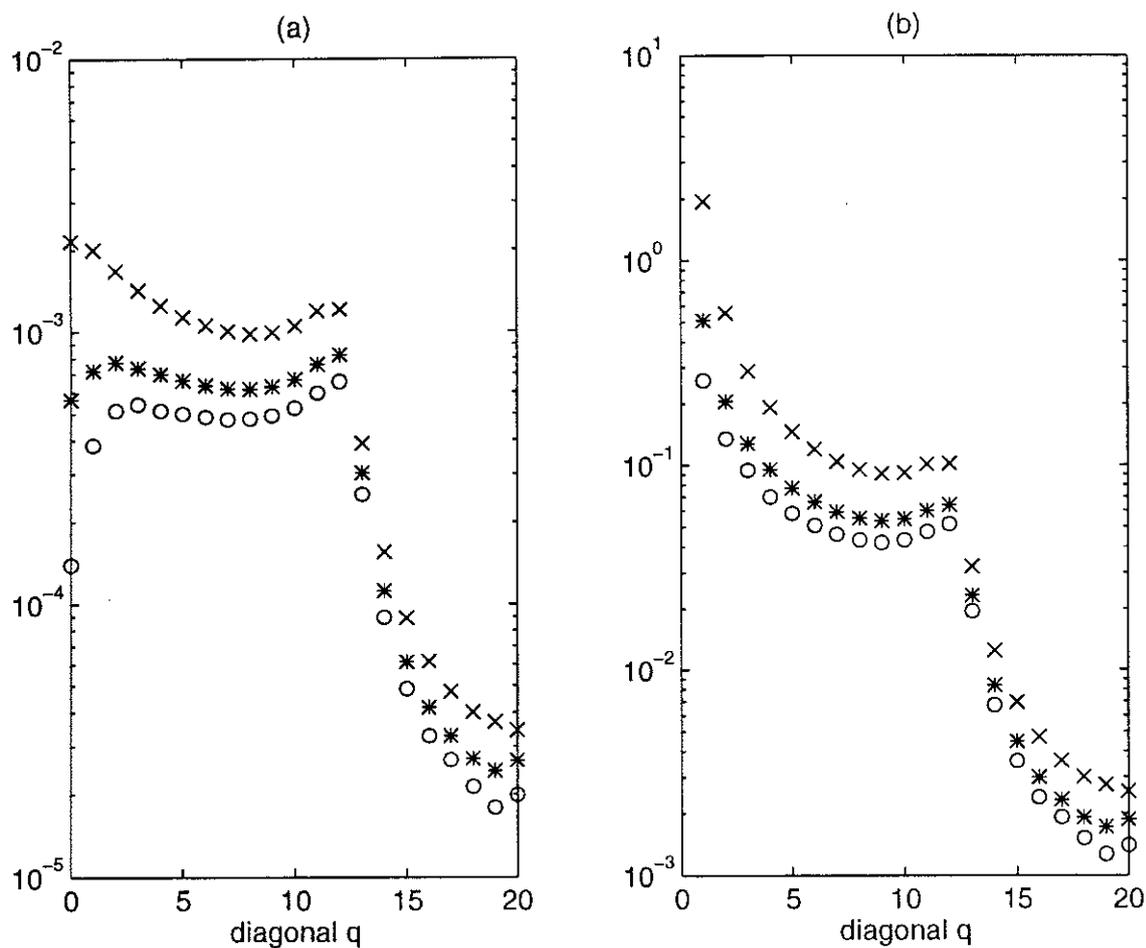


Figure 4.17: γ_q des bosons pour le réseau à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$, pour différentes températures. Les vecteurs q sont sur la diagonale du réseau, en unité de $2\pi/41$. La partie (a) représente γ_q pour $T = 0.0085$ (o), $T = 0.01$ (*) et $T = 0.015$ (x), alors que la partie (b) représente le rapport $\gamma_q / (w_q - w_{q=0})$.

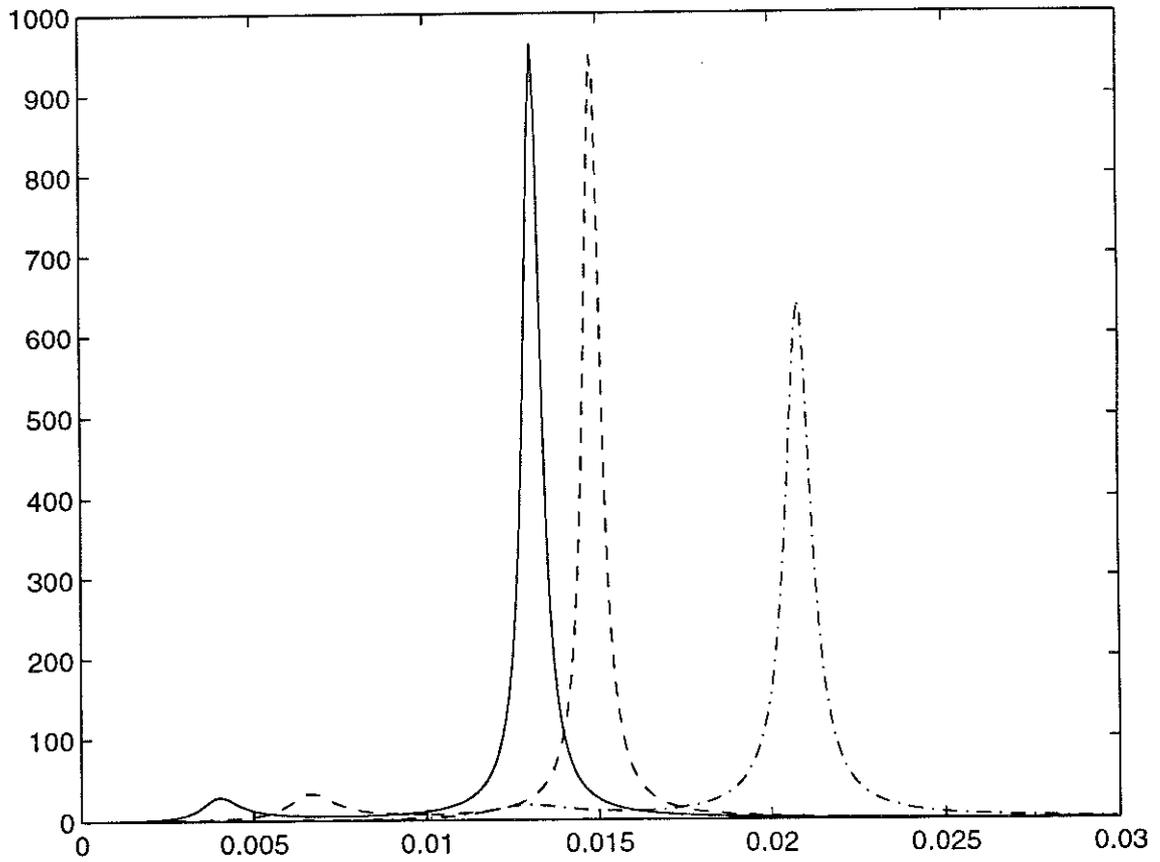


Figure 4.18: Densité d'états des bosons, $D_B(\omega)$ pour le réseau à deux dimensions, avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.50$ pour trois températures, $T = 0.0085$, $T = 0.01$ et $T = 0.015$.

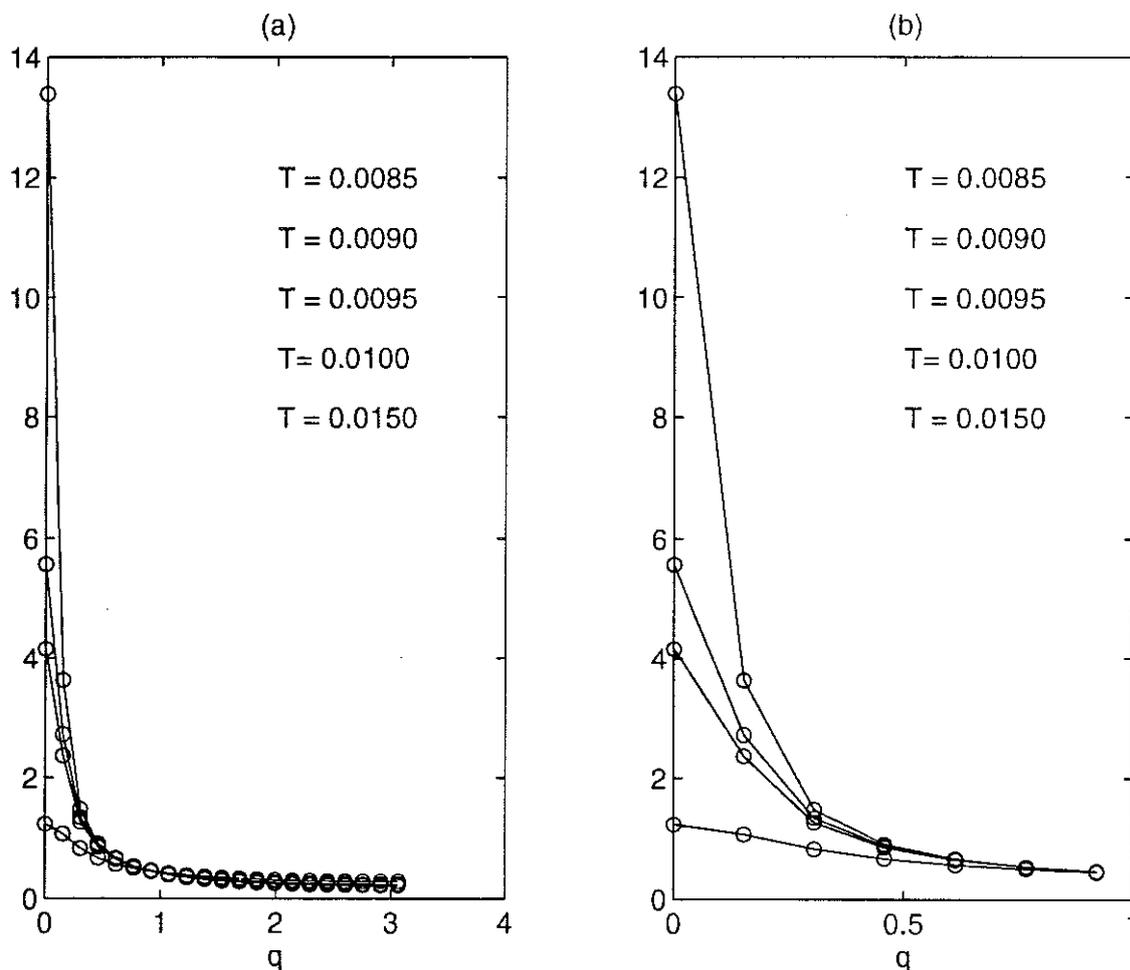


Figure 4.19: Nombres d'occupation des bosons, $\langle b_q^\dagger b_q \rangle$ pour le réseau à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$, $n = 0.50$, pour différentes températures. Le vecteur q correspond à la diagonale. La partie (a) montre les 21 vecteurs alors que la partie (b) montre seulement les premiers vecteurs, pour plus de clarté.

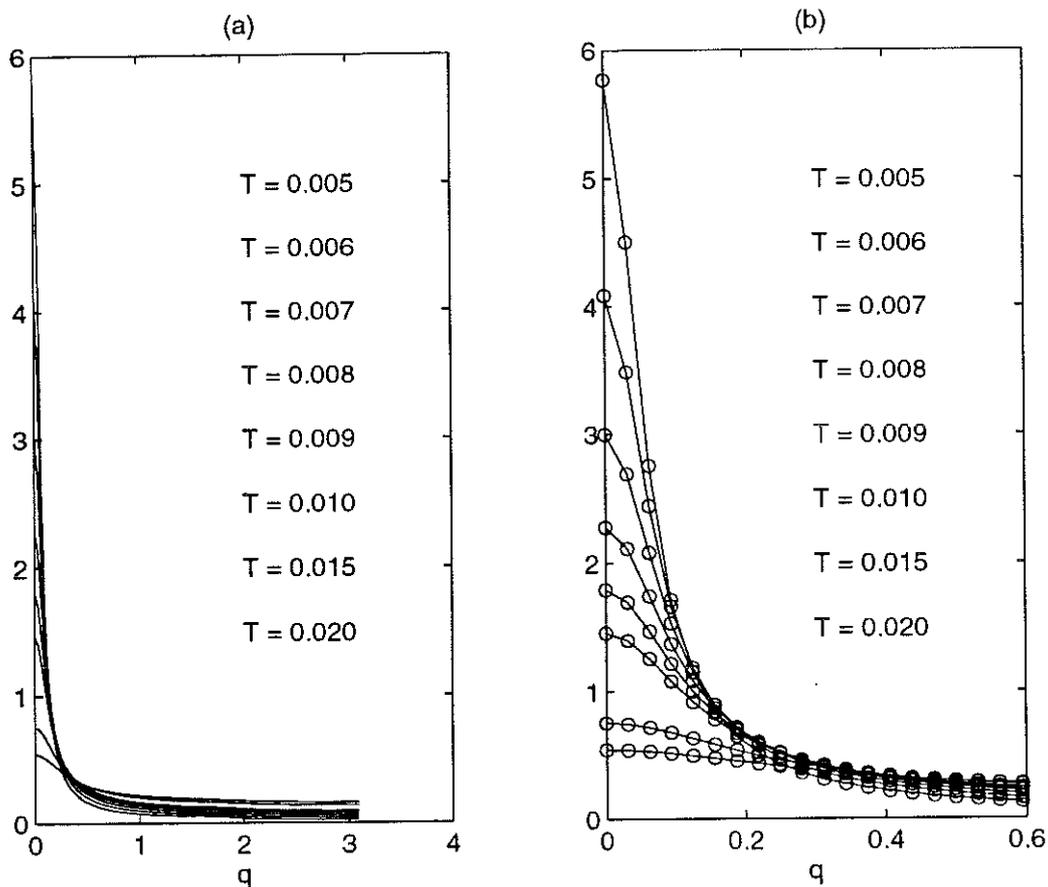


Figure 4.20: Nombres d'occupation des bosons, $\langle b_q^\dagger b_q \rangle$ pour le réseau à une dimension 201×101 avec $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$, $n = 0.5000$, pour différentes températures. La partie (a) montre les 101 vecteurs alors que la partie (b) montre seulement les premiers vecteurs, pour plus de clarté.

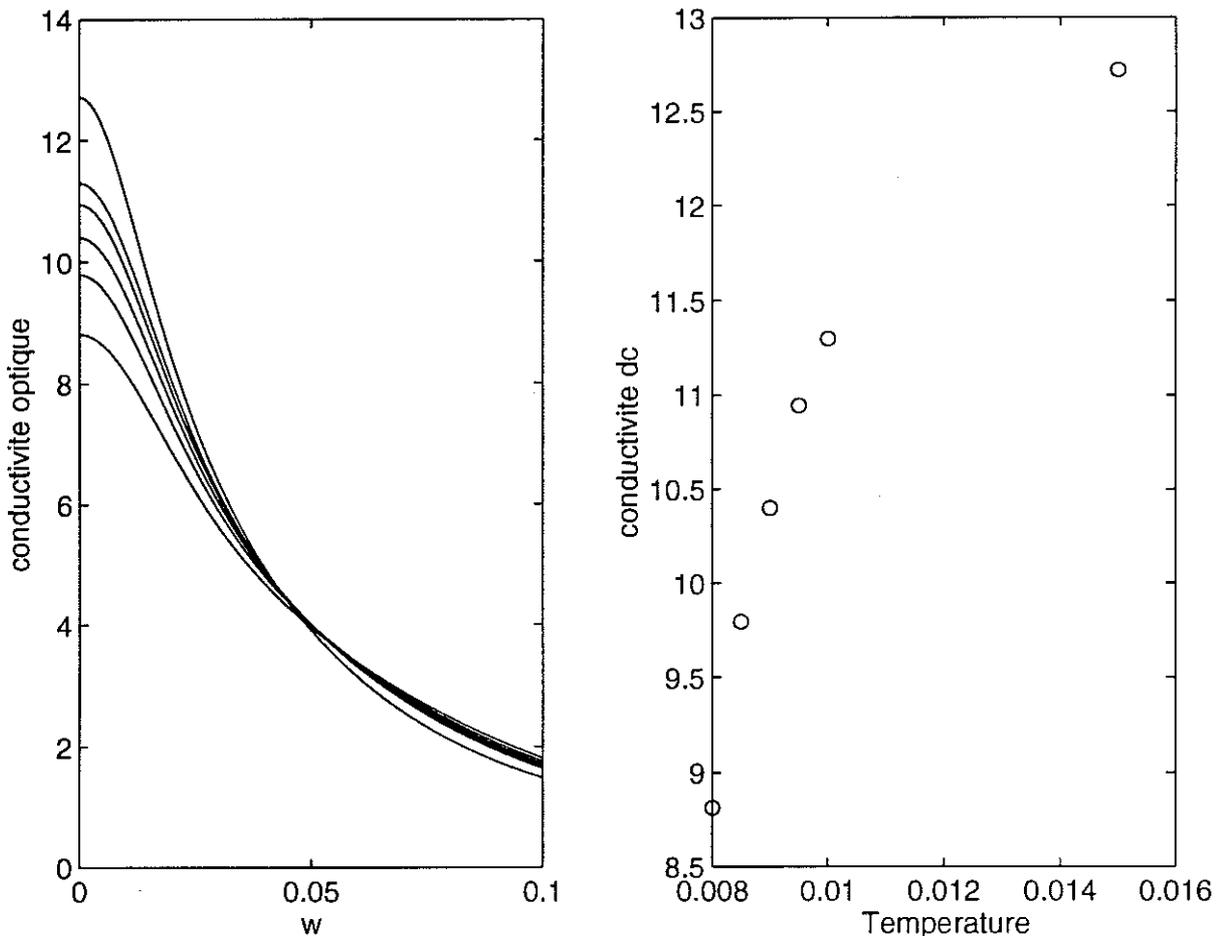


Figure 4.21: Conductivité pour le réseau à deux dimensions $41 \times 41 \times 101$ pour $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et $n = 0.500$ pour différentes températures. Les énergies sont en unité de largeur de bande et la conductivité en unité de $4e^2t^2a^2/\hbar^2$. La figure de gauche montre $\sigma(\omega)$ pour différentes températures et la figure de droite montre $\sigma(\omega = 0)$ en fonction de la température.

4.6 Conductivité

Les fonctions de Green à une particule des fermions permettent d'obtenir la conductivité optique lorsque l'on néglige les corrections de vertex. Nous avons donc calculé la fonction de Green courant-courant $\Pi(\bar{\mu})$ en faisant la convolution des fonctions de Green des fermions, puis effectué la continuité analytique afin d'obtenir sa fonction spectrale $\lambda(\omega)$. La conductivité est alors $\sigma(\omega) = \lambda(\omega)/2\omega$. Sur la figure 4.21 nous montrons les conductivités obtenues pour un réseau à deux dimensions pour différentes températures pour un remplissage fixe en unité de $4e^2t^2a^2/\hbar^2$. On observe que la conductivité statique diminue fortement avec la température.

4.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé la phase normale du modèle Boson-Fermion dans la limite du modèle $E_{0R} \rightarrow 0$. Nous avons utilisé l'approximation des équations diagrammatiques couplées pour les fonctions de Green des fermions et des bosons. Nous avons résolu numériquement ces équations pour des réseaux cubiques à une et deux dimensions, pour une large gamme de paramètres. Nous avons opté pour une représentation en fréquences de Matsubara qui permet d'obtenir des résultats précis avec des moyens modestes, mais qui nécessite d'effectuer une continuité analytique pour obtenir les fonctions de corrélation dynamiques. Nous avons obtenu de bons résultats pour ces continuités analytiques au moyen d'un approximant de Padé.

Nous avons montré que le couplage permet de délocaliser fortement les bosons et que la fonction de corrélation t_B entre proches voisins augmente lorsque l'on se rapproche de la transition, mais ne diverge pas. L'étude de leurs fonctions spectrales révèle que les pôles des bosons sont bien définis, mais que la durée de vie reste assez faible pour pouvoir conclure sur la possibilité d'une condensation de Bose-Einstein dans un système à trois dimensions. Les fonctions de corrélation statiques $\langle b_q^+ b_q \rangle$ indiquent qu'un ordre à longue portée se développe lorsque l'on abaisse la température. Les résultats à basse température pour le paramètre d'ordre E_{0R} et la longueur de corrélation ξ donne une température critique nulle pour le système à une dimension, mais une valeur non nulle pour le système à deux dimensions. Ces résultats sont à tempérer avec les faibles tailles des réseaux que l'on a utilisé et avec les très faibles températures avec lesquelles nous avons travaillé.

L'étude du spectre des fermions révèle la formation d'un pseudo-gap à l'énergie de Fermi $\omega = 0$, d'une largeur de l'ordre du couplage g qui se développe lorsque l'on s'approche de la transition. Dans cette région, la durée de vie des fermions est très faible et l'on ne peut plus parler d'excitations cohérentes, comme le montre l'analyse des pôles complexes des fonctions de Green et de leurs résidus. Nous avons montré que cette brisure du liquide de Fermi est principalement générée par le processus direct.

Chapitre 5

Bosons de Coeurs Durs

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous essayons de prendre en compte les corrélations de coeurs durs pour les bosons. Jusqu'à présent, nous avons négligé ces corrélations dans le modèle Boson-Fermion où les opérateurs de Bose ont les relations de commutation habituelles. Si l'on veut prendre en compte ces corrélations de coeurs durs, il faut restreindre l'espace de phase pour les excitations des bosons. La façon la plus naturelle est d'utiliser des opérateurs de spin [27, 28]. Néanmoins, du fait que ces bosons de coeurs durs sont localisés sur les sites du réseau, on va voir qu'il est suffisant de manipuler des espaces à deux états: site vide et site doublement occupé. Cela revient à considérer des matrices 2×2 , la représentation des spins $S = 1/2$.

Nous allons voir que l'on peut retrouver essentiellement le même formalisme que pour le modèle Boson-Fermion. Notamment, dans la phase normale, on peut définir des équations diagrammatiques en considérant un propagateur de boson libre modifié qui tient compte des contraintes de coeurs durs, comme dans l'approche de Hubbard pour la transition entre la limite atomique et la limite itinérante[8].

Dans le modèle mixte original, les opérateurs b_j sont des opérateurs de bosons de coeurs durs définis sur les sites \mathbf{R}_j du réseau et représentent des paires de fermions localisées. Nous considérons uniquement un état singlet ($S = 0$) pour les paires, de sorte que les opérateurs de paires peuvent être décrits par des matrices 2×2 . Chaque site peut accomoder deux états: un état vide noté $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et un état occupé par une paire noté $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Le hamiltonien H_p pour un site s'écrit alors

$$H_p = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

avec toujours $E_0 = \Delta_B - 2\mu$. La fonction de partition grand canonique Z_p pour un site est alors

$$Z_p = 1 + e^{-\beta E_0} \quad (5.2)$$

On en déduit le nombre moyen de particules pour un site $2n_F(E_0)$, en dérivant par rapport au potentiel chimique μ . Le nombre moyen de paires étant alors $n_F(E_0)$. Comme dans le modèle Boson-Fermion, on définit la densité de paires n_p comme étant le nombre total de paires divisé

par le nombre de sites du réseau, ce qui donne $n_p = n_F(E_0)$ pour le système sans interaction. L'équation qui permet de déterminer le potentiel chimique pour le système sans interaction est alors

$$n = n_F(E_0) + \frac{1}{M} \sum_k n_F(\epsilon_k) \quad (5.3)$$

c'est-à-dire $N = N_{fer} + 2N_p$ où N est le nombre total moyen de particules dans le système, N_{fer} est le nombre moyen de fermions dans le système et N_p est le nombre moyen de paires dans le système avec $n = N/2M$, $n_{fer} = N_{fer}/2M$ et $n_p = N_p/M$. On a la relation $n = n_{fer} + n_p$. Nous évaluons maintenant la fonction de Green libre pour les paires. Pour cela, on considère la fonction de corrélation $J_2(\omega)$ définie dans l'appendice sur les fonctions de Green. Pour un site on a

$$J_2(\omega) = \mathcal{Z}_p^{-1} \sum_{n,m} \langle n | b^+ | m \rangle \langle m | b | n \rangle e^{-\beta E_n} 2\pi \delta(E_m - E_n + \omega) \quad (5.4)$$

Dans ce cas, il n'y a qu'un seul terme dans la somme, correspondant à $|m\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ avec $E_m = 0$ et $|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ avec $E_n = E_0$. On obtient alors

$$J_2(\omega) = n_B(E_0) \tanh \frac{1}{2} \beta E_0 2\pi \delta(\omega - E_0) \quad (5.5)$$

On utilise alors la relation entre $J_2(\omega)$ et la fonction spectrale $A_P(\omega)$, qui a la symétrie de Bose du fait que les paires sont constituées de deux fermions, $J_2(\omega) = n_B(\omega) A_P(\omega)$. On obtient alors la fonction spectrale de la fonction de Green libre des paires

$$A_P^0(\omega) = \tanh \frac{1}{2} \beta E_0 2\pi \delta(\omega - E_0) \quad (5.6)$$

et la fonction de Green non perturbée retardée est

$$G_P^0(\omega) = \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta E_0}{\omega - E_0 + i\eta} \quad (5.7)$$

On vérifie, notamment, que le nombre de paires est donné par la formule standard

$$n_p = \int \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) A_P(\omega) \quad (5.8)$$

en utilisant la relation $n_F(x) = n_B(x) \tanh \frac{1}{2} \beta x$.

La forme de l'interaction dans le modèle mixte, préserve la structure interne des bosons de coeurs durs de même que H_p . Il s'ensuit que le développement diagrammatique pour le modèle mixte est le même que pour le modèle Boson-Fermion. La seule différence se situe au niveau des propagateurs libres G_B^0 et G_P^0 qui sont différents. On voit alors que la fonction de Green de paires peut être obtenue simplement comme

$$G_P(q, \omega) = \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta E_0}{\omega - E_0 - \tanh \frac{1}{2} \beta E_0 \Sigma_B(q, \omega)} \quad (5.9)$$

où $\Sigma_B(q, \omega)$ est la self-énergie du propagateur de boson évaluée pour les mêmes diagrammes constitués de propagateurs de fermions (ordre deux). En particulier, le critère pour l'instabilité supra qui est déterminé par le pôle des bosons $E_0 + \Sigma_B(0, 0) = 0$ pour le modèle Boson-Fermion devient, pour le modèle mixte

$$E_0 + \tanh \frac{1}{2} \beta E_0 \Sigma_B(0, 0) = 0 \quad (5.10)$$

Ce résultat est en fait le résultat obtenu au niveau RPA au moyen des équations d'évolution pour le propagateur de paires. Cette dérivation à la Hubbard n'est pas justifiée en elle-même, mais elle permet de s'affranchir encore une fois du théorème de Wick tout en prenant en compte des corrélations de coeurs durs.

5.2 Théorie du champ-moyen pour la phase supra

Nous définissons la phase superfluide du modèle mixte comme l'état où les paramètres d'ordre $\langle b_j \rangle$ et $\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle$ sont non nuls. Le terme d'interaction est

$$g \sum_j \left[b_j^+ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ b_j \right] \quad (5.11)$$

on pose la transformation de Bloch Wannier

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i\mathbf{R}_j \mathbf{k}} c_{k\sigma} \quad (5.12)$$

pour les fermions, et

$$b_j = \sum_q e^{i\mathbf{R}_j \mathbf{k}} b_q \quad (5.13)$$

pour les paires. Le terme d'interaction s'écrit alors

$$g \sum_{k,q} \left[b_q^+ c_{-k+q\downarrow} c_{k\uparrow} + c_{k+q\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ b_q \right] \quad (5.14)$$

Nous sommes passés dans l'espace réciproque uniquement pour pouvoir définir les corrélations supras des fermions. On définit alors les gaps ou plus précisément les sources supras Δ_{bcs} pour les fermions et Δ_{hc} pour les paires

$$\Delta_{bcs} = g \langle b_0 \rangle = \frac{g}{M} \langle b_j \rangle \quad (5.15)$$

et

$$\Delta_{hc} = \frac{g}{M} \sum_k \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \quad (5.16)$$

Le hamiltonien champ-moyen est alors

$$\begin{aligned} H_{CM} = & \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \Delta_{bcs} \sum_k [c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+] \\ & + \sum_j E_0 b_j^+ b_j + \Delta_{hc} \sum_j [b_j^+ + b_j] \\ & - g \sum_k [\langle b_0^+ \rangle \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + \langle b_0 \rangle \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \rangle] \end{aligned} \quad (5.17)$$

Pour les paires, tous les sites sont dégénérés. Pour un site j , le hamiltonien est

$$H_p = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{hc} \\ \Delta_{hc} & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

les valeurs propres de H_p sont $\lambda_{\pm} = E_0/2 \pm \gamma_{hc}$ avec

$$\gamma_{hc} = \sqrt{E_0^2/4 + \Delta_{hc}^2} \quad (5.19)$$

On en déduit la fonction de partition pour un site j

$$Z_p = 2 e^{-\frac{1}{2}\beta E_0} \cosh \beta \gamma_{hc} \quad (5.20)$$

Pour évaluer les diverses valeurs moyennes correspondantes à H_p , on utilise

$$e^{-\beta H_p} = e^{-\frac{1}{2}\beta E_0} \begin{pmatrix} \cosh \beta \gamma_{hc} + \frac{E_0}{2 \gamma_{hc}} \sinh \beta \gamma_{hc} & -\frac{\Delta_{hc}}{\gamma_{hc}} \sinh \beta \gamma_{hc} \\ -\frac{\Delta_{hc}}{\gamma_{hc}} \sinh \beta \gamma_{hc} & \cosh \beta \gamma_{hc} - \frac{E_0}{2 \gamma_{hc}} \sinh \beta \gamma_{hc} \end{pmatrix} \quad (5.21)$$

et les représentations matricielles des opérateurs de paires

$$b_j = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b_j^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad b_j^\dagger b_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

L'évaluation des valeurs moyennes se réduit à des traces de matrices. On obtient

$$\langle b_j \rangle = -\frac{\Delta_{hc}}{2 \gamma_{hc}} \tanh \beta \gamma_{hc} \quad (5.23)$$

et

$$\langle b_j^\dagger b_j \rangle = \frac{1}{2} - \frac{E_0}{4 \gamma_{hc}} \tanh \beta \gamma_{hc} \quad (5.24)$$

Pour les fermions, on a les résultats habituels

$$\langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = -\frac{\Delta_{bcs}}{2 \gamma_k} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta \gamma_k \right) \quad (5.25)$$

et

$$\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} \rangle = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta \gamma_k \right) \right) \quad (5.26)$$

avec $\gamma_k = (\epsilon_k^2 + \Delta_{bcs}^2)^{1/2}$. On en déduit les équations self-consistantes pour les deux gaps

$$\Delta_{bcs} = -g \frac{\Delta_{hc}}{2 \gamma_{hc}} \tanh(\beta \gamma_{hc}) \quad \text{et} \quad \Delta_{hc} = -\frac{g}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k}{2 \gamma_k} \quad (5.27)$$

On condense les deux dernières équations en une seule équation: l'équation du gap qui est donnée par

$$1 = g^2 \frac{\tanh \beta \gamma_{hc}}{2 \gamma_{hc}} \frac{1}{M} \sum_k \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta \gamma_k}{2 \gamma_k} \quad (5.28)$$

L'équation pour le nombre total de particules dans le système est donnée par

$$n = \frac{1}{M} \sum_k \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta \gamma_k \right) \right) + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E_0}{2 \gamma_{hc}} \tanh(\beta \gamma_{hc}) \right) \quad (5.29)$$

Ces deux dernières équations constituent les *équations du champ-moyen*. Elles permettent de déterminer le potentiel chimique μ et les deux paramètres d'ordre qui sont reliés entre eux.

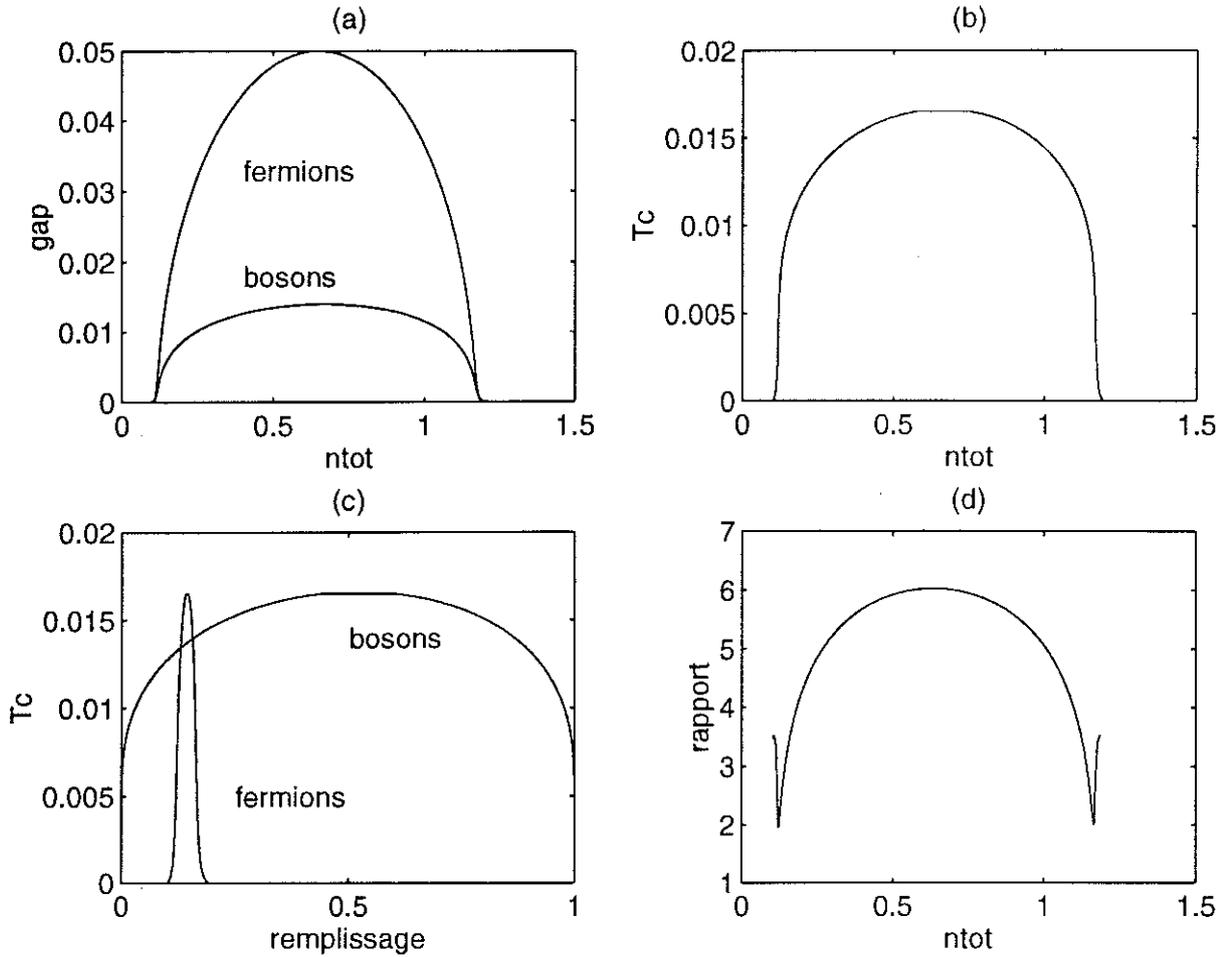


Figure 5.1: Solutions numériques des équations du champ-moyen à $T = 0$ et à T_c pour $g^2 = 0.01$ et $\Delta_B = 0.4$ en fonction du remplissage. La figure (a) montre le gap des fermions et le gap des paires. La figure (b) montre T_c en fonction du remplissage. La figure (c) montre T_c en fonction du nombre de fermions et de paires. La figure (d) montre le rapport $2\Delta_{bcs}/T_c$.

La température critique du système T_C est déterminée lorsque les deux paramètres d'ordre s'annulent. Dans ce cas, $\gamma_{hc} \rightarrow E_0/2$ et $\gamma_k \rightarrow |\epsilon_k|$. Les équations à T_c sont alors

$$E_0 = \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_0\right) \frac{g^2}{M} \sum_k \frac{\tanh\frac{1}{2}\beta\epsilon_k}{2\epsilon_k} \quad (5.30)$$

et

$$n = n_F(E_0) + \frac{1}{M} \sum_k n_F(\epsilon_k) \quad (5.31)$$

Ces équations sont en accord avec celles obtenues dans la section précédente.

Nous résolvons ces équations champ-moyen numériquement pour les paramètres $\Delta_B = 0.4$ et $g^2 = 0.01$ en prenant la densité d'états en $\sqrt{x(1-x)}$.

5.3 Longueur de pénétration

En appendice, nous avons montré que l'on pouvait obtenir la longueur de pénétration magnétique au niveau RPA en évaluant le noyau $K_{\alpha\beta}$. Cette approximation permet d'obtenir la longueur de pénétration magnétique non locale. A température nulle, la partie longitudinale du noyau $K = \sum_{\alpha} K_{\alpha\alpha}$ s'écrit

$$K(\vec{q}) = 2 \frac{e^2 a^2}{\hbar^2} \sum_k \left[t_k n_k - s_{k,q} \frac{(u_k v_{k+q} - v_k u_{k+q})^2}{\gamma_{k+q} + \gamma_k} \right] \quad (5.32)$$

avec

$$t_k = 2 t \sum_{\alpha} \cos(ak_{\alpha}) \quad (5.33)$$

et

$$s_{k,q} = 4 t^2 \sum_k \sin^2 a(k_{\alpha} + q_{\alpha}/2) \quad (5.34)$$

Le premier terme dans l'expression de K qui est indépendant de \mathbf{q} correspond à la longueur de London λ_L^{-2} alors que le second terme permet de définir une longueur de pénétration non locale. Du fait que nous avons un réseau discret, nous définissons la longueur de pénétration non locale, par analogie avec la longueur de Pippard, par

$$\lambda = \frac{\int_0^{\pi} dq (q^2 + K(q, q, q))^{-1}}{\int_0^{\pi} dq (q^2 + 1)^{-1}} \quad (5.35)$$

Pour évaluer ces longueurs de pénétration, nous utilisons un réseau discret à trois dimensions de taille $51 \times 51 \times 51$ avec les mêmes paramètres que précédemment, $\Delta_B = 0.4$ et $g^2 = 0.01$. Nous retrouvons le même comportement pour les gaps des fermions et des bosons de coeurs durs ainsi que pour la longueur de London que l'on peut calculer sans utiliser de réseau discret. Sur la figure 5.2 nous montrons la longueur de pénétration de London locale λ_L^{-2} , ainsi que la longueur de pénétration non locale λ^{-2} définie par la formule 5.35. Le comportement des deux longueurs est très différent. La longueur de London est uniquement reliée au nombre de fermions dans le système par leurs termes cinétiques. Du fait que le nombre de fermions ne varie pas beaucoup dans notre système, le terme de London montre une faible variation. Pour annuler cette longueur de London, il faudrait remplir entièrement la bande des fermions. Or dans notre système, c'est la bande de bosons de coeurs durs que l'on remplit et qui contrôle la supra. Pour retrouver que la longueur de pénétration magnétique s'annule dans la phase normale, il est nécessaire de considérer la contribution paramagnétique.

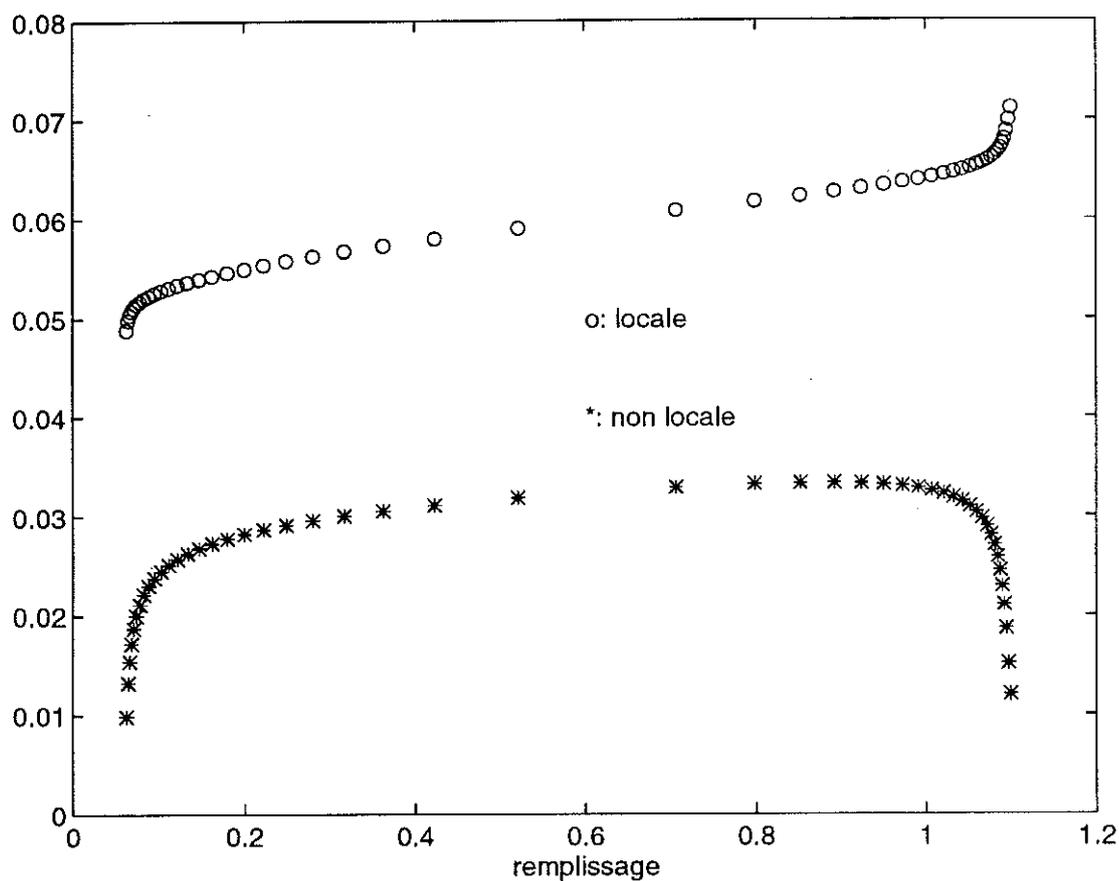


Figure 5.2: Longueur de pénétration magnétique à $T = 0$ pour la phase supra pour un réseau cubique $51 \times 51 \times 51$ avec $\Delta_B = 0.4$ et $g^2 = 0.01$. Les ronds représentent la longueur de pénétration locale λ_L^{-2} alors que les croix représentent la longueur de pénétration non locale λ^{-2} en fonction du remplissage en unité de $2e^2 a^2 / \hbar^2$.

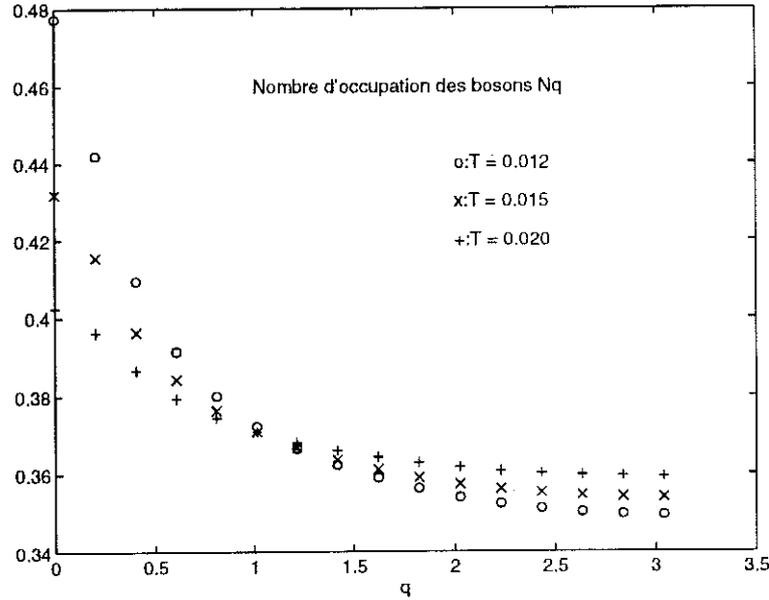


Figure 5.3: Nombres d'occupation des bosons de coeurs durs $\langle b_q^\dagger b_q \rangle$ pour un réseau à deux dimensions 31×31 pour différentes températures. Le pôle des bosons est $E_{0R} = 0.0090$ pour $T = 0.012$, $E_{0R} = 0.0133$ pour $T = 0.015$ et $E_{0R} = 0.0203$ pour $T = 0.020$.

5.4 Excitation dans l'état normal

Nous avons vu dans l'introduction, que l'on pouvait décrire les bosons de coeurs durs sans interaction au moyen d'une fonction de Green de Bose, moyennant l'indroduction d'un facteur thermique supplémentaire $\tanh \frac{1}{2}\beta E_0 = (1 - 2n_p)$, où n_p est le nombre de paires par site. L'idée est donc de modifier les équations diagrammatiques du modèle Boson-Fermion pour la phase normale en remplaçant la fonction de Green des bosons non perturbée $G_B^0(q, \bar{\mu})$ par la fonction de Green non perturbée des paires $G_P^0(q, \bar{\mu})$. Les équations comportent alors un facteur supplémentaire $(1 - 2n_p)$ qui doit être calculé de façon self-consistante. Nous avons donc modifié le code numérique pour le modèle Boson-Fermion afin d'inclure le facteur thermique. Nous avons trouvé que le système d'équations converge beaucoup moins rapidement que pour le modèle Boson-Fermion (ce qui montre sans doute la pauvreté de l'approximation). Il n'a pas été possible de descendre assez bas en température pour observer le pseudo-gap dans la densité d'états des fermions, par exemple. Sur la figure 5.3 nous montrons les nombres d'occupation des bosons $\langle b_q^\dagger b_q \rangle$ pour un réseau à deux dimensions 31×31 pour les paramètres habituels $\Delta_B = 0.4$, $g^2 = 0.01$ et un remplissage de $n = 0.500$ pour trois températures différentes. Comme dans le système Boson-Fermion, les bosons de coeurs durs deviennent itinérants et les nombres d'occupation montrent le même comportement lorsque l'on diminue la température. On peut noter que l'on obtient des nombres d'occupation toujours inférieurs à l'unité, ce qui est en accord avec la contrainte de coeurs durs que l'on a mis dans les équations alors que pour le modèle Boson-Fermion, sans contraintes de coeurs durs, on obtenait des nombres d'occupation bien plus grands que l'unité.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tenté de prendre en compte les corrélations de coeurs durs. Les résultats champ-moyen pour la phase supra sont assez similaires à ceux obtenus pour le modèle Boson-Fermion. La principale différence étant la dépendance par rapport au remplissage du système. Dans le modèle Boson-Fermion, le nombre de bosons n'est pas limité et accomode des remplissages du système avec $n_{bos} \gg 1$ alors que pour des bosons de coeurs durs, nous avons la restriction $n_{bos} \leq 1$. Il en résulte que la superfluidité des bosons disparaît lorsque l'on remplit suffisamment le système.

En ce qui concerne la phase normale, l'approximation des équations couplées s'est avérée très pauvre du point de vue de la convergence numérique. Il faut trouver un autre type d'approximation qui prenne mieux en compte les corrélations de coeurs durs que celle que l'on a utilisé et qui consiste à prendre un propagateur de bosons modifié à la Hubbard dans nos équations self-consistantes, cette approximation n'étant valable qu'au niveau RPA. Néanmoins, tant que l'on considère des densités de bosons faibles, et que l'on ne s'intéresse pas à la dépendance en dopage, le modèle Boson-Fermion devrait être une bonne approximation.

Chapitre 6

Conclusion Générale

Le modèle Boson-Fermion que nous avons étudié dans cette thèse décrit des bosons localisés de charge $2e$ et des fermions itinérants de charge e sur un réseau. Les deux sous-systèmes interagissent via une interaction d'échange entre un boson et deux fermions de spin opposés et la conservation de la charge est assurée par un potentiel chimique partagé pour ces deux types de porteurs de charges. Ce modèle exhibe un état fondamental supraconducteur avec un gap du type BCS dans les excitations à une particule des fermions et des excitations collectives pour les bosons. La différence avec l'approche standard de BCS est que bien au dessus de la température critique T_c , il se développe un pseudo-gap dans la densité d'états à une particule des fermions. Ce pseudo-gap devrait évoluer vers un vrai gap (le gap BCS) pour $T < T_c$ dans la phase supra. Nous sommes intéressés en particulier au régime de température au dessus de T_c où des propriétés différentes de celle d'un liquide de Fermi ont été mises en évidence[30, 32]. A cause de l'hybridation entre les fermions et les bosons, nous avons trouvé, dans la phase normale, un aplatissement du spectre à une particule des fermions, avec de fortes ressemblances avec le spectre des quasiparticules de Bogoliubov dans l'état supraconducteur. Ces excitations s'avèrent fortement amorties et leur poids spectral diminue quand on s'approche du vecteur de Fermi. La durée de vie de ces excitations près du vecteur de Fermi tend vers zéro lorsque la température diminue à T_c (la température critique n'a pas pu être atteinte dans nos calculs numériques). Les fonctions spectrales pour les excitations à une particule près du vecteur de Fermi n'ont pas une simple forme de Lorentzienne. Pour pratiquement tous les vecteurs \mathbf{k} autour du vecteur de Fermi, nous obtenons essentiellement trois pôles dont la somme des poids spectraux vaut pratiquement l'unité. Nous avons trouvé, qu'en général, les résidus sont des nombres complexes avec une partie imaginaire plus grande pour les modes avec une faible durée de vie (γ_k grand). Les résidus complexes indiquent généralement de fortes interférences entre les pôles signifiant que les excitations à une particule ne peuvent plus être décrites par un unique pôle dans la fonction de Green, en opposition avec la théorie des liquides de Fermi. Une quantité très importante qui caractérise la déviation par rapport au liquide de Fermi est la largeur $\Gamma(\mathbf{k}, \omega) = -2\text{Im}\Sigma(\mathbf{k}, \omega + i0^+)$, notamment sa dépendance en température et en fréquence. Pour un liquide de Fermi classique, elle doit s'annuler en ω^2 au voisinage de la surface de Fermi, alors que pour un liquide de Fermi Marginal elle se comporte comme $|\omega|$.

A température finie, on a $\Gamma(\omega) \sim aT^2 + b\omega^2$ et $\Gamma(\omega) \sim aT + b|\omega|$ respectivement. Dans ce cas, le comportement non liquide de Fermi peut être considéré comme marginal alors que dans le modèle Boson-Fermion les déviations par rapport au liquide de Fermi sont très importantes. Nous avons trouvé que le minimum de $\Gamma(\mathbf{k}_F, \omega)$ n'était pas en $\omega = 0$, mais pour des valeurs inférieures, bien que lorsque l'on diminue la température, le minimum se déplace légèrement vers zéro. Le comportement en température que nous avons obtenu, $\Gamma(\mathbf{k}_F, 0) \sim T^{-\alpha}$ ($\alpha = 0.086$ pour $2D$ et $\alpha = 0.60$ pour $1D$) est exactement opposé à la situation d'un liquide de Fermi. En ce qui concerne la fonction de distribution $n(\mathbf{k})$ des fermions, nous avons obtenu, pour $1D$ et $2D$, qu'elle est pratiquement indépendante de la température sauf juste autour du vecteur de Fermi. La disparition des excitations de quasiparticules pour les fermions s'accompagne de l'apparition d'excitations bien définies pour les bosons, qui initialement localisés deviennent itinérants. Nous avons toujours obtenu des fonctions spectrales avec une simple forme de Lorentzienne, dont la largeur diminue avec la température. Lorsque l'on diminue la température, les bosons acquièrent un spectre quadratique $\omega_q = \hbar^2 q^2 / 2m_B$ avec une masse dépendant de la température. A $1D$ nous avons trouvé que la masse des bosons était de l'ordre d'une dizaine de masses électroniques alors que à $2D$ nous avons trouvé une vingtaine de masses électroniques, pour les plus basses températures.

Les calculs numériques dans la phase normale ont montré que les propriétés d'un liquide de Fermi sont complètement détruites pour le modèle Boson-Fermion à une et deux dimensions. Cela est dû aux fortes fluctuations supras qui se développent bien au dessus de la température critique et qui peuvent être vues dans la fonction de corrélation des paires – essentiellement déterminée par la fonction de Green des Bosons – qui est une parfaite Lorentzienne. A partir des fonctions de corrélations statiques des bosons nous avons pu estimer la longueur de cohérence définie par $\langle b_q^+ b_q \rangle \simeq a(1 + \xi^2 q^2)^{-1}$ qui pour $2D$ varie comme $\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}$ (avec $\nu \simeq 1.25$ et $T_c \simeq 0$). Les effets précurseurs d'une superfluidité des bosons et d'une supraconductivité des fermions peuvent aussi être vus dans le comportement du pôle des bosons qui doit s'annuler à T_c (théorème de Hugenholtz et Pines), *ie* $E_0 + \Sigma_B(0, 0) \sim (T - T_c)^\alpha$ avec $\alpha \simeq 2.7$ pour $2D$ et $\alpha \simeq 2.4$ pour $1D$. Ces effets précurseurs cachent un spectre du type Bogoliubov pour les fermions qui est suramorti dans la phase normale. Il en résulte qu'un pseudo-gap se développe bien au dessus de T_c . Nos calculs numériques n'ont pas permis de conclure si ce pseudo-gap évoluait vers le vrai gap BCS, mais les résultats champs-moyen antérieurs[21] et des résultats préliminaires sur la phase supra[33] suggèrent un tel scénario.

Notons que le modèle Boson-Fermion devrait être comparé au modèle de Hubbard $U < 0$ pour lequel un état à deux particules résonant apparaît à l'intérieur du spectre continu à deux particules. Contrairement au modèle Boson-Fermion, ces états sont suramortis et l'on ne s'attend pas à ce qu'ils donnent une condensation de Bose-Einstein. Bien que le modèle de Hubbard $U < 0$ possède de nombreuses similitudes avec le modèle Boson-Fermion, les études récentes suggèrent qu'il reste un liquide de Fermi conventionnel pour le régime du couplage intermédiaire *ie* $U \simeq 4t$ [22].

La prise en compte des corrélations de coeurs durs, n'a pu être faite uniquement dans la phase supra au niveau du champ-moyen. Le principal résultat étant que nous retrouvons le

même comportement dans la phase supra pour le modèle Boson-Fermion et le modèle mixte initial, tant que l'on considère des faibles densités de bosons. Le modèle incorporant des bosons de coeurs durs exhibe les propriétés de symétrie électron-trou, qui sont importantes lorsque l'on analyse les propriétés du système en fonction du dopage[31].

En ce qui concerne l'application du modèle Boson-Fermion aux supraconducteurs à hautes T_c , on peut noter que la présence d'un pseudo-gap dans l'état normal est une caractéristique de ces matériaux pour la phase sous-dopée comme le montre les expériences de RMN, de mesures de susceptibilité, de chaleur spécifique, etc[52] Ce pseudo-gap néanmoins semble diminuer quand T_c atteint sa valeur optimale, lorsque l'on augmente le dopage. Un tel comportement peut être attribué à une variation de Δ_p et du couplage en fonction du dopage. Le modèle Boson-Fermion que nous avons étudié ne prend pas en compte une telle dépendance. La forme de raie donnée par la photoémission (ARPES) n'est pas en accord avec nos résultats, de même que la conductivité optique et nos résultats préliminaires sur les fluctuations magnétiques. Il faut alors souligner les limitations de notre modèle par rapports aux matériaux supras qui sont des composés complexes d'une part et qui possèdent une géométrie particulière. Une extension du modèle dans cette voie, serait d'incorporer des interactions à longue portée pour le terme d'hybridation: $v \rightarrow v_{ij}$ et d'autre part de prendre en compte la structure quasi-bidimensionnelle.

Appendice A

Fonctions de Green

A.1 Fonctions de Green pour les bosons

On définit la fonction de Green retardée pour deux opérateurs A et B par

$$G^R(t) = \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle [A(t), B] \rangle \quad (\text{A.1})$$

avec

$$A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \quad (\text{A.2})$$

et

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} A \} / \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \} \quad (\text{A.3})$$

$A(t)$ est la représentation de Heisenberg de l'opérateur A et H est le hamiltonien du système. Soit $|n\rangle$ et E_n les états propres de H tels que

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (\text{A.4})$$

On peut alors écrire deux fonctions de corrélations

$$J_1(t) = \langle A(t)B \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \quad (\text{A.5})$$

$$J_2(t) = \langle BA(t) \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \quad (\text{A.6})$$

On définit les transformations de Fourier

$$J_1(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} J_1(t) e^{i\omega t} dt \quad (\text{A.7})$$

$$J_2(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} J_2(t) e^{i\omega t} dt \quad (\text{A.8})$$

on obtient alors

$$J_1(\omega) = Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle e^{-\beta E_m} 2\pi \delta(\omega_m - \omega_n + \omega) \quad (\text{A.9})$$

$$J_2(\omega) = Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle e^{-\beta E_n} 2\pi \delta(\omega_m - \omega_n + \omega) \quad (\text{A.10})$$

et la relation

$$J_2(\omega) = e^{-\beta \hbar \omega} J_1(\omega) \quad (\text{A.11})$$

A.1.1 Fonction spectrale

La fonction de Green retardée s'écrit en fonction de $J_1(\omega)$.

$$\begin{aligned} G^R(t) &= \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle A(t)B - BA(t) \rangle \\ &= \frac{\theta(t)}{i\hbar} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\omega} e^{-i\tilde{\omega}t} J_1(\tilde{\omega}) [1 - e^{-\beta \hbar \tilde{\omega}}] \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

on a donc

$$G^R(\omega) = \frac{1}{2\pi \hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tilde{\omega}}{\omega - \tilde{\omega} + i\eta} J_1(\tilde{\omega}) [1 - e^{-\beta \hbar \tilde{\omega}}] \quad (\text{A.13})$$

Les parties réelles et imaginaires de la fonction de Green retardée sont

$$Re G^R(\omega) = \frac{1}{2\pi \hbar} PP \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\tilde{\omega}}{\omega - \tilde{\omega}} J_1(\tilde{\omega}) [1 - e^{-\beta \hbar \tilde{\omega}}] \quad (\text{A.14})$$

$$Im G^R(\omega) = -\frac{1}{2\hbar} J_1(\omega) [1 - e^{-\beta \hbar \omega}] \quad (\text{A.15})$$

La relation qui relie la fonction de corrélation $J_1(\omega)$ à la partie imaginaire de la fonction de Green retardée est appelée le théorème fluctuation dissipation dans certain cas. On définit la fonction spectrale $A(\omega)$ par

$$A(\omega) = -2\hbar Im G^R(\omega) \quad (\text{A.16})$$

On a alors les deux relations importantes

$$J_1(\omega) = n_B(-\hbar\omega)A(\omega) \quad (\text{A.17})$$

$$J_2(\omega) = n_B(\hbar\omega)A(\omega) \quad (\text{A.18})$$

où $n_B(x)$ est la fonction de distribution de Bose Einstein

$$n_B(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \coth \frac{1}{2} \beta x \quad (\text{A.19})$$

A.1.2 Fonction de Green ordonnée

On définit une nouvelle fonction de Green

$$\begin{aligned} G^T(t) &= \frac{1}{i\hbar} \langle T[A(t)B] \rangle \\ &= \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle A(t)B \rangle + \frac{\theta(-t)}{i\hbar} \langle BA(t) \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

ou T est un suopérateur qui ordonne en temps. Cette fonction de Green ordonnée est reliée à la fonction de Green retardée par

$$Re G^R(\omega) = Re G^T(\omega) \quad (\text{A.21})$$

$$Im G^R(\omega) = \tanh \frac{1}{2} \beta \hbar \omega Im G^T(\omega) \quad (\text{A.22})$$

A.1.3 Fonction de Green en température

Dans le formalisme en température, on définit une variable $\sigma = it/\hbar$. La représentation de Heisenberg devient

$$A(\sigma) = e^{\sigma H} A e^{-\sigma H} \quad (\text{A.23})$$

La fonction de Green ordonnée en température est

$$G^T(\sigma) = \langle T[A(\sigma)B] \rangle \quad (\text{A.24})$$

on a alors

$$G^T(\sigma) = \theta(\sigma) \langle A(\sigma)B \rangle + \theta(-\sigma) \langle BA(\sigma) \rangle \quad (\text{A.25})$$

$$\langle A(\sigma)B \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle e^{\sigma(E_m - E_n)} \quad (\text{A.26})$$

$$\langle BA(\sigma) \rangle = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle e^{\sigma(E_m - E_n)} \quad (\text{A.27})$$

on a les propriétés

$$\langle A(\sigma + \beta)B \rangle = \langle BA(\sigma) \rangle \quad (\text{A.28})$$

$$\langle BA(\sigma - \beta) \rangle = \langle A(\sigma)B \rangle \quad (\text{A.29})$$

$$\begin{aligned} G^T(\sigma) &= \langle A(\sigma)B \rangle \quad \text{pour } 0 < \sigma < \beta \\ &= \langle BA(\sigma - \beta) \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

$$= G^T(\sigma - \beta) \quad \text{pour } -\beta < \sigma - \beta < 0$$

donc $G^T(\sigma)$ est périodique sur $[0, \beta]$. On développe $G^T(\sigma)$ en série de Fourier

$$G^T(\sigma) = \sum_{\bar{\mu}} e^{i\sigma\bar{\mu}} \quad \text{avec } \bar{\mu} = \frac{2\pi}{\beta}n \quad \text{et } n \text{ entier} \quad (\text{A.31})$$

$$G^T(\bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\sigma e^{-i\sigma\bar{\mu}} G(\sigma) \quad (\text{A.32})$$

on obtient alors

$$G^T(\bar{\mu}) = \frac{1}{2\pi\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{A(\omega)}{i\bar{\mu} + \omega} \quad (\text{A.33})$$

$$A(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} 2\beta \operatorname{Im} G^T(i\bar{\mu} - \omega - i\eta) \quad (\text{A.34})$$

A.2 Fonctions de Green pour les fermions

Pour les fermions on remplace la symétrie des bosons (commutateurs) par la symétrie des fermions (anticommutateurs).

$$\begin{aligned} G^R(t) &= \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle \{A(t), B\} \rangle \\ &= \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle A(t)B + BA(t) \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

$$\begin{aligned}
G^T(t) &= \frac{1}{i\hbar} \langle T[A(t)B] \rangle \\
&= \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle A(t)B \rangle - \frac{\theta(-t)}{i\hbar} \langle BA(t) \rangle
\end{aligned} \tag{A.36}$$

La fonction de Green en température est

$$G(\sigma) = \langle T[A(\sigma)B] \rangle \tag{A.37}$$

$$G^T(\sigma) = \sum_{\bar{\nu}} e^{i\sigma\bar{\nu}} G^T(\bar{\nu}) \tag{A.38}$$

$$G^T(\bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\sigma e^{-i\sigma\bar{\nu}} G^T(\sigma) \quad \text{avec} \quad \bar{\nu} = \frac{2\pi}{2\beta}(2n+1) \tag{A.39}$$

$$J_1(\omega) = n_F(-\hbar\omega)A(\omega) \tag{A.40}$$

$$J_2(\omega) = n_F(\hbar\omega)A(\omega) \tag{A.41}$$

$$\text{Re}G^R(\omega) = \text{Re}G^T(\omega) \tag{A.42}$$

$$\text{Im} G^R(\omega) = \coth \frac{1}{2}\beta\hbar\omega \quad \text{Im} G^T(\omega) \tag{A.43}$$

A.3 Règles de somme

On a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_1(\omega) = 2\pi \sum_m \langle m|AB|m \rangle e^{-\beta E_m} Z^{-1} \tag{A.44}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J_2(\omega) = 2\pi \sum_m \langle m|BA|m \rangle e^{-\beta E_m} Z^{-1} \tag{A.45}$$

Pour les fermions, on a

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [J_1(\omega) + J_2(\omega)] \\
&= 2\pi \sum_m \langle m|\{A, B\}|m \rangle e^{-\beta E_m} Z^{-1} \\
&= 2\pi \quad \text{si} \quad \{A, B\} = 1
\end{aligned} \tag{A.46}$$

Pour les bosons, on a

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega [J_1(\omega) - J_2(\omega)] \\
&= 2\pi \sum_m \langle m|[A, B]|m \rangle e^{-\beta E_m} Z^{-1} \\
&= 2\pi \quad \text{si} \quad [A, B] = 1
\end{aligned} \tag{A.47}$$

A.4 Fonctions de Green et seconde quantification

Pour un système de fermions, le hamiltonien est de la forme

$$H = H_0 + H_1 \quad (\text{A.48})$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad (\text{A.49})$$

$$H_1 = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} V_q c_{k+q\sigma}^+ c_{k'-q\sigma'}^+ c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \quad (\text{A.50})$$

On définit une fonction de Green pour l'état k par

$$G^R(k, t) = \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle \{c_{k\sigma}(t), c_{k\sigma}^+\} \rangle \quad (\text{A.51})$$

On a la règle de somme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(k, \omega) = 1 \quad (\text{A.52})$$

La fonction de corrélation $J_2(k, \omega)$ donne

$$\langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) A(k, \omega) \quad (\text{A.53})$$

A l'ordre zéro, c'est-à-dire pour $H = H_0$, on a

$$G^R(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_k + i\eta} \quad (\text{A.54})$$

$$G^T(k, \omega) = \frac{n_F(\epsilon_k)}{\hbar\omega - i\eta} + \frac{n_F(-\epsilon_k)}{\hbar\omega - \epsilon_k + i\eta} \quad (\text{A.55})$$

$$A(k, \omega) = 2\pi\delta(\hbar\omega - \epsilon_k) \quad (\text{A.56})$$

$$G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k} \quad (\text{A.57})$$

Pour un système de bosons, on peut écrire le hamiltonien

$$H = \sum_q E_q b_q^+ b_q + H_1 \quad (\text{A.58})$$

On définit la fonction de Green

$$B^R(q, t) = \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle [b_q(t), b_q^+] \rangle \quad (\text{A.59})$$

Les règles de sommation sont identiques

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(q, \omega) = 1 \quad (\text{A.60})$$

$$\langle b_q^+ b_q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) A(q, \omega) \quad (\text{A.61})$$

A l'ordre zéro, on a

$$B^R(q, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - E_q + i\eta} \quad (\text{A.62})$$

$$B^T(q, \omega) = \frac{1 + n_B(E_q)}{\hbar\omega - E_q + i\eta} + \frac{n_B(E_q)}{\hbar\omega - E_q - i\eta} \quad (\text{A.63})$$

$$B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta i\bar{\mu} + E_q} \quad (\text{A.64})$$

$$A(q, \omega) = 2\pi\delta(\hbar\omega - E_q) \quad (\text{A.65})$$

A.5 Forme opérationnelle pour les fonctions de Green

On pose la forme opérationnelle pour la fonction de Green $G(\omega)$

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - H} \quad (\text{A.66})$$

$$G_0(\omega) = \frac{1}{\omega - H_0} \quad (\text{A.67})$$

Pour $H = H_0 + V$, on a

$$G(\omega) = G_0(\omega) + G_0(\omega)V G(\omega) \quad (\text{A.68})$$

Pour le formalisme en température, on pose

$$G(\bar{\nu}) = \frac{1}{\beta i\bar{\nu} + H} \quad (\text{A.69})$$

$$G_0(\bar{\nu}) = \frac{1}{\beta i\bar{\nu} + H_0}$$

$$G(\bar{\nu}) = G_0(\bar{\nu}) - \beta G_0(\bar{\nu}) V G(\bar{\nu})$$

On a alors

$$G(k, \omega) = \langle k | G(\omega) | k \rangle \quad (\text{A.70})$$

$$= G_0(k, \omega) + \sum_p G_0(k, \omega) V_{kp} G(p, \omega)$$

On définit la self-énergie $\Sigma(k, \omega)$ par la relation

$$G(k, \omega) = G_0(k, \omega) + G_0(k, \omega) \Sigma(k, \omega) G(k, \omega) \quad (\text{A.71})$$

$$G(k, \bar{\nu}) = G_0(k, \bar{\nu}) - \beta G_0(k, \bar{\nu}) \Sigma(k, \bar{\nu}) G(k, \bar{\nu}) \quad (\text{A.72})$$

La self-énergie pour la fonction de Green retardée est obtenue à partir de la self-énergie dans le formalisme en température par $\Sigma^R(k, \omega) = \Sigma(k, i\bar{\nu} = -\omega - i\eta)$ et on écrit

$$\Sigma^R(k, \omega) = R(k, \omega) - \frac{i}{2} \Gamma(k, \omega) \quad (\text{A.73})$$

$$R(k, \omega) = PP \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma(k, \omega')}{\omega - \omega'} \quad (\text{A.74})$$

Appendice B

Théorie des Perturbations

Dans cet appendice, on revoit le développement de Feynman-Dyson pour des questions de notations, puis on montre comment on l'utilise pour calculer les self-énergies et le potentiel thermodynamique.

B.1 Le développement de Feynman-Dyson

On définit la représentation en interaction (en température) d'un opérateur A par

$$\tilde{A}(\sigma) = e^{\sigma H_0} A e^{-\sigma H_0} \quad (\text{B.1})$$

où H_0 est le hamiltonien non perturbé et représente en fait $H_0 - \mu N$. On définit l'opérateur d'évolution $U(\sigma, \sigma')$

$$U(\sigma, \sigma') = e^{\sigma H_0} e^{-(\sigma - \sigma')H} e^{-\sigma' H_0} \quad (\text{B.2})$$

qui vérifie l'équation d'évolution

$$\frac{\partial}{\partial \sigma} U(\sigma, \sigma') = -\tilde{H}_1(\sigma)U(\sigma, \sigma') \quad (\text{B.3})$$

avec $H = H_0 + H_1$. La solution de cette équation est

$$U(\sigma, \sigma') = 1 - \int_{\sigma'}^{\sigma} d\sigma'' \tilde{H}_1(\sigma'')U(\sigma'', \sigma') \quad (\text{B.4})$$

Si l'on itère la solution, on obtient

$$U(\sigma, \sigma') = \sum_{n=0}^{+\infty} (-)^n \int_{\sigma'}^{\sigma} d\sigma_1 \int_{\sigma'}^{\sigma_1} d\sigma_2 \dots \int_{\sigma'}^{\sigma_{n-1}} d\sigma_n \tilde{H}_1(\sigma_1)\tilde{H}_1(\sigma_2)\dots\tilde{H}_1(\sigma_n) \quad (\text{B.5})$$

en utilisant le suropérateur de Dyson, la série s'écrit

$$U(\sigma, \sigma') = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-)^n}{n!} \int_{\sigma'}^{\sigma} d\sigma_1 \int_{\sigma'}^{\sigma} d\sigma_2 \dots \int_{\sigma'}^{\sigma} d\sigma_n T [\tilde{H}_1(\sigma_1)\tilde{H}_1(\sigma_2)\dots\tilde{H}_1(\sigma_n)] \quad (\text{B.6})$$

On remarque alors que

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} U(\beta, 0) \quad (\text{B.7})$$

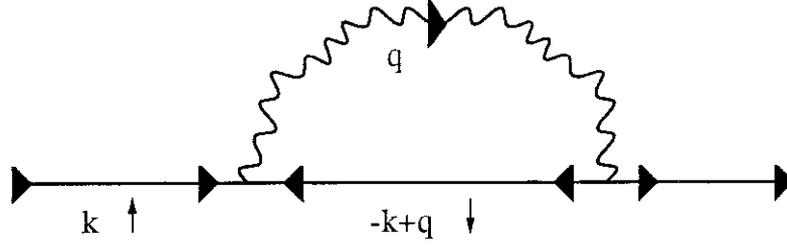


Figure B.1: Self-énergie des fermions à l'ordre deux

$$A(\sigma) = U(0, \sigma) \tilde{A}(\sigma) U(\sigma, 0) \quad (\text{B.8})$$

Les fonctions de Green s'écrivent

$$\langle T[A(\sigma)B] \rangle = \frac{1}{\Xi} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} A(\sigma)B \} \quad (\text{B.9})$$

et en utilisant la représentation interaction, et l'opérateur d'évolution $U(\beta, 0)$, on obtient

$$\langle T[A(\sigma)B] \rangle = \frac{\langle T[U(\beta, 0)\tilde{A}(\sigma)B] \rangle_0}{\langle U(\beta, 0) \rangle_0} \quad (\text{B.10})$$

La fonction de partition Grand Canonique s'écrit

$$\begin{aligned} \Xi(T, \mu, \Omega) &= \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \} \\ &= \text{Tr} \{ e^{-\beta H_0} U(\beta, 0) \} \\ &= \Xi_0(T, \mu, \Omega) \langle U(\beta, 0) \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

avec

$$U(\beta, 0) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-)^n}{n!} \int_0^\beta d\sigma_1 \int_0^\beta d\sigma_2 \dots \int_0^\beta d\sigma_n T [\tilde{H}_1(\sigma_1)\tilde{H}_1(\sigma_2) \dots \tilde{H}_1(\sigma_n)] \quad (\text{B.12})$$

B.2 Self-énergie des fermions

La fonction de Green des fermions est

$$G(k, \sigma) = \langle T[c_{k\uparrow}(\sigma) c_{k\uparrow}^+] \rangle \quad (\text{B.13})$$

On se propose d'évaluer la self-énergie des fermions à l'ordre deux qui intervient dans l'approximation des équations couplées par exemple. Le développement donne

$$\langle T[\tilde{c}_{k\uparrow}(\sigma)\tilde{H}_1(\sigma_2)\tilde{H}_1(\sigma_1)\tilde{c}_{k\uparrow}^+] \rangle \quad (\text{B.14})$$

On prend le terme qui correspond au diagramme de la figure B.1 Les contractions correspon-

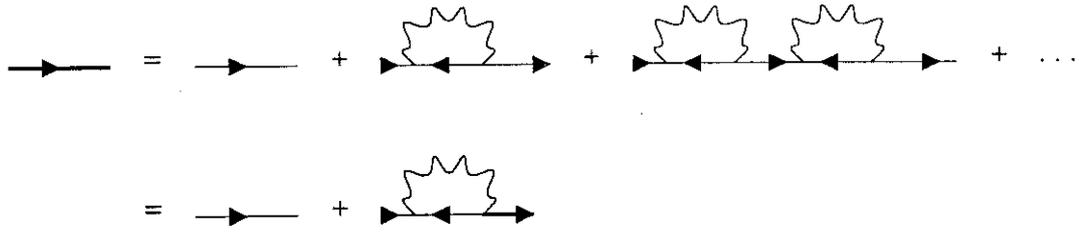


Figure B.2: Equation de Dyson diagrammatique pour la self-énergie des fermions.

dantes sont

$$\frac{c_{k\uparrow}}{c_{k\uparrow}^+} \frac{c_{-k+q\downarrow}^+}{c_{-k+q\downarrow}} \frac{b_q}{b_q^+} \frac{c_{-k+q\downarrow}}{c_{k\uparrow}} \frac{c_{k\uparrow}^+}{c_{k\uparrow}^+} \quad (B.15)$$

ce qui correspond à

$$-G^0(k, \sigma - \sigma_2)G^0(-k + q, \sigma_1 - \sigma_2)B^0(q, \sigma_2 - \sigma_1)G^0(k, \sigma_1) \quad (B.16)$$

On a alors la correction à la fonction de Green à l'ordre deux pour le diagramme correspondant

$$G(k, \sigma) = G^0(k, \sigma) - \frac{g^2}{M} \sum_q \int_0^\beta d\sigma_1 \int_0^\beta d\sigma_2 G^0(k, \sigma - \sigma_2) \dots \quad (B.17)$$

Le signe moins vient des fermions. On passe en fréquences de Matsubara, ce qui donne

$$\begin{aligned} G(k, \bar{\nu}) &= G^0(k, \bar{\nu}) - \frac{g^2}{M} \sum_q \beta^2 \sum_{\bar{\nu}'} G^0(k, \bar{\nu})G^0(-k + q, \bar{\nu}')B^0(q, \bar{\nu} + \bar{\nu}')G^0(k, \bar{\nu}) \\ &= G^0(k, \bar{\nu}) - \beta G^0(k, \bar{\nu})\Sigma_F^0(k, \bar{\nu})G^0(k, \bar{\nu}) \end{aligned} \quad (B.18)$$

avec

$$\Sigma_F^0(k, \bar{\nu}) = \frac{g^2}{M} \sum_q \beta \sum_{\bar{\nu}'} G^0(-k + q, \bar{\nu}')B^0(q, \bar{\nu} + \bar{\nu}') \quad (B.19)$$

On considère alors la série de diagrammes de la figure B.2 qui correspond à l'équation de Dyson $G = G^0 - \beta G^0 \Sigma_F G$ et donc Σ_F représente la self-énergie du fermion pour cette série de diagrammes. La dernière étape est de remplacer les lignes nues des propagateurs de fermions et de bosons par les lignes habillées. On obtient alors la self-énergie

$$\Sigma_F(k, \bar{\nu}) = \frac{g^2}{M} \sum_q \beta \sum_{\bar{\nu}'} G(-k + q, \bar{\nu}')B(q, \bar{\nu} + \bar{\nu}') \quad (B.20)$$

C'est cette self-énergie qui intervient dans les équations diagrammatiques couplées.

On introduit les représentations spectrales des fonctions de Green de Matsubara

$$\Sigma_F(k, \bar{\nu}) = \frac{g^2}{M} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(-k + q, \omega_1)A_F(k, \omega_2) \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\nu}'} \frac{1}{i\bar{\nu}' + \omega_1} \frac{1}{i\bar{\nu} + i\bar{\nu}' + \omega_2} \quad (B.21)$$

Pour évaluer la somme sur les fréquences de Matsubara des fermions, on utilise le fait que les pôles de la fonction de Fermi $n_F(z)$ sont $z_0 = i\bar{\nu}$ et le résidu est

$$\lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) n_F(z) = -\frac{1}{\beta} \quad (B.22)$$

ce qui donne la transformation

$$\int_C dz n_F(z) f(z) = -\frac{1}{\beta} 2\pi i \sum_{\bar{\nu}} f(i\bar{\nu}) \quad (\text{B.23})$$

où le contour C englobe tous les pôles discrets. La somme que l'on veut évaluer s'écrit

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\nu}'} \frac{1}{i\bar{\nu} + i\bar{\nu}' + \omega_2} \frac{1}{i\bar{\nu} + \omega_1} = -\frac{1}{2\pi i} \int_C dz n_F(z) \frac{1}{z + i\bar{\nu} + \omega_2} \frac{1}{z + \omega_1} \quad (\text{B.24})$$

on déforme le contour C sur les deux pôles $z = -\omega_1$ et $z = -i\bar{\nu} - \omega_2$. La somme devient

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\nu}'} \frac{1}{i\bar{\nu} + i\bar{\nu}' + \omega_2} \frac{1}{i\bar{\nu} + \omega_1} &= \frac{n_F(-\omega_1) - n_F(-i\bar{\nu} - \omega_2)}{i\bar{\nu} + \omega_2 - \omega_1} \\ &= -\frac{n_F(\omega_1) + n_B(\omega_2)}{i\bar{\nu} + \omega_2 - \omega_1} \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

On obtient alors l'expression de la self-énergie en fonction des fonctions spectrales des fermions et des bosons $A_F(k, \omega)$ et $A_B(q, \omega)$

$$\Sigma_F(k, \omega) = -\frac{g^2}{M} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(-k + q, \omega_1) A_B(q, \omega_2) \frac{n_F(\omega_1) + n_B(\omega_2)}{i\bar{\nu} + \omega_2 - \omega_1} \quad (\text{B.26})$$

A l'ordre le plus bas, c'est-à-dire en prenant des lignes de propagateurs nues, les fonctions spectrales sont celles des particules libres, $A_F(k, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_k)$ et $A_B(q, \omega) = 2\pi\delta(\omega - E_q)$. La self-énergie se réduit alors à

$$\Sigma_F^0(k, \bar{\nu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_q \frac{n_F(\epsilon_{-k+q}) + n_B(E_q)}{i\bar{\nu} + E_q - \epsilon_{-k+q}} \quad (\text{B.27})$$

La première remarque que l'on peut faire, est que le développement de Dyson pour les fonctions de Green, fait intervenir deux séries; une au numérateur et une au dénominateur. Le dénominateur $\langle U(\beta, 0) \rangle_0$ peut être oublié si l'on prend uniquement les diagrammes connectés du numérateur. Le facteur $1/n!$ est aussi oublié du fait que l'on peut permuter les n temps en obtenant le même diagramme.

La deuxième remarque est que l'on peut obtenir la self-énergie au moyen des équations d'évolution pour l'ordre le plus bas.

B.3 Self-énergie des bosons

La fonction de Green des bosons est

$$B(q, \sigma) = \langle T[b_q(\sigma)b_q^+] \rangle \quad (\text{B.28})$$

A l'ordre deux, il faut évaluer le produit

$$\langle T[\tilde{b}_q(\sigma) \tilde{H}_1(\sigma_2) \tilde{H}_1(\sigma_1) \tilde{b}_q] \rangle_0 \quad (\text{B.29})$$

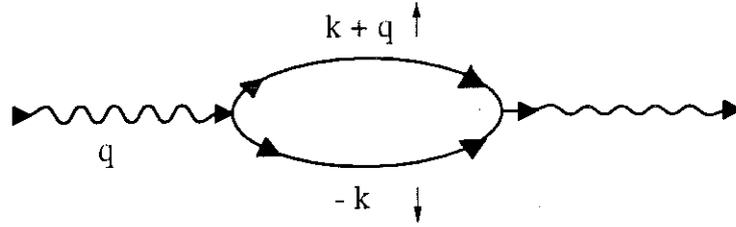


Figure B.3: Self-énergie des bosons à l'ordre deux.

qui correspond au diagramme de la figure B.3 Les contractions correspondantes sont,

$$\frac{b_q}{\quad} \frac{b_q^+}{\quad} \frac{c_{-k+q\downarrow}}{\quad} \frac{c_{k\uparrow}}{\quad} \frac{c_{k\uparrow}^+}{\quad} \frac{c_{-k+q\downarrow}^+}{\quad} \frac{b_q}{\quad} \frac{b_q^+}{\quad} \quad (B.30)$$

qui donnent

$$+ B^0(q, \sigma - \sigma_2) G^0(-k + q, \sigma_2 - \sigma_1) G^0(k, \sigma_2 - \sigma_1) B^0(q, \sigma_1 - \sigma) \quad (B.31)$$

Le développement à l'ordre deux pour le diagramme correspondant est alors

$$B(q, \sigma) = B^0(q, \sigma) + \frac{g^2}{M} \sum_k \int_0^\beta d\sigma_1 \int_0^\beta d\sigma_2 B^0(q, \sigma - \sigma_2) \dots \quad (B.32)$$

On passe en fréquences de Matsubara

$$B(q, \bar{\mu}) = B^0(q, \bar{\mu}) + \frac{g^2}{M} \sum_{k, \bar{\nu}} \beta^2 B^0(q, \bar{\mu}) G^0(-k + q, \bar{\mu} - \bar{\nu}) G^0(k, \bar{\nu}) B^0(q, \bar{\mu}) \quad (B.33)$$

On en déduit alors la self-énergie du développement de Feynman-Dyson.

$$\Sigma_B^0(q, \bar{\mu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \beta \sum_{\bar{\nu}} G^0(-k + q, \bar{\mu} - \bar{\nu}) G^0(k, \bar{\nu}) \quad (B.34)$$

Dans les équations diagrammatiques couplées, on remplace les lignes nues des propagateurs par des lignes habillées. La self-énergie est alors

$$\Sigma_B(q, \bar{\mu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \beta \sum_{\bar{\nu}} G(-k + q, \bar{\mu} - \bar{\nu}) G(k, \bar{\nu}) \quad (B.35)$$

On introduit les représentations spectrales des fonctions de Green des fermions, $A_F(k, \omega)$. La self-énergie s'écrit

$$\Sigma_B(q, \bar{\mu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(-k + q, \omega_1) A_F(k, \omega_2) \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\nu}} \frac{1}{i\bar{\mu} - i\bar{\nu} + \omega_1} \frac{1}{i\bar{\nu} + \omega_2} \quad (B.36)$$

On évalue la somme sur les fréquences de Matsubara des fermions en utilisant les pôles de la fonction de Fermi $n_F(z)$ puis en déformant le contour. On obtient alors l'expression de la self-énergie

$$\Sigma_B(q, \bar{\mu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(-k + q, \omega_1) A_F(k, \omega_2) \frac{1 - n_F(\omega_1) - n_F(\omega_2)}{i\bar{\mu} + \omega_1 + \omega_2} \quad (B.37)$$

A l'ordre le plus bas, on remplace les fonctions spectrales des propagateurs habillés par celles des propagateurs libres. On obtient

$$\Sigma_B^0(q, \bar{\mu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \frac{1 - n_F(\epsilon_{-k+q}) - n_F(\epsilon_k)}{i\bar{\mu} + \epsilon_{-k+q} + \epsilon_k} \quad (\text{B.38})$$

On peut faire les mêmes remarques sur le développement de Feynman-Dyson et la méthode des équations d'évolution que pour les fermions.

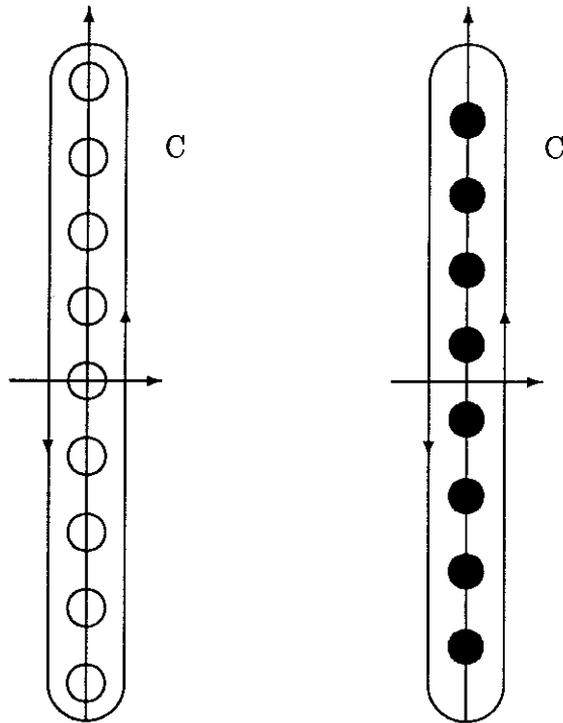
Pour effectuer les sommes sur les fréquences de bosons, on peut utiliser les pôles de la fonction de Bose $n_B(z)$ qui valent $z_0 = i\bar{\mu}$ alors que le résidu vaut

$$\lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) n_B(z) = \frac{1}{\beta} \quad (\text{B.39})$$

ce qui permet de remplacer la somme discrète des fréquences de Matsubara des bosons par une intégrale de contour.

$$\int_C dz n_B(z) f(z) = \frac{2\pi i}{\beta} \sum_{\bar{\mu}} f(i\bar{\mu}) \quad (\text{B.40})$$

où C est un contour qui englobe tous les pôles.



contour pour les bosons contour pour les fermions

B.4 Potentiel thermodynamique

La fonction de partition Grand Canonique est

$$\Xi(T, \mu, \Omega) = \Xi^0(T, \mu, \Omega) \langle U(\beta, 0) \rangle_0 \quad (\text{B.41})$$

avec

$$U(\beta, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} \int_0^\beta d\sigma_1 \dots \int_0^\beta d\sigma_n T [\tilde{H}_1(\sigma_1) \dots \tilde{H}_1(\sigma_n)] \quad (\text{B.42})$$

$\Xi^0(T, \mu, \Omega)$ est la fonction de partition Grand Canonique du système non perturbé qui correspond à H_0

$$H_0 = \sum_{k, \sigma=\uparrow, \downarrow} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_q E_q b_q^+ b_q \quad (\text{B.43})$$

On évalue Ξ^0

$$\begin{aligned} \Xi^0 &= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}} e^{-\beta \sum_q E_q b_q^+ b_q} \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

Les nombres d'occupation sont diagonaux, donc on remplace la somme sur tous les états par la somme sur les nombres d'occupation.

$$\begin{aligned} \Xi^0 &= \prod_{k, \sigma} \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \epsilon_k} \right] \prod_q \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n E_q} \right] \\ &= \prod_{k, \sigma} \left[1 + e^{-\beta \epsilon_k} \right] \prod_q \left[\frac{1}{1 - e^{-\beta E_q}} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Le potentiel thermodynamique est

$$J(T, \mu, \Omega) = -\frac{1}{\beta} \text{Ln} \Xi(T, \mu, \Omega) \quad (\text{B.46})$$

pour le système non perturbé, on obtient

$$J^0(T, \mu, \Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{k, \sigma} \text{Ln} [1 + e^{-\beta \epsilon_k}] + \frac{1}{\beta} \sum_q \text{Ln} [1 - e^{-\beta E_q}] \quad (\text{B.47})$$

Dans ce qui suit, nous développons l'expression de J de façon perturbative directe au moyen du développement de Feynman-Dyson puis, dans un deuxième temps, nous employons la méthode de la constante de couplage qui permet d'obtenir J au moyen de la fonction de Green des bosons.

B.4.1 Développement perturbatif

Le terme d'interaction est H_1

$$H_1 = \frac{g}{\sqrt{M}} \sum_{k, q} [b_q^+ c_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow} + c_{k+q\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ b_q] \quad (\text{B.48})$$

Si on écrit ce terme de façon symbolique $V = (A^+ + A)$, alors à l'ordre n , on obtient, en négligeant les commutateurs

$$V^n = (A^+ + A)^n = \sum_{p=0}^n C_n^p (A^+)^{n-p} A^p \quad (\text{B.49})$$

La valeur de V^n sur l'état non perturbé est non nulle si $n = n - p$ ou $p = n/2$. Il y a donc $C_n^{n/2}$ termes à l'ordre n avec

$$C_n^{n/2} = \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}\right)! \left(\frac{n}{2}\right)!} \quad (\text{B.50})$$

n	2	4	6	8	10
$C_n^{n/2}$	2	6	20	70	252

(B.51)

Pour chacun des $C_n^{n/2}$ termes, il y a $\frac{n}{2}$ termes $c_\uparrow^\dagger c_\uparrow^\dagger b$ et $\frac{n}{2}$ termes $b^\dagger c_\downarrow c_\downarrow$. Le nombre de contractions possibles est alors $\left[\left(\frac{n}{2}\right)!\right]^3$. Donc à l'ordre n , il y a

$$C_n^{n/2} \times \left[\left(\frac{n}{2}\right)!\right]^3 = n! \left(\frac{n}{2}\right)! \text{ diagrammes.} \quad (\text{B.52})$$

A partir d'un diagramme, on en obtient $C_n^{n/2}$ identiques en échangeant les labels de temps:

$$\begin{aligned} C_n^{n/2} &= \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}\right)! \left(\frac{n}{2}\right)!} \\ &= \frac{\text{permutations de tous les temps}}{\text{permutations des } A^+ \times \text{permutations des } A} \end{aligned} \quad (\text{B.53})$$

On peut donc regarder une seule configuration de labels de temps et multiplier le résultat par $C_n^{n/2}$. Il reste alors $\left[\left(\frac{n}{2}\right)!\right]^3$ diagrammes à évaluer à l'ordre n .

Si l'on commence par contracter les bosons, il y a $\left(\frac{n}{2}\right)!$ choix possibles. Ces $\left(\frac{n}{2}\right)!$ contractions donnent la même contribution, car une contraction donne toutes les autres en échangeant les labels de temps. On choisit donc une configuration avec $n/2$ vertices qui est représentée sur la figure B.4. On construit tous les graphes possibles et on multiplie par $\left(\frac{n}{2}\right)! \times C_n^{n/2}$. Il y a $\left[\left(\frac{n}{2}\right)!\right]^2$ graphes possibles. On calcule alors le nombre de diagrammes identiques. On considère le groupe des transformations G qui consiste à échanger les lignes de bosons (celles de la configuration avec $n/2$ vertices). On a $\dim G = \left(\frac{n}{2}\right)!$. On note G_T le groupe des transformations qui laissent un diagramme inchangé. On note $\dim G_T = S$. Pour obtenir S , on numérote les lignes de bosons par des labels allant de 1 à $n/2$. Alors, S est le nombre de permutations qui laissent le diagramme inchangé (sens des flèches et labels). Il faut de plus tenir compte de la symétrie qui consiste à échanger le spin des lignes de fermions. Pour aller d'un vertex i à un vertex j , on a deux possibilités, soit avec le spin \uparrow , soit avec le spin \downarrow , sauf si les deux lignes de fermions partant du même vertex vont au même vertex. Dans ce dernier cas, il n'y a qu'une possibilité, on dit que les deux lignes de fermions forment une ligne de paire équivalente. On tient compte de cette symétrie en multipliant par le facteur 2^{n_f} , où n_f est le nombre de boucles de lignes de fermions qui ne forment pas de lignes de paires équivalentes. Le nombre de diagrammes équivalent est

$$N = \frac{2^{n_f} \left(\frac{n}{2}\right)!}{S} \quad (\text{B.54})$$

On obtient alors la règle de somme pour les diagrammes distincts

$$\sum_{\text{diag. dist.}} \frac{2^{n_f} \left(\frac{n}{2}\right)!}{S} = \left[\left(\frac{n}{2}\right)!\right]^2 \quad (\text{B.55})$$

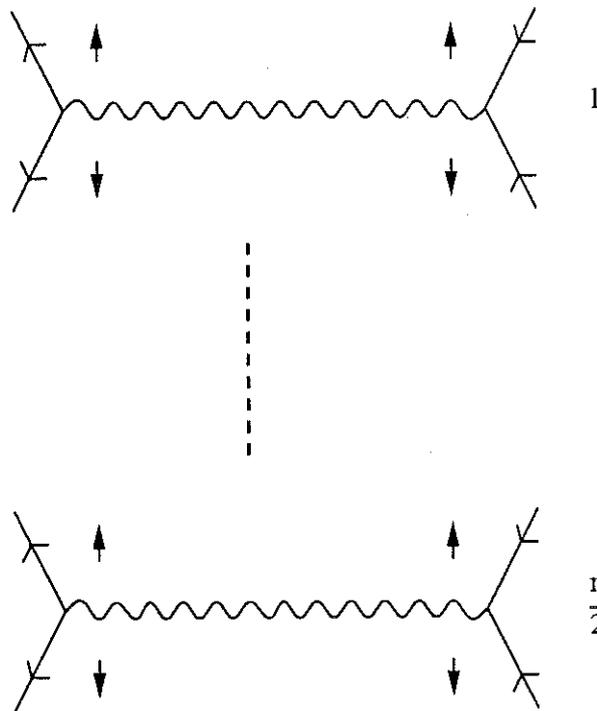


Figure B.4: Configuration à $n/2$ vertices.

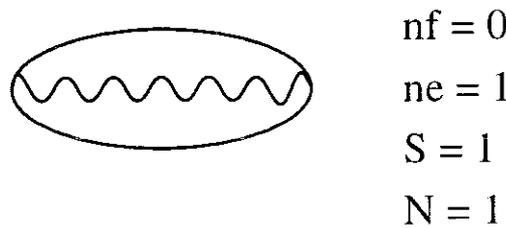


Figure B.5: Diagramme pour $n = 2$.

soit encore en simplifiant,

$$\sum_{diag.dist.} \frac{2^{n_f}}{S} = \left(\frac{n}{2}\right)! \quad (B.56)$$

Pour $n = 2$, il y a un seul diagramme distinct qui est représenté sur la figure B.5. Pour $n = 4$, il y a trois diagrammes distincts représentés sur la figure B.6. Pour $n = 6$, il y a huit diagrammes différents qui sont représentés sur la figure B.7.

On peut vérifier les règles de sommation pour les diagrammes donnés ci-dessus. On obtient alors l'expression de la fonction de partition Grand Canonique

$$\begin{aligned} \Xi(T, \mu, \Omega) &= \Xi^0(T, \mu, \Omega) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} (\text{diagrammes}) \\ &= \Xi^0(T, \mu, \Omega) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^{n_f} (-)^n}{S} (\text{diagrammes différents}) \end{aligned} \quad (B.57)$$

Considérons par exemple la série de diagrammes de la figure B.8 pour le potentiel Grand Canonique. Ces diagrammes sont des boucles de fermions reliées par des propagateurs de

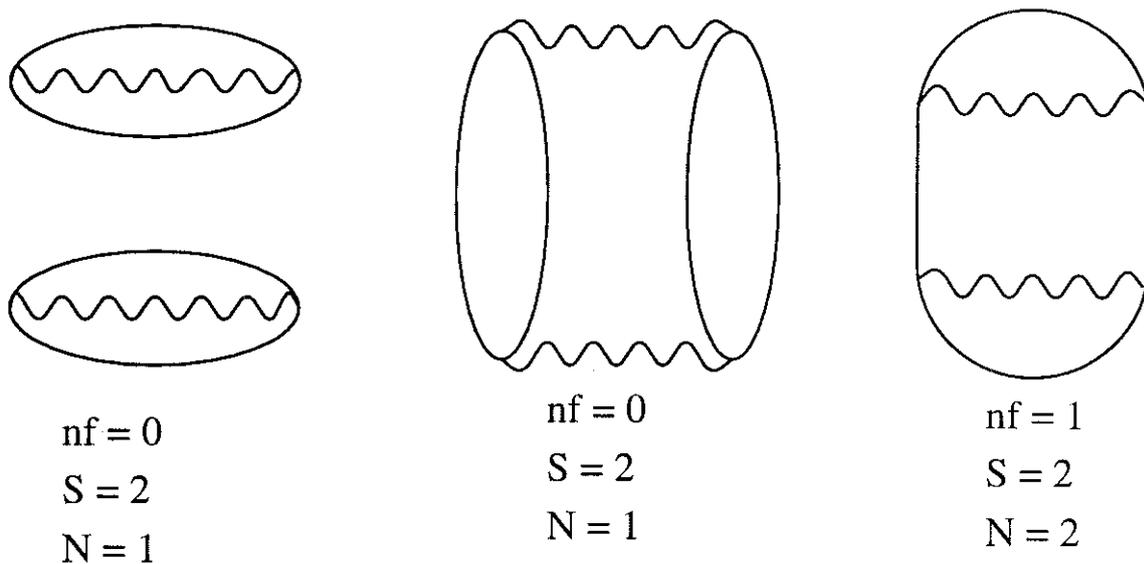


Figure B.6: Diagrammes pour $n = 4$.

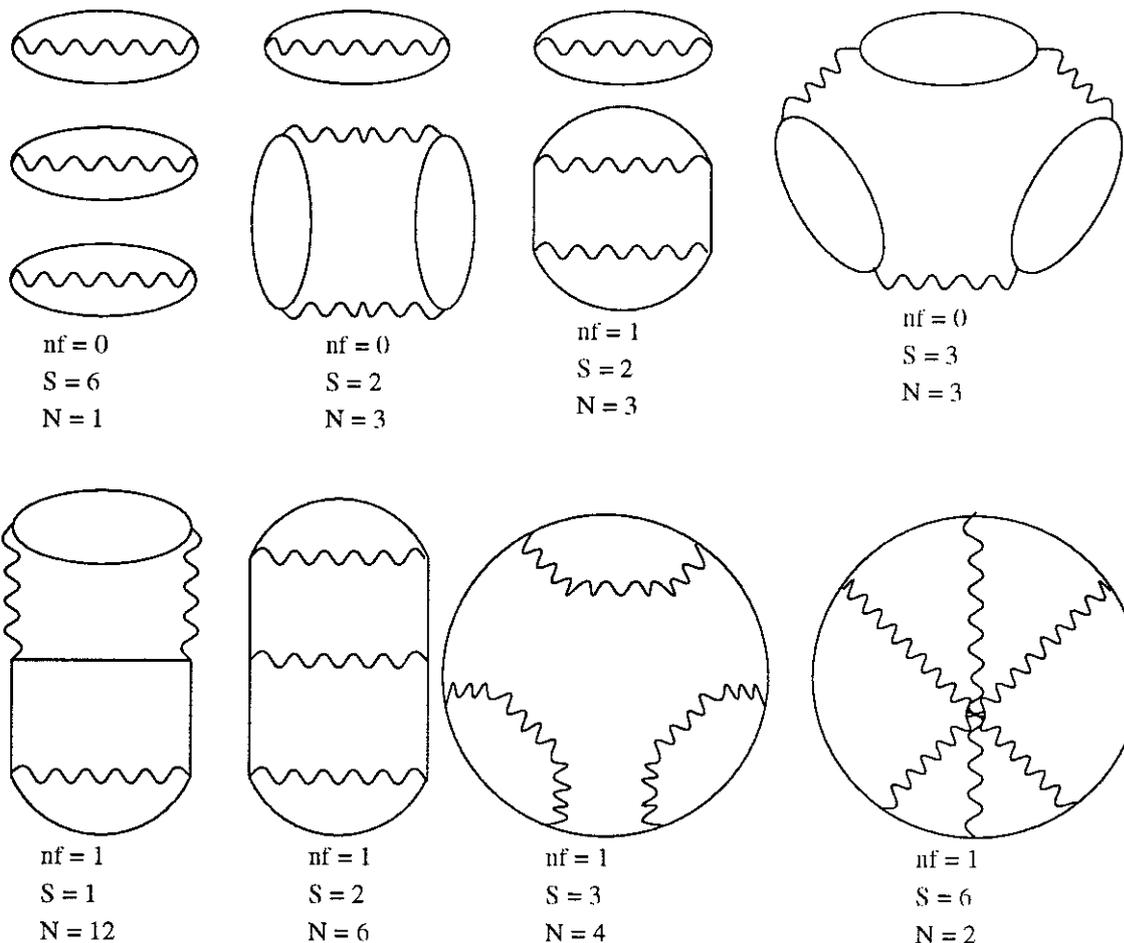


Figure B.7: Diagrammes pour $n = 6$.

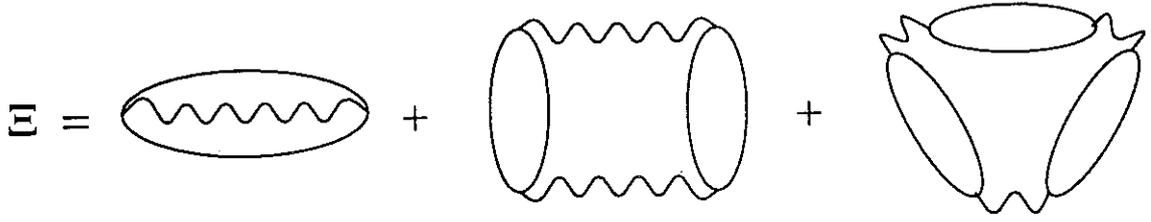


Figure B.8: Série de diagrammes pour le développement du potentiel Grand Canonique

bosons. Le premier diagramme ayant une boucle, le deuxième diagramme deux boucles, et ainsi de suite. Ces diagrammes sont invariants par permutation circulaire des labels de temps que l'on met sur les lignes de bosons, donc le facteur de symétrie vaut $S = n/2$. Toutes les lignes de fermions sont regroupées en paires de lignes équivalentes, donc $n_f = 0$. Le préfacteur pour chaque diagramme est alors simplement $2/n$ à l'ordre n .

$$\Xi = \Xi^0 \sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{2}{n} (\text{diagrammes}) \quad (\text{B.58})$$

pour le diagramme $n = 2$, on trouve la contribution S_2

$$\begin{aligned} S_2 &= \frac{g^2}{M} \sum_{k,q} \sum_{\bar{\mu},\bar{\nu}} \beta^2 B^0(q, \bar{\mu}) G^0(k, \bar{\nu}) G^0(-k + q, \bar{\mu} - \bar{\nu}) \\ &= -\sum_q \sum_{\bar{\mu}} \beta B^0(q, \bar{\mu}) \Sigma_B^0(q, \bar{\mu}) \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

pour le diagramme $n = 4$, on trouve la contribution $S_4 = [S_2]^2$ et de façon générale, la contribution à l'ordre $2n$ est $S_{2n} = [S_2]^n$. Si l'on pose $P = -S_2$, la série s'écrit

$$\begin{aligned} \Xi &= \Xi^0 \sum_{n=1}^{\infty} (-)^{2n} \frac{2}{2n} S_{2n} \\ &= \Xi^0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (-P)^n \\ &= -\Xi^0 L n(1 + P) \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

Cette série diverge pour $1 + P = 0$, soit

$$1 + \sum_q \sum_{\bar{\mu}} \beta B^0(q, \bar{\mu}) \Sigma_B^0(q, \bar{\mu}) = 0 \quad (\text{B.61})$$

C'est le critère de Thouless pour l'instabilité supra lorsqu'on ne garde que la partie $q = 0$ et $\bar{\mu} = 0$, c'est-à-dire le pôle des bosons.

Comme second exemple, nous considérons le potentiel de Ginzburg Landau obtenu en traitant les champs Φ et Φ^* comme des variables macroscopiques. Dans ce cas, on a directement des valeurs non nulles $\langle \Phi \rangle$ et $\langle \Phi^* \rangle$. Sur la figure B.9 on montre le développement diagrammatique jusqu'à l'ordre quatre. Il apparaît deux types de diagrammes que l'on note U_2 et U_4 avec deux et quatre lignes de bosons. On obtient alors le développement

$$\Xi = \Xi_0 \left[1 + U_2 + \frac{1}{2} U_2 U_2 + \frac{1}{2} U_4 \right] \quad (\text{B.62})$$

on reconnaît le développement de $\exp(U_2 + \frac{1}{2} U_4)$. En rajoutant le terme $E_0 |\Phi|^2$, on obtient alors l'énergie libre comme fonction de $|\Phi|^2$.

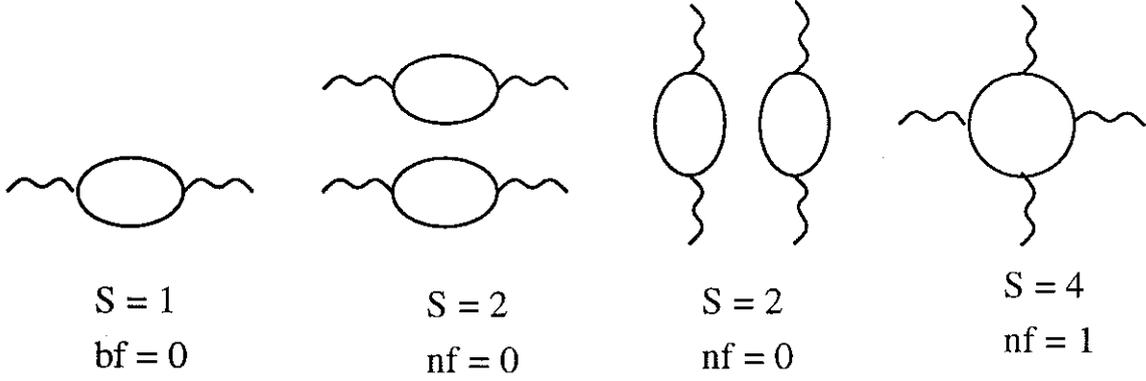


Figure B.9: Diagrammes pour le potentiel de Ginzburg Landau.

B.4.2 Variation du couplage

Dans la méthode de la variation du couplage, on écrit le hamiltonien sous la forme

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (\text{B.63})$$

où H_1 ne comporte plus la constante de couplage g alors que λ est une constante pouvant varier entre 0 et g , correspondant respectivement au système libre et au système en interaction. La fonction de partition Grand Canonique s'écrit alors

$$\Xi(T, \mu, \Omega, \lambda) = \text{Tr} e^{-\beta(H_0 + \lambda H_1)} \quad (\text{B.64})$$

La dérivée par rapport à λ donne alors

$$\frac{\partial \Xi}{\partial \lambda} = -\beta \Xi \langle H_1 \rangle \quad (\text{B.65})$$

soit encore en introduisant le potentiel Grand Canonique $J(T, \mu, \Omega, \lambda)$

$$\frac{\partial J}{\partial \lambda} = \langle H_1 \rangle \quad (\text{B.66})$$

En intégrant sur λ , on obtient alors la formule habituelle

$$J(T, \mu, \Omega) = J_0(T, \mu, \Omega) + \int_0^g d\lambda \frac{\langle \lambda H_1 \rangle}{\lambda} \quad (\text{B.67})$$

Pour calculer $\langle \lambda H_1 \rangle$, on remarque que

$$[b_q, H] = E_q b_q + \lambda \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k c_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow} \quad (\text{B.68})$$

et donc

$$\sum_q b_q^+ [b_q, H] = \sum_q E_q b_q^+ b_q + \lambda \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{k,q} b_q^+ c_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow} \quad (\text{B.69})$$

Cela permet d'obtenir la valeur de $\langle \lambda H_1 \rangle$ comme

$$\langle \lambda H_1 \rangle = \left\{ \sum_{\mathbf{q}} \langle b_{\mathbf{q}}^+ [b_{\mathbf{q}}, H] \rangle - \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}} \langle b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \rangle \right\} + hc \quad (\text{B.70})$$

La fonction de corrélation $\langle b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \rangle$ correspond au nombre de bosons dans l'état \mathbf{q} et s'obtient à partir de la fonction de Green des bosons à une particule. Pour obtenir l'autre fonction de corrélation statique, on définit une fonction de Green bosonique $L(q, \bar{\mu})$ par

$$L(q, \tau) = \langle T[[b_{\mathbf{q}}(\tau), H] b_{\mathbf{q}}^+] \rangle \quad (\text{B.71})$$

On définit de même sa fonction spectrale $A_L(q, \omega)$, ce qui permet d'écrire

$$L(q, \bar{\mu}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\beta} \frac{A_L(q, \omega)}{i\bar{\mu} + \omega} \quad (\text{B.72})$$

On obtient alors en fonction de cette fonction spectrale, et de celle de la fonction de Green à une particule des bosons, $A_B(q, \omega)$ la valeur moyenne de H_1

$$\langle \lambda H_1 \rangle = 2 \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) A_L(q, \omega) - 2 \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) E_{\mathbf{q}} A_B(q, \omega) \quad (\text{B.73})$$

où $n_B(x)$ est la distribution de Bose-Einstein. Pour obtenir la fonction spectrale A_L , il est loisible de considérer l'équation d'évolution pour la fonction de Green des bosons, $G_B(q, \tau) = \langle T[b_{\mathbf{q}}(\tau) b_{\mathbf{q}}^+] \rangle$:

$$\partial_{\tau} G_B(q, \tau) = \delta(\tau) + \langle T[[H, b_{\mathbf{q}}(\tau)] b_{\mathbf{q}}^+] \rangle \quad (\text{B.74})$$

On obtient ainsi la relation $G_B(q, \tau) = \delta(\tau) - L(q, \tau)$, soit encore, quand on passe en Matsubara

$$L(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} - i\bar{\mu} G_B(q, \bar{\mu}) \quad (\text{B.75})$$

Cette relation permet d'obtenir la fonction spectrale $A_L(q, \omega)$ comme

$$A_L(q, \omega) = \omega A_B(q, \omega) \quad (\text{B.76})$$

On obtient finalement l'expression de $\langle \lambda H_1 \rangle$

$$\langle \lambda H_1 \rangle = 2 \sum_{\mathbf{q}} \int \frac{d\omega}{2\pi} [\omega - E_{\mathbf{q}}] n_B(\omega) A_B(q, \omega) \quad (\text{B.77})$$

où le hamiltonien H qui permet de calculer A_B (au moins par perturbation) dépend de λ au lieu de g comme constante de couplage. Si $E_{\mathbf{q}}$ ne dépend pas de \mathbf{q} , on peut effectuer la somme sur \mathbf{q} afin de faire apparaître la densité d'états, à la place des fonctions spectrales.

L'évaluation du commutateur pour la fonction de Green $L(q, \tau)$ donne la règle de somme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_L(q, \omega) = E_0 \quad (\text{B.78})$$

Cette règle de somme permet alors de remplacer l'intégrale sur ω par une somme discrète sur les fréquences de Matsubara des bosons:

$$\langle \lambda H_1 \rangle = 2 \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\bar{\mu}} \Sigma_B(q, \bar{\mu}) G_B(q, \bar{\mu}) \quad (\text{B.79})$$

Appendice C

Calculs Numériques

Dans cet appendice, j'explique comment j'ai effectué mes calculs numériques pour les équations couplées des fonctions de Green des fermions et des bosons pour l'approximation diagrammatique ou pour l'approximation RPA. Pour les fonctions de Green, on a utilisé deux représentations: la représentation spectrale et la représentation en fréquences de Matsubara.

C.1 Représentation spectrale

Dans la représentation spectrale, on travaille avec les fonctions spectrales des fermions et des bosons $A_F(k, \omega)$ et $A_B(q, \omega)$. Le principe du calcul self-consistant est

initialisation On débute le calcul avec les fonctions spectrales des particules libres

$$A_F(k, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_k)$$

$$A_B(q, \omega) = 2\pi\delta(\omega - E_q)$$

début de la boucle à l'ordre n , on connaît les fonctions spectrales à l'ordre $n - 1$ au début de la boucle

1. on calcule les self-énergies des fermions et des bosons en utilisant les fonctions spectrales

$$\Sigma_F(k, \omega) = \frac{g^2}{M} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(-k + q, \omega_1) A_B(q, \omega_2) \frac{n_F(\omega_1) + n_B(\omega_2)}{\omega + \omega_1 - \omega_2 + i\eta}$$

$$\Sigma_B(q, \omega) = \frac{g^2}{M} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(-k + q, \omega_1) A_F(k, \omega_2) \frac{1 - n_F(\omega_1) - n_F(\omega_2)}{\omega - \omega_1 - \omega_2 + i\eta}$$

2. on calcule les nouvelles fonctions spectrales

$$A_F(k, \omega) = \frac{\Gamma_F(k, \omega)}{[\omega - \epsilon_k - R_F(k, \omega)]^2 + \frac{1}{4}\Gamma_F(k, \omega)^2}$$

$$A_B(q, \omega) = \frac{\Gamma_B(q, \omega)}{[\omega - E_q - R_B(q, \omega)]^2 + \frac{1}{4}\Gamma_B(q, \omega)^2}$$

fin de la boucle à l'ordre n , on connaît les fonctions spectrales à l'ordre n à la fin de la boucle. On calcule la densité d'états à une particule pour les fermions et les bosons $D_F(\omega)$ et $D_B(\omega)$ en sommant sur les fonctions spectrales. De même, on calcule les nombre d'occupation des fermions et des bosons n_k^F et n_q^B .

continuation tant que le système d'équations n'a pas convergé on retourne au début de la boucle.

terminaison Le système d'équations a convergé. On connaît toutes les fonctions spectrales et toutes les self-énergies.

Les densités d'états à une particule sont données par

$$D_F(\omega) = \frac{1}{M} \sum_k \frac{1}{2\pi} A_F(k, \omega) \quad (\text{C.1})$$

$$D_B(\omega) = \frac{1}{M} \sum_q \frac{1}{2\pi} A_B(q, \omega) \quad (\text{C.2})$$

et les nombres d'occupation sont donnés par

$$n_k^F = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_F(\omega) A_F(k, \omega) \quad (\text{C.3})$$

$$n_q^B = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) A_B(q, \omega) \quad (\text{C.4})$$

M est le nombre de vecteurs \vec{k} du réseau, $n_F(x)$ est la fonction de Fermi et $n_B(x)$ est la fonction de Bose.

$$n_F(x) = \frac{1}{e^{\beta x} + 1} \quad (\text{C.5})$$

$$n_B(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1} \quad (\text{C.6})$$

C.1.1 Somme sur les vecteurs \vec{k} et \vec{q} du réseau

Dans tous nos calculs self-consistants, on choisit de prendre un réseau cubique à d dimensions. Pour les fermions, on prend une relation de dispersion du type *liaisons fortes*

$$\epsilon_k = \frac{1}{4d} \left[2d - 2 \sum_{i=1}^d \cos k_i \right] - \mu \quad (\text{C.7})$$

on a choisit de prendre une bande d'énergie de largeur unité. Toutes les énergies et les températures dans les calculs numériques sont prises par rapport à cette largeur de bande. Les vecteurs \vec{k} appartiennent à la zone de Brillouin. Soit M_i le nombre de vecteurs \vec{k} dans la direction i tel que $M = \prod_{i=1}^d M_i$ alors les vecteurs k_i sont donnés par

$$k_i = \frac{2\pi}{M_i} \nu_i \quad \text{avec } \nu_i = 1 \text{ à } M_i \quad (\text{C.8})$$

On choisit de prendre un nombre impair $M_i = kpoints$. On pose

$$k_i = -kfin \text{ à } +kfin \quad (C.9)$$

$$kpoints = 2kfin + 1 \quad (C.10)$$

Ce choix est dicté par la représentation en tableaux. Pour un réseau à une dimension, une grandeur $X(k)$ est représentée par un tableau avec $kpoints$ cases. Les éléments de ce tableau vont de $X[0]$ à $X[kpoints - 1]$. On a la correspondance

$$\begin{aligned} X(k) &\rightarrow X[kfin + k] \\ X(k = -kfin) &\rightarrow X[0] \\ X(k = 0) &\rightarrow X[kfin] \\ X(k = kfin) &\rightarrow X[2kfin] = X[kpoints - 1] \end{aligned} \quad (C.11)$$

Toutes les grandeurs $X(k)$ ont la symétrie des ϵ_k c'est-à-dire $X(-k) = X(k)$ et $X(k+K) = X(k)$ où K est un vecteur du réseau réciproque. A une dimension, la somme

$$Z_q = \frac{1}{M} \sum_k X_k Y_{-k+q} \quad (C.12)$$

s'écrit

$$Z[kfin + qx] = \frac{1}{kpoints} \sum_{kx=-kfin}^{kx=kfin} X[kfin + kx] Y[kfin + kqx] \quad (C.13)$$

avec

$$\begin{aligned} kqx &= -kx + qx + kpoints && \text{si } -kx + qx < -kfin \\ &= -kx + qx - kpoints && \text{si } -kx + qx > kfin \\ &= -kx + qx && \text{sinon} \end{aligned} \quad (C.14)$$

Compte tenu de la symétrie $X(-k) = X(k)$, on peut ne calculer qu'une partie de la zone de Brillouin ($\simeq \frac{1}{2}$), puis on complète par symétrie. Pour l'exemple précédent, mais à deux dimensions, on calcule $Z[kfin + qx][kfin + qy]$ pour qx allant de 0 à $kfin$ et qy allant de 0 à $kfin$, puis on complète

$$\begin{aligned} Z[kfin + qx][kfin - qy] &= Z[kfin + qx][kfin + qy] \\ Z[kfin - qx][kfin + qy] &= Z[kfin + qx][kfin + qy] \\ Z[kfin - qx][kfin - qy] &= Z[kfin + qx][kfin + qy] \end{aligned} \quad (C.15)$$

où les indices qx et qy vont de 0 à $kfin$. C'est de cette façon que l'on procède pour effectuer la somme sur \vec{k} dans le calcul des self-énergies. On gagne un facteur $\simeq 2^d$ en temps de calcul en utilisant la symétrie $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$.

C.1.2 Somme sur l'énergie ω

Pour représenter les grandeurs de la forme $X(\omega)$, on choisit un intervalle symétrique par rapport à l'origine $\omega \in [-\omega_{max}; +\omega_{max}]$. On discrétise en prenant ω_{points} qui est un nombre impair. On

représente la grandeur par un tableau dont les éléments sont $X[n]$, n allant de 0 à $\omega_{points} - 1$.

On pose

$$n = -\omega_{fin} \text{ à } +\omega_{fin} \quad (\text{C.16})$$

$$\omega_{points} = 2\omega_{fin} + 1 \quad (\text{C.17})$$

on définit le pas, ou résolution en énergie par

$$pas = \frac{2\omega_{max}}{\omega_{points}} \quad (\text{C.18})$$

On a la correspondance

$$\begin{aligned} \omega = n \times pas &\rightarrow n \\ X(\omega) &\rightarrow X[w_{fin} + n] \\ X(\omega = -\omega_{max}) &\rightarrow X[0] \\ X(\omega = 0) &\rightarrow X[w_{fin}] \\ X(\omega = +\omega_{max}) &\rightarrow X[2w_{fin}] = X[\omega_{points} - 1] \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

On considère la somme

$$Z(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' X(\omega') Y(\omega + \omega') \quad (\text{C.20})$$

la somme correspondante est

$$Z[w_{fin} + n] = pas \times \sum_{m=min}^{m=max} X[w_{fin} + m] Y[w_{fin} + m + n] \quad (\text{C.21})$$

avec

$$\begin{aligned} min &= max \{-w_{fin}, -w_{fin} - n\} \\ max &= min \{+w_{fin}, +w_{fin} - n\} \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

On utilise cette somme pour évaluer la partie imaginaire de la self-énergie.

le problème du résidu η . Les formules analytiques que l'on obtient font apparaître un résidu η que l'on fait tendre vers zéro. Par exemple, la fonction de Green retardée pour une particule libre est

$$\begin{aligned} G(k, \omega) &= \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} \\ &= PP \frac{1}{\omega - \epsilon_k} - i\pi\delta(\omega - \epsilon_k) \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

qui donne $A(k, \omega) = -2 \text{Im} G(k, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_k)$. Quand on a un pas fini en énergie, il faut conserver la valeur de η finie. On a alors

$$\begin{aligned} G(k, \omega) &= \frac{1}{\omega - \epsilon_k + i\eta} \\ &= \frac{\omega - \epsilon_k - i\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2} \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

On redéfinit le résidu $\eta \rightarrow \eta/2$ pour obtenir

$$A(k, \omega) = \frac{\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \frac{1}{4}\eta^2} \quad (\text{C.25})$$

La fonction spectrale devient une lorentzienne de largeur η . Pour bien représenter numériquement cette fonction spectrale, il faut avoir beaucoup de points ω à l'intérieur de la lorentzienne, c'est-à-dire $pas \ll \eta$. En pratique, pour $pas = \eta$, on obtient des résultats acceptables. La somme sur l'énergie qui intervient dans le calcul de la self-énergie des fermions est

$$\Sigma(\omega) = \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} A_F(\omega_1) A_B(\omega_2) \frac{n_F(\omega_1) + n_B(\omega_2)}{\omega + \omega_1 - \omega_2 + i\eta} \quad (C.26)$$

On calcule donc

$$\Gamma[wf in + n] = \frac{pas}{2\pi} \times \frac{pas}{2\pi} \times \sum_{m_1=-wf in}^{m_1=+wf in} \sum_{m_2=-wf in}^{m_2=+wf in} A_F[wf in + m_1] A_B[wf in + m_2] [n_F(\omega_1) + n_B(\omega_2)] \times \quad (C.27)$$

$$\times \frac{\eta}{(\omega + \omega_1 - \omega_2)^2 + \frac{1}{4}\eta^2}$$

$$R[wf in + n] = \frac{pas}{2\pi} \times \frac{pas}{2\pi} \times \sum_{m_1=-wf in}^{m_1=+wf in} \sum_{m_2=-wf in}^{m_2=+wf in} A_F[wf in + m_1] A_B[wf in + m_2] [n_F(\omega_1) + n_B(\omega_2)] \times \quad (C.28)$$

$$\times \frac{\omega + \omega_1 - \omega_2}{(\omega + \omega_1 - \omega_2)^2 + \frac{1}{4}\eta^2}$$

avec $\omega = n \times pas$ et $\omega_{1,2} = m_{1,2} \times pas$. Un autre problème qui vient des résidus, vient de la fonction spectrale $A(k, \omega)$

$$A(k, \omega) = \frac{\Gamma(k, \omega)}{[\omega - \epsilon_k - R(k, \omega)]^2 + \frac{1}{4}\Gamma(k, \omega)^2} \quad (C.29)$$

Si $\Gamma(k, \omega)$ est identiquement nulle, alors on obtient $A(k, \omega) = 0$ au lieu d'obtenir une fonction delta comme le fait la continuité analytique. Il faut donc remédier à cela et rajouter le résidu η à la main à $\Gamma(k, \omega)$. Pour les fermions, $\Gamma_F(k, \omega)$ est toujours positive, alors que pour les bosons, $\Gamma_B(q, \omega)$ est du même signe que ω . Donc après avoir calculé $\Gamma_F(k, \omega)$ et $\Gamma_B(q, \omega)$, on fait la transformation

$$\Gamma_F(k, \omega) \rightarrow \Gamma_F(k, \omega) + \eta \quad (C.30)$$

$$\Gamma_B(q, \omega) \rightarrow \Gamma_B(q, \omega) + \eta \times \text{sign}(\omega)$$

où $\text{sign}(x)$ est la fonction signe de x et qui vaut zéro si x vaut zéro.

Calcul pratiques. Dans la pratique, les temps de calculs sont longs. On peut difficilement prendre beaucoup de vecteurs \vec{k} pour avoir une densité d'états acceptable et assez de points en énergie pour avoir une bonne résolution. La première solution est d'intégrer la fonction delta dans l'expression des self-énergies Σ_F et Σ_B , c'est-à-dire prendre la limite $\eta \rightarrow 0$. On obtient alors

$$\Gamma_F(k, \omega) = \frac{g^2}{M} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} A_F(-k + q, x) A_B(q, \omega + x) [n_F(x) + n_B(\omega + x)] \quad (C.31)$$

$$\Gamma_B(q, \omega) = \frac{g^2}{M} \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} A_F(-k+q, x) A_F(k, \omega-x) [1 - n_F(x) - n_F(\omega-x)] \quad (\text{C.32})$$

On gagne ainsi une intégration sur l'énergie. Les parties réelles des self-énergies, sont alors obtenues par transformées de Hilbert

$$R_F(k, \omega) = PP \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\Gamma_F(k, x)}{\omega - x} \quad (\text{C.33})$$

$$R_B(q, \omega) = PP \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\Gamma_B(q, x)}{\omega - x} \quad (\text{C.34})$$

Dans le cas discret, la partie principale PP , dans ces expressions, consiste à prendre $\omega \neq x$. Par exemple

$$R_F[wfin + n] = \frac{pas}{2\pi} \sum_{\substack{m = +wfin \\ m \neq n}}^{m = +wfin} \frac{\Gamma_F[wfin + m]}{\omega[wfin + n] - \omega[wfin + m]} \quad (\text{C.35})$$

La deuxième solution pour gagner du temps est de rajouter des points à la fin du calcul, pour calculer la densité d'états $D(\omega)$ et les nombres d'occupation n_k . Pour chaque valeur de \vec{k} , on fait correspondre $2kint + 1$ points par direction centrés autour de \vec{k} . On garde pour tous ces points, la valeur de $\Gamma(k, \omega)$ et de $R(k, \omega)$, mais on change la valeur de ϵ_k . De même pour le nombre de points en énergie où à chaque point on fait correspondre $2wint + 1$ points centrés sur la valeur de ω . On peut avec cette astuce obtenir des densités d'états plus lisses (plus de vecteurs k) et des nombres d'occupation plus lisses (plus de points sur l'axe des énergies).

C.2 Représentation en Matsubara

Le principe du calcul self-consistant est

initialisation On débute le calcul avec les fonctions de Green des particules libres

$$G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k}$$

$$B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + E_0}$$

début de la boucle à l'ordre n , on connaît les fonctions de Green à l'ordre $n - 1$ au début de la boucle

1. on calcule les self-énergies des fermions et des bosons en utilisant les fonctions de Green

$$\Sigma_F(k, \bar{\nu}) = \frac{g^2}{M} \sum_q \beta \sum_{\bar{\nu}'} G(-k+q, \bar{\nu}') B(q, \bar{\nu} + \bar{\nu}')$$

$$\Sigma_B(q, \bar{\mu}) = -\frac{g^2}{M} \sum_k \beta \sum_{\bar{\nu}} G(-k+q, \bar{\mu} - \bar{\nu}) G(k, \bar{\nu})$$

2. on calcule les nouvelles fonctions de Green

$$G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k + \Sigma_F(k, \bar{\nu})}$$

$$B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + E_0 + \Sigma_B(q, \bar{\mu})}$$

fin de la boucle à l'ordre n , on connaît les fonctions de Green à l'ordre n à la fin de la boucle.

On calcule les nombres d'occupation des fermions et des bosons n_k^F et n_q^B en sommant sur les fonctions de Green.

continuation tant que le système d'équations n'a pas convergé, on retourne au début de la boucle.

terminaison Le système d'équations a convergé. On connaît toutes les fonctions spectrales et toutes les self-énergies.

C.2.1 Représentation

Les fréquences de Matsubara sont

$$i\bar{\nu} = i\frac{2\pi}{\beta}(2n+1) \quad \text{pour les fermions} \tag{C.36}$$

$$i\bar{\mu} = i\frac{2\pi}{\beta}(2n) \quad \text{pour les bosons}$$

Pour des raisons de symétrie il faut prendre un nombre pair de fréquences de Matsubara pour les fermions et un nombre impair de fréquences de Matsubara pour les bosons. Pour le voir, écrivons les fonctions de Green en séparant la partie réelle et imaginaire, par exemple

$$G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_F(k, \omega)}{i\bar{\nu} + \omega} = \frac{1}{\beta} \int \frac{d\omega}{2\pi} A_F(k, \omega) \left(\frac{\omega}{\omega^2 + \bar{\nu}^2} - i \frac{\bar{\nu}}{\omega^2 + \bar{\nu}^2} \right) \tag{C.37}$$

$$B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A_B(q, \omega)}{i\bar{\mu} + \omega} = \frac{1}{\beta} \int \frac{d\omega}{2\pi} A_B(q, \omega) \left(\frac{\omega}{\omega^2 + \bar{\mu}^2} - i \frac{\bar{\mu}}{\omega^2 + \bar{\mu}^2} \right) \tag{C.38}$$

La partie réelle de la fonction de Green est paire, alors que la partie imaginaire est impaire. On doit donc avoir

$$\sum_{\bar{\nu}} \text{Im} G(k, \bar{\nu}) = \sum_{\bar{\mu}} \text{Im} B(q, \bar{\mu}) = 0 \tag{C.39}$$

$$\sum_{\bar{\nu}} \text{Re} G(k, \bar{\nu}) = 2 \sum_{\bar{\nu}>0} \text{Re} G(k, \bar{\nu}) \tag{C.40}$$

$$\sum_{\bar{\mu}} \text{Re} B(q, \bar{\mu}) = B(q, 0) + 2 \sum_{\bar{\mu}>0} \text{Re} B(q, \bar{\mu}) \tag{C.41}$$

On conserve ces relations en choisissant un nombre pair de fréquences pour les fermions et un nombre impair de fréquences pour les bosons, ces fréquences étant prises de façon symétrique

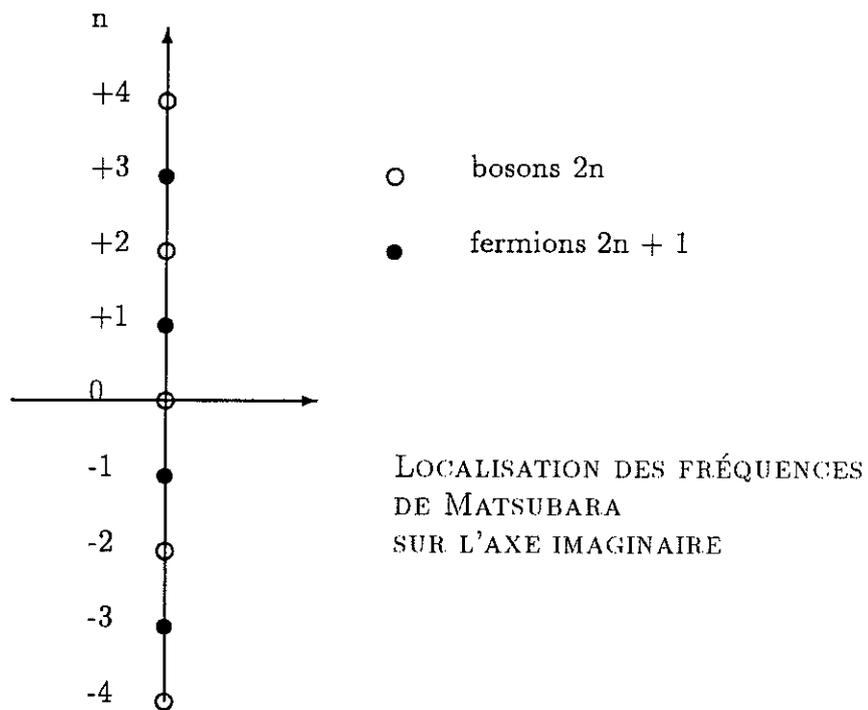


Figure C.1: Localisation des fréquences de Matsubara sur l'axe imaginaire

par rapport à l'origine et à partir de l'origine, car on prend un nombre fini de fréquences. On définit n_{fin} tel que

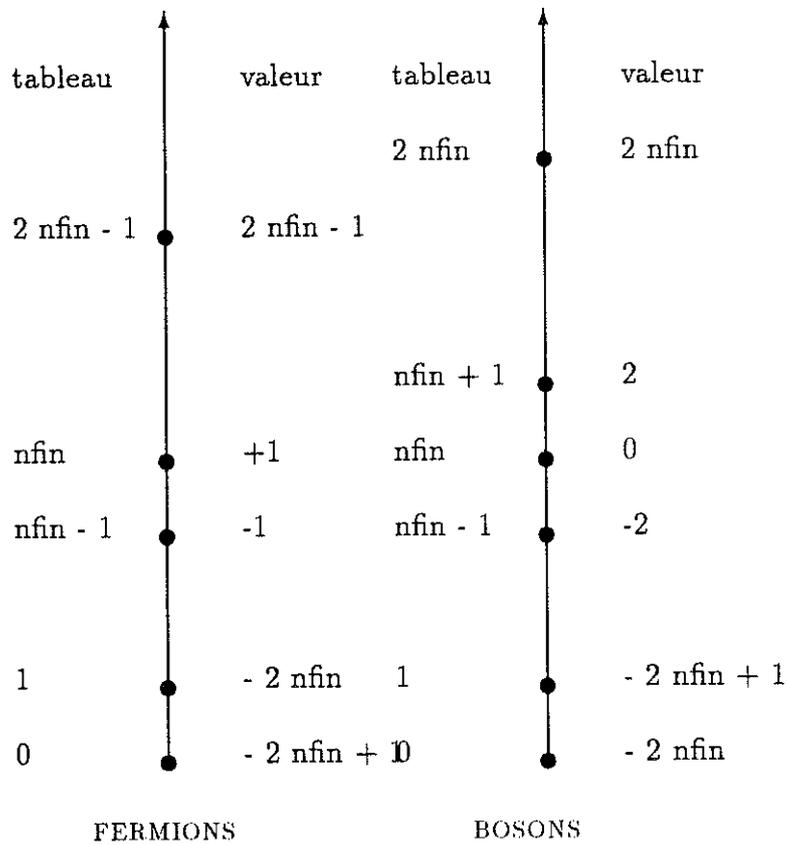
$$\bar{\mu} \text{ va de } \frac{2\pi}{2\beta}(-2n_{fin}) \quad \text{à} \quad \frac{2\pi}{2\beta}(2n_{fin}) \quad (C.42)$$

$$\bar{\nu} \text{ va de } \frac{2\pi}{2\beta}(-2n_{fin} + 1) \quad \text{à} \quad \frac{2\pi}{2\beta}(2n_{fin} - 1)$$

Il y a $2n_{fin} + 1$ fréquences de bosons et $2n_{fin}$ fréquences de fermions. On représente une grandeur $X(\bar{\nu}, \bar{\mu})$ par un tableau d'éléments $X[n]$. Les indices des tableaux commencent à zéro. On a la correspondance

$$G(2n + 1) \rightarrow G[n_{fin} + n] \quad n \text{ va de } -n_{fin} \text{ à } n_{fin} - 1 \quad (C.43)$$

$$B(2n) \rightarrow B[n_{fin} + n] \quad n \text{ va de } -n_{fin} \text{ à } n_{fin}$$



Par exemple, la correspondance pour les fonctions de Green à l'ordre zéro est

$$G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k} \rightarrow G[n] = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\frac{2\pi}{2\beta}(2n+1) + \epsilon_k} \quad (C.44)$$

$$B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + E_0} \rightarrow B[n] = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\frac{2\pi}{2\beta}(2n) + E_0}$$

Les sommes sur les fréquences de Matsubara sont

$$\beta \sum_{\bar{\nu}} G(\bar{\nu}) = \beta \sum_{n=-nfin}^{n=nfin-1} G[n] \quad (C.45)$$

$$\beta \sum_{\bar{\mu}} B(\bar{\mu}) = \beta \sum_{n=-nfin}^{n=nfin} B[n] \quad (C.46)$$

C.2.2 Calcul des sommes

Pour la self-énergie des fermions, il faut évaluer la somme

$$\Sigma_F(\bar{\nu}) = \beta \sum_{\bar{\nu}'} G(\bar{\nu}') B(\bar{\mu} = \bar{\nu} + \bar{\nu}') \quad (C.47)$$

on pose

$$\begin{aligned} \bar{\nu} &= 2n + 1 \\ \bar{\nu}' &= 2n' + 1 \\ \bar{\nu} + \bar{\nu}' &= 2(n + n') + 2 \end{aligned} \quad (C.48)$$

la correspondance en tableau est

	$\bar{\nu}$	$\bar{\nu}'$	$\bar{\mu} = \bar{\nu} + \bar{\nu}'$	
entier	$2n + 1$	$2n' + 1$	$2(n + n') + 2$	(C.49)
tableau	n	n'	$n + n' + 1$	

on a la condition que $n + n' + 1$ soit compris entre $-nfin$ et $nfin$. On obtient alors

$$\Sigma_F[nfin + n] = \beta \sum_{m=min}^{max} G[nfin + m] B[nfin + n + m + 1] \quad (C.50)$$

avec

$$\begin{aligned} min &= max\{-nfin, -nfin - n - 1\} \\ max &= min\{nfin - 1, nfin - n - 1\} \end{aligned} \quad (C.51)$$

Pour la self-énergie des bosons, il faut calculer la somme

$$\Sigma_B(\bar{\mu}) = \beta \sum_{\bar{\nu}} G(\bar{\nu}) G(\bar{\mu} - \bar{\nu}) \quad (C.52)$$

La correspondance entier-tableau est

	$\bar{\mu}$	$\bar{\mu} - \bar{\nu}$	$\bar{\nu}$	
entier	$2n$	$2(n - m) - 1$	$2m + 1$	(C.53)
tableau	n	$(n - m) - 1$	m	

si l'on tient compte des restrictions sur les indices des tableaux, on obtient

$$\Sigma_B[nfin + n] = \beta \sum_{m=min}^{max} G[nfin + m] G[nfin + n - m - 1] \quad (C.54)$$

avec

$$\min = \max\{-n\text{fin}, -n\text{fin} + n\} \quad (\text{C.55})$$

$$\max = \min\{n\text{fin} - 1, n\text{fin} + n - 1\}$$

On sait alors comment effectuer des sommes avec des tableaux de tailles finies. Les fonctions de Green et les self-énergies sont des fonctions complexes. On décompose en partie réelle et partie imaginaire

$$G(k, \bar{\nu}) = G^R(k, \bar{\nu}) + iG^I(k, \bar{\nu}) \quad (\text{C.56})$$

$$\Sigma_F(k, \bar{\nu}) = \Sigma_F^R(k, \bar{\nu}) + i\Sigma_F^I(k, \bar{\nu}) \quad (\text{C.57})$$

La fonction de Green

$$G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \epsilon_k + \Sigma_F(k, \bar{\nu})} \quad (\text{C.58})$$

s'écrit alors

$$G(k, \bar{\nu}) = G^R(k, \bar{\nu}) + iG^I(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \frac{\epsilon_k + \Sigma_F^R(k, \bar{\nu}) - i[\bar{\nu} + \Sigma_F^I(k, \bar{\nu})]}{[\bar{\nu} + \Sigma_F^I(k, \bar{\nu})]^2 + [\epsilon_k + \Sigma_F^R(k, \bar{\nu})]^2} \quad (\text{C.59})$$

de même pour la fonction de Green des bosons. Pour effectuer les produits de fonction de Green qui interviennent dans le calcul des self-énergies, il faut donc séparer partie réelle et partie imaginaire, les fréquences de Matsubara $i\bar{\nu}$ et $i\bar{\mu}$ étant imaginaires pures.

Calcul des nombres d'occupation. Une des quantités faciles à obtenir à partir des fonctions de Green en représentation de Matsubara est le nombre d'occupation. Le résultat est simplement

$$n_q^B = -\frac{1}{2} + \sum_{\bar{\mu}} B(q, \bar{\mu}) \quad (\text{C.60})$$

$$n_k^F = +\frac{1}{2} - \sum_{\bar{\nu}} G(k, \bar{\nu}) \quad (\text{C.61})$$

Dans les lignes qui suivent, on montre comment on peut obtenir ces résultats. Pour les bosons, on évalue

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{\mu}} \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\mu} + \omega} &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{T}{i\frac{2\pi}{2\beta} 2n + \omega} \\ &= \frac{T}{\omega} + 2 \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\omega}{4T} \frac{1}{(\frac{\omega}{2T})^2 + \pi^2 n^2} \end{aligned} \quad (\text{C.62})$$

On utilise la formule 4.3.91 de Abramowitz et Stegun [1] à la page 75, on a

$$\cotg z = \frac{1}{z} + 2z \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{z^2 - k^2 \pi^2} \quad (\text{C.63})$$

en utilisant $\cotanh z = i \cotg z$ on obtient

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\mu}} \frac{1}{i\bar{\mu} + \omega} = \frac{1}{2} \cotanh \frac{1}{2} \beta \omega \quad (\text{C.64})$$

puis, en utilisant le fait que la fonction de Bose s'écrit

$$n_B(\omega) = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cotanh \frac{1}{2} \beta \omega \quad (\text{C.65})$$

et que le nombre d'occupation est donné par

$$n_q^B = \langle b_q^+ b_q \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} n_B(\omega) A_B(q, \omega) \quad (\text{C.66})$$

et que l'on a la règle de somme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_B(q, \omega) = 1 \quad (\text{C.67})$$

on trouve le résultat recherché.

Pour les fermions, on fait la même démarche. Il suffit de montrer que

$$\sum_{\bar{\nu}} \frac{1}{\beta} \frac{1}{i\bar{\nu} + \omega} = \frac{1}{2} \tanh \frac{1}{2} \beta \omega \quad (\text{C.68})$$

Pour cela, on peut écrire

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\nu}} \frac{1}{i\bar{\nu} + \omega} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{T}{i\frac{2\pi}{\beta}(2n+1) + \omega} \end{aligned} \quad (\text{C.69})$$

on pose $z = \beta\omega/2$

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z}{(n + 1/2)^2 \pi^2 + z^2} \quad (\text{C.70})$$

puis,

$$\begin{aligned} 2S &= \frac{d}{dz} \sum_{n=0}^{\infty} \text{Ln} [z^2 + \pi^2(n + 1/2)^2] \\ &= \frac{d}{dz} \text{Ln} \left[\prod_{n=0}^{\infty} \left(1 + \frac{z^2}{\pi^2(n+1/2)^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.71})$$

On utilise la formule 4.5.69 page 85 de Abramowitz et Stegun:

$$\cosh z = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{4z^2}{(2k-1)^2 \pi^2} \right) \quad (\text{C.72})$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} 2S &= \frac{d}{dz} \text{Ln} \cosh z \\ &= \tanh z \end{aligned} \quad (\text{C.73})$$

ce qui donne le résultat recherché. Une façon beaucoup plus élégante de démontrer les deux relations est d'utiliser les propriétés des séries de Fourier. Pour les fermions, on a posé

$$G(k, \sigma) = \sum_{\bar{\nu}} e^{i\bar{\nu}\sigma} G(k, \bar{\nu}) \quad (\text{C.74})$$

pour $\sigma = 0$, on obtient donc

$$G(k, 0) = \sum_{\bar{\nu}} G(k, \bar{\nu}) \quad (\text{C.75})$$

or $G(k, \sigma)$ est une fonction de σ qui est discontinue en $\sigma = 0$. La limite que l'on obtient en sommant sur les fréquences discrètes est

$$\frac{1}{2}[G(k, 0^+) + G(k, 0^-)] \quad (\text{C.76})$$

comme la fonction de Green est $G(k, \sigma) = \langle T[c_k(\sigma)c_k^+] \rangle$ on obtient que $G(k, 0^+) = 1 - n_k$ et que $G(k, 0^-) = -n_k$, donc

$$\sum_{\bar{\nu}} G(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{2} - n_k \quad (\text{C.77})$$

c'est le résultat recherché. Pour les bosons, la fonction de Green est $B(q, \sigma) = \langle T[b_q(\sigma)b_q^+] \rangle$. On obtient $B(q, 0^+) = 1 + n_q$ et $B(q, 0^-) = n_q$, ce qui donne

$$\sum_{\bar{\mu}} B(q, \bar{\mu}) = \frac{1}{2} + n_q \quad (\text{C.78})$$



Appendice D

Formule de Kubo pour la Conductivité

Dans cet appendice, nous dérivons brièvement les expressions utilisées pour le calcul de la conductivité $\sigma(\omega)$. Nous suivons le raisonnement du livre de Mahan [20].

D.1 Courant électrique

Nous commençons par dériver l'expression du courant électrique pour le modèle de fermions sur un réseau dans l'approximation des liaisons fortes. Le hamiltonien du système en présence d'un champ e.m s'écrit

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{j\delta\sigma} c_{j+\delta,\sigma}^+ e^{i\frac{e}{\hbar} \int_{R_j}^{R_{j+\delta}} d\vec{r} \vec{A}(\vec{r})} c_{j,\sigma} + \sum_{j\sigma} e A_0(R_j) c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} + (zt - \mu) \sum_{j\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} \\
 & + E_0 \sum_j b_j^\dagger b_j + \sum_j 2e A_0(R_j) b_j^\dagger b_j \\
 & + g \sum_j (b_j^\dagger c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + hc) \tag{D.1}
 \end{aligned}$$

Le hamiltonien est invariant par la transformation de jauge

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda \quad , \quad A_0 \rightarrow A_0 - \partial_t \Lambda \tag{D.2}$$

et

$$c_{j\sigma} \rightarrow c_{j\sigma} e^{i\frac{e}{\hbar} \Lambda_j} \quad , \quad b_j \rightarrow b_j e^{2i\frac{e}{\hbar} \Lambda_j} \tag{D.3}$$

Pour le calcul de $\sigma(\omega)$, on peut se contenter de prendre

$$\begin{cases} A_0 = 0 \\ \vec{A} = -\frac{i}{\omega} \vec{E} = -\frac{i}{\omega} \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \end{cases} \tag{D.4}$$

Lorsque le potentiel vecteur \vec{A} ne dépend pas de la position, on obtient

$$\int_{R_j}^{R_j+\delta} d\vec{r} \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{\delta} \quad (\text{D.5})$$

Le terme supplémentaire qui apparaît dans le hamiltonien lorsque l'on développe l'exponentielle est $\delta H = -\vec{j} \cdot \vec{A}$. On obtient l'expression du courant

$$\vec{j} = i \frac{et}{\hbar} \sum_{j\delta} \vec{\delta} c_{j+\delta\sigma}^+ c_{j\sigma} \quad (\text{D.6})$$

En fonction des opérateurs $c_{k\sigma}$, on obtient

$$\vec{j} = \frac{2eta}{\hbar} \sum_{k\sigma} [\vec{e}_x \sin(k_x a) + \vec{e}_y \sin(k_y a) + \dots] c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad (\text{D.7})$$

\vec{j} est le courant total du modèle Boson-Fermion.

D.2 Théorie de la réponse linéaire

Nous redérivons rapidement la formule de Kubo. On définit la matrice densité $\rho(t)$ par

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \quad (\text{D.8})$$

où $|\Psi(t)\rangle$ est l'état propre du système qui vérifie l'équation de Schrodinger $i\hbar\partial_t|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$. On en déduit l'équation d'évolution pour la matrice densité:

$$i\hbar\partial_t \rho(t) = [H(t), \rho(t)] \quad (\text{D.9})$$

Dans le cas d'une distribution (ensemble Grand Canonique), les équations sont identiques. La matrice densité est alors définie par

$$\rho(t) = \sum_m |\Psi_m(t)\rangle P_m \langle \Psi_m(t)| \quad (\text{D.10})$$

avec $\sum P_m = 1$. Dans la théorie de la réponse linéaire, on s'intéresse à une petite perturbation du système que l'on note $V(t)$. On note le hamiltonien $H(t) = H_0 + V(t)$, avec $V(t = -\infty) = 0$. H_0 est le hamiltonien total du système qui comprend le terme d'interaction. La matrice densité s'écrit $\rho(t) = \rho_0 + \mu(t)$ avec $\mu(t = -\infty) = 0$. On obtient l'équation d'évolution pour $\mu(t)$:

$$i\hbar\partial_t \mu(t) = [H_0, \mu(t)] + [V(t), \rho_0] + 0(\mu^2) \quad (\text{D.11})$$

On définit une représentation interaction (par rapport à la perturbation dépendante du temps $V(t)$) par

$$\mu_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \mu(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \quad (\text{D.12})$$

et

$$V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \quad (\text{D.13})$$

Dans cette représentation, l'équation d'évolution pour l'opérateur $\mu(t)$ donne

$$i\hbar\partial_t \mu(t) = [H_0, \mu(t)] + e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} i\hbar\partial_t \mu_I(t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \quad (D.14)$$

Par comparaison avec l'équation (D.11) on en déduit

$$i\hbar\partial_t \mu_I(t) = [V_I(t), \rho_0] \quad (D.15)$$

Il reste alors à intégrer en utilisant les conditions aux limites pour obtenir l'expression de $\mu(t)$:

$$\mu_I(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [V_I(t'), \rho_0] \quad (D.16)$$

puis

$$\mu(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [V_I(t' - t), \rho_0] \quad (D.17)$$

La valeur moyenne d'un opérateur A est alors $\langle A(t) \rangle = Tr[A\rho(t)]$. On obtient

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle A \rangle_0 + Tr[A\mu(t)] \\ &= \langle A \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' Tr[A[V_I(t - t'), \rho_0]] \\ &= \langle A \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' Tr[\rho_0[A, V_I(t - t')]] \\ &= \langle A \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [A_I(t), V_I(t')] \rangle_0 \end{aligned} \quad (D.18)$$

Du fait que H_0 correspond au hamiltonien total du système, la représentation interaction que l'on a introduite s'identifie à la représentation de Heisenberg habituelle. On peut donc oublier les indices 0 et I pour obtenir la formule de Kubo:

$$\langle A(t) \rangle = \langle A \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [A(t), V(t')] \rangle \quad (D.19)$$

D.3 Formule de Kubo pour la conductivité

Nous appliquons la théorie de la réponse linéaire à la conductivité définie par $j_\alpha = \sigma_{\alpha\beta} E_\beta$ qui est induite par la perturbation δH :

$$\delta H = \vec{j} \cdot \vec{E}_0 \frac{i}{\omega} e^{-i\omega t} \quad (D.20)$$

En utilisant la formule de Kubo de la théorie de la réponse linéaire, on obtient

$$\langle j_\alpha \rangle = E_{0\beta} \frac{1}{\hbar \omega} \int_{-\infty}^t dt' \langle [j_\alpha(t), j_\beta(t')] \rangle e^{-i\omega t'} \quad (D.21)$$

en changeant la variable d'intégration, on obtient

$$\langle j_\alpha \rangle = E_{0\beta} e^{-i\omega t} \frac{1}{\hbar \omega} \int_0^\infty dt' \langle [j_\alpha(t'), j_\beta(0)] \rangle e^{i\omega t'} \quad (D.22)$$

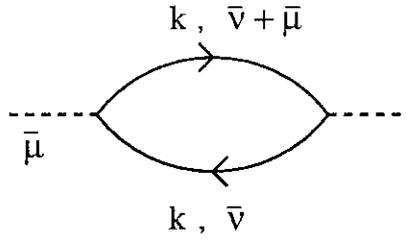


Figure D.1: Diagramme pour la conductivité à l'ordre zéro

Il est alors loisible de définir une fonction de Green retardée pour les courants:

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(t) = \frac{\theta(t)}{i\hbar} \langle [j_\alpha(t), j_\beta(0)] \rangle \quad (\text{D.23})$$

On obtient alors

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{i}{\omega} \Pi_{\alpha\beta}^R(\omega) \quad (\text{D.24})$$

On note $\lambda(\omega)$ la fonction spectrale de cette fonction de Green. On a la relation

$$\Pi_{\alpha\beta}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\lambda_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} \quad (\text{D.25})$$

En utilisant le fait que la conductivité est réelle et que l'on a la relation $\lambda = -2Im \Pi^R$, on obtient

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{2\omega} \lambda_{\alpha\beta}(\omega) \quad (\text{D.26})$$

D.4 Calcul à l'ordre zéro

Nous calculons la fonction de Green $\Pi_{\alpha\beta}$ en négligeant les corrections de vertex, c'est à dire à l'ordre zéro de la théorie des perturbations. Dans le formalisme en température, on définit

$$\Pi_{\alpha\beta}(\tau) = \langle T[j_\alpha(\tau) j_\beta] \rangle \quad (\text{D.27})$$

A l'ordre zéro, on se contente de découpler les opérateurs de fermions $c_{k\sigma}$ dans le propagateur, c'est équivalent au diagramme de la figure D.1. On obtient

$$\Pi_{\alpha\beta}(\tau) = - \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_{k,\sigma} \sin(k_\alpha a) \sin(k_\beta a) G(k, \tau) G(k, -\tau) \quad (\text{D.28})$$

le signe $(-)$ provient du découplage des fermions. On a remplacé les fonctions de Green non perturbées des fermions G^0 par les fonctions de Green exactes comme le suggère le diagramme. Lorsque l'on passe en Matsubara on obtient

$$\Pi_{\alpha\beta}(\bar{\mu}) = - \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_{k,\sigma} \sum_{\bar{\nu}} \sin(k_\alpha a) \sin(k_\beta a) G(k, \bar{\nu} + \bar{\mu}) G(k, \bar{\nu}) \quad (\text{D.29})$$

Cette formule est adéquate pour calculer numériquement la fonction de Green courant-courant en sommant sur les vecteurs \mathbf{k} et sur les fréquences de Matsubara des fermions. On obtient alors la fonction spectrale $\lambda(\omega)$ par continuité analytique puis la conductivité $\sigma(\omega)$ en divisant par 2ω .

En utilisant la représentation spectrale des fonctions de Green des fermions, on obtient

$$\lambda_{\alpha\beta}(\omega) = - \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sin(k_{\alpha}a) \sin(k_{\beta}a) \times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} A_F(k, \omega') A_F(k, \omega + \omega') [n_F(\omega + \omega') - n_F(\omega')] \quad (D.30)$$

Pour obtenir la conductivité statique, il faut prendre la limite $\omega \rightarrow 0$. On obtient alors

$$\sigma_{\alpha\beta}(0) = -\frac{1}{2} \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sin(k_{\alpha}a) \sin(k_{\beta}a) \int \frac{d\omega'}{2\pi} A_F(k, \omega')^2 n'_F(\omega') \quad (D.31)$$

avec $n'_F(x) = -\frac{1}{4}\beta \cosh^{-2}(\frac{1}{2}\beta x)$.

Appendice E

Noyau e.m pour un Réseau Discret

Dans cet appendice, nous redécrivons brièvement la dérivation du noyau e.m $K_{\alpha\beta}$ pour un réseau discret au niveau RPA. Nous commençons par obtenir les courants paramagnétiques et diamagnétiques à partir de l'invariance de jauge, puis nous appliquons la formule de Kubo qui donne l'expression du noyau. Nous calculons la valeur de $K_{\alpha\beta}$ dans la phase normale et dans la phase supra.

E.1 Courant paramagnétique et diamagnétique

Nous considérons la partie cinétique du hamiltonien

$$H = -t \sum_{j,\delta,\sigma} c_{j+\delta,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \quad (\text{E.1})$$

où \mathbf{R}_j sont les sites du réseau, δ correspond aux proches voisins ($2d$ pour un réseau à d dimensions) et σ est la projection du spin. En présence d'un champ e.m décrit par le vecteur potentiel $\vec{A}(\vec{r})$ le hamiltonien se met sous la forme

$$H = -t \sum_{j,\delta,\sigma} c_{j+\delta,\sigma}^+ e^{i\frac{e}{\hbar} \vec{\delta} \cdot \vec{A}_{j+\delta/2}} c_{j,\sigma} \quad (\text{E.2})$$

Ce nouvel hamiltonien est alors invariant par les transformations locales de jauge qui sont définies par

$$c_{j,\sigma} \rightarrow e^{i\frac{e}{\hbar} \Lambda_j} c_{j,\sigma} \quad (\text{E.3})$$

et

$$\vec{A}_j \rightarrow \vec{A}_j + \frac{1}{a^2} \vec{\delta} \Lambda_{j+\delta/2} \quad (\text{E.4})$$

où a est le pas du réseau. La transformation de jauge pour le potentiel vecteur correspond à rajouter le gradient de la fonction $\Lambda(\vec{r})$ au site \vec{R}_j dans une version discrète du gradient. Notons que dans cette convention, le potentiel vecteur \vec{A} vit entre les sites du réseau (et donc les courants) alors que les phases Λ vivent sur les sites du réseau. Cela étant dit, nous écrivons

$$H = -t \sum_{j,\delta,\sigma} c_{j+\delta/2,\sigma}^+ e^{i\frac{e}{\hbar} \vec{\delta} \cdot \vec{A}_j} c_{j-\delta/2,\sigma} \quad (\text{E.5})$$

Cette forme, permet alors d'obtenir le courant en dérivant fonctionnellement par rapport au potentiel vecteur. Le courant au site \mathbf{R}_j est donné par

$$\vec{J}_j = -\frac{\delta H}{\delta \vec{A}_j} = \frac{iet}{\hbar} \sum_{j,\delta,\sigma} c_{j+\delta/2,\sigma}^+ c_{j-\delta/2,\sigma} \vec{\delta} e^{i\frac{e}{\hbar} \vec{\delta} \vec{A}_j} \quad (\text{E.6})$$

En développant cette expression en $0(A^2)$, on obtient deux termes que l'on identifie à un courant paramagnétique et un courant diamagnétique (par identification dans la limite $a \rightarrow 0$):

$$\vec{j}_{par}(\mathbf{R}_j) = \frac{iet}{\hbar} \sum_{\sigma} \vec{\delta} c_{j+\delta/2,\sigma}^+ c_{j-\delta/2,\sigma} \quad (\text{E.7})$$

et

$$\vec{j}_{dia}(\mathbf{R}_j) = -\frac{e^2 t a^2}{\hbar^2} \sum_{\sigma,\delta} (\vec{A}_j \cdot \vec{\delta}) \vec{\delta} c_{j+\delta/2,\sigma}^+ c_{j-\delta/2,\sigma} \quad (\text{E.8})$$

Le courant total étant la somme de ces deux courants sommés sur tous les sites \mathbf{R}_j du réseau. Nous définissons, les transformations sur les vecteurs \mathbf{k} par

$$c_{j,\sigma} = M^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (\text{E.9})$$

et

$$\vec{j}(\mathbf{R}_j) = M^{-1} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \vec{j}(\mathbf{q}) \quad (\text{E.10})$$

On obtient alors pour le courant paramagnétique

$$j_{par}^{\alpha}(\mathbf{q}) = \frac{2eta}{\hbar} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sin a(k + \frac{1}{2}q)_{\alpha} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (\text{E.11})$$

remarquons que pour $a \rightarrow 0$, on obtient la formule standard du courant paramagnétique des particules libres, avec la correspondance $\hbar^2/2m = ta^2$.

E.2 Expression du noyau $K_{\alpha\beta}$

Le but est de dériver l'expression qui relie le courant total au potentiel vecteur, c'est-à-dire $J_{\alpha} = -K_{\alpha\beta} A_{\beta}$. Pour cela, on considère la formule de Kubo qui se contente du terme linéaire en \mathbf{A} dans le hamiltonien perturbé. On se contente donc du courant paramagnétique pour obtenir la formule de Kubo:

$$H \rightarrow H - \sum_j \vec{j}_{par}(\mathbf{R}_j) \vec{A}_j + 0(A^2) \quad (\text{E.12})$$

Si on note H_A ce terme supplémentaire, alors la formule de Kubo donne immédiatement la valeur du courant total

$$\langle \vec{J}(\mathbf{R}_j, t) \rangle = \langle \vec{J}(\mathbf{R}_j) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\vec{J}(\mathbf{R}_j, t), H_A(t')] \rangle \quad (\text{E.13})$$

soit

$$J_{\alpha}(\mathbf{R}_j, t) = -\frac{e^2 t a^2}{\hbar^2} \sum_{\delta, \sigma} \langle c_{j+\delta/2, \sigma}^+ c_{j-\delta/2, \sigma} \rangle \delta_{\alpha} \delta_{\beta} A_{\beta}(\mathbf{R}_j) \\ - \frac{\theta(t-t')}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \sum_{j'} \langle [j_{\alpha}(\mathbf{R}_j, t), j_{\beta}(\mathbf{R}_{j'}, t')] \rangle A_{\beta}(\mathbf{R}_{j'}) \quad (\text{E.14})$$

On définit le noyau K par la relation

$$J_{\alpha}(\mathbf{R}_j, t) = -\sum_{j'} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_j, t; \mathbf{R}_{j'}, t') A_{\beta}(\mathbf{R}_{j'}, t') \quad (\text{E.15})$$

Dans notre cas, nous prenons le potentiel vecteur indépendant du temps. On obtient alors

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_j, t; \mathbf{R}_{j'}, t') = \delta_{j, j'} \delta(t-t') \frac{e^2 t a^2}{\hbar^2} \sum_{\delta, \sigma} \langle c_{j+\delta/2, \sigma}^+ c_{j-\delta/2, \sigma} \rangle \delta_{\alpha} \delta_{\beta} + P_{\alpha\beta}^R(\mathbf{R}_j, t; \mathbf{R}_{j'}, t') \quad (\text{E.16})$$

où l'on a introduit la fonction de Green retardée pour les courants

$$P_{\alpha\beta}^R(\mathbf{R}_j, t; \mathbf{R}_{j'}, t') = \frac{\theta(t-t')}{i\hbar} \langle [j_{\alpha}(\mathbf{R}_j, t), j_{\beta}(\mathbf{R}_{j'}, t')] \rangle \quad (\text{E.17})$$

Il reste alors à passer en Fourier, pour obtenir

$$K_{\alpha\beta}(q, \omega) = \delta_{\alpha, \beta} 2 \frac{e^2 a^2}{\hbar^2} \sum_k t_k^{\alpha} n_k + P_{\alpha\beta}(q, \omega) \quad (\text{E.18})$$

avec les définitions suivantes:

$$t_k^{\alpha} = 2t \cos(ak_{\alpha}) \quad (\text{E.19})$$

$$P_{\alpha\beta}^R(q, t) = \frac{\theta(t-t')}{i\hbar} \langle [j_{\alpha}(q, t), j_{\beta}(-q, 0)] \rangle \quad (\text{E.20})$$

et

$$K_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_j, t; \mathbf{R}_{j'}, t') = M^{-1} \sum_q \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} e^{-i\omega(t-t')} K_{\alpha\beta}(q, \omega) \quad (\text{E.21})$$

On désigne \vec{J} comme le courant total et \vec{j} comme le courant paramagnétique. Notons, qu'il est loisible d'introduire la fonction de Green en température

$$P_{\alpha\beta}(q, \tau) = \langle [j_{\alpha}(q, \tau) j_{\beta}(-q, 0)] \rangle \quad (\text{E.22})$$

avec la relation habituelle $P(q, \omega) = -\beta P(q, i\bar{\mu} = -\omega - i\eta)$.

E.3 Phase normale

Dans la phase normale, nous considérons uniquement le hamiltonien cinétique sans interaction

$$H = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k c_{k, \sigma}^+ c_{k, \sigma} \quad (\text{E.23})$$

avec

$$\epsilon_k = \sum_{\alpha=1}^d (2t - 2t \cos(ak_\alpha)) - \mu \quad (\text{E.24})$$

On peut obtenir la fonction de Green $P_{\alpha\beta}$ soit en découplant les opérateurs de fermions, soit à l'aide de l'équation d'évolution. Nous choisissons cette dernière méthode, réservant la première pour l'état supra. Nous considérons donc la fonction de Green en temps imaginaire

$$P_{\alpha\beta}(q, \tau) = \sum_{k, \sigma} \sum_{k', \sigma'} \sin(k + \frac{1}{2}q)_\alpha \sin(k' - \frac{1}{2}q)_\beta \times \\ < T[c_{k+q\sigma}^+(\tau) c_{k\sigma}(\tau) c_{k'-q\sigma'} c_{k'\sigma'}] > \quad (\text{E.25})$$

Il est alors loisible de retirer les sommes sur k, k', σ et σ' et de définir une fonction de Green de la forme

$$S(k, \sigma, k', \sigma', q, \tau) = < T[c_{k+q\sigma}^+ c_{k\sigma} c_{k'-q\sigma'} c_{k'\sigma'}] > \quad (\text{E.26})$$

il reste alors à évaluer les deux commutateurs, l'un provenant du commutateur avec le hamiltonien et l'autre du terme en $\delta(\tau)$:

$$[H, c_{k+q\sigma}^+ c_{k\sigma}] = (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k) c_{k+q\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad (\text{E.27})$$

et

$$[c_{k+q\sigma}^+ c_{k\sigma}, c_{k'-q\sigma'} c_{k'\sigma'}] = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{k', k+q} (n_{k+q} - n_k) \quad (\text{E.28})$$

avec $n_k = < c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} >$ et valant simplement $n_F(\epsilon_k)$ pour le hamiltonien que l'on considère. On a alors la solution pour $S(k, \sigma, k', \sigma', q, \tau)$. En passant en Matsubara et en sommant sur les variables fermioniques, on obtient

$$P_{\alpha\beta}^R(q, \omega) = \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_{k, \sigma} \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\alpha \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\beta \frac{n_{k+q} - n_k}{\omega + \epsilon_{k+q} - \epsilon_k + i\eta} \quad (\text{E.29})$$

Dans la limite $\omega \rightarrow 0$ et $q \rightarrow 0$, on obtient pour le noyau e.m

$$K_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha, \beta} 2 \left(\frac{e^2 a^2}{\hbar^2} \right) \sum_k t_k^\alpha n_k + \delta_{\alpha, \beta} 2 \left(\frac{e^2 a^2}{\hbar^2} \right) \sum_k 4t^2 \sin^2(ak_\alpha) n'_k \quad (\text{E.30})$$

où n'_k est la dérivée de la fonction de Fermi en ϵ_k . En utilisant le fait que $\partial_{k_\alpha} \epsilon_k = 2ta \sin(ak_\alpha)$, on peut utiliser l'intégration par partie

$$[\sin a(k_\alpha) n_F(\epsilon_k)]_{-\pi}^{+\pi} = \int_{-\pi}^{+\pi} dk_\alpha \cos a(k_\alpha) n_F(\epsilon_k) + \int_{-\pi}^{+\pi} dk_\alpha 2t \sin^2(ak_\alpha) n'_F(\epsilon_k) \quad (\text{E.31})$$

On a alors $K_{\alpha\beta} = 0$. Les termes diamagnétique et paramagnétique se compensent exactement.

E.4 Phase supra

On suppose que la phase supra est décrite par les quatre fonctions de Green des fermions $G_{i,j}(k, \tau)$ avec $i, j = 1, 2$. Dans ce cas, on découple la fonction de Green $P_{\alpha\beta}(q, \tau)$ en utilisant cette symétrie. On obtient alors

$$P_{\alpha\beta}(q, \tau) = - \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_k \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\alpha \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\beta \text{Tr}_{22} [G(k, \tau) G(k + q, -\tau)] \quad (\text{E.32})$$

où la trace est sur les matrices 2×2 , c'est-à-dire que l'on a quatre termes, $G_{11}G_{11}$, $G_{12}G_{21}$, $G_{21}G_{12}$ et $G_{22}G_{22}$. Lorsque l'on passe en Matsubara, on obtient

$$P_{\alpha\beta}(q, \bar{\mu}) = - \left(\frac{2eta}{\hbar} \right)^2 \sum_{k, \bar{\nu}} \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\alpha \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\beta \text{Tr}_{22} [G(k, \bar{\nu} + \bar{\mu}) G(k + q, \bar{\nu})] \quad (\text{E.33})$$

avec

$$G_{11}(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{u_k^2}{i\bar{\nu} + \gamma_k} + \frac{v_k^2}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \right], \quad G_{22}(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{u_k^2}{i\bar{\nu} - \gamma_k} + \frac{v_k^2}{i\bar{\nu} + \gamma_k} \right] \quad (\text{E.34})$$

et

$$G_{12}(k, \bar{\nu}) = G_{21}(k, \bar{\nu}) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{u_k v_k}{i\bar{\nu} + \gamma_k} - \frac{u_k v_k}{i\bar{\nu} - \gamma_k} \right] \quad (\text{E.35})$$

avec

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \right], \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \right] \quad \text{et} \quad u_k v_k = -\frac{\Delta_k}{2 \gamma_k} \quad (\text{E.36})$$

Du fait que les fonctions de Green $G_{i,j}(k, \bar{\nu})$ ont des pôles simples en $\pm\gamma_k$, la somme sur $\bar{\nu}$ est triviale. Le résultat pour $P_{\alpha\beta}^R(q, \omega = 0)$ est alors

$$P_{\alpha\beta}^R(q) = 2 \left(\frac{e^2 a^2}{\hbar^2} \right) \sum_k 4t^2 \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\alpha \sin a(k + \frac{1}{2}q)_\beta \times \left[\frac{n_F(\gamma_{k+q}) - n_F(\gamma_k)}{\gamma_{k+q} - \gamma_k} [u_k u_{k+q} + v_k v_{k+q}]^2 + \frac{n_F(\gamma_{k+q}) - n_F(-\gamma_k)}{\gamma_{k+q} + \gamma_k} [u_k v_{k+q} - v_k u_{k+q}]^2 \right] \quad (\text{E.37})$$

Dans la limite $q \rightarrow 0$, le premier terme fait intervenir $n_F(\gamma_k)$ qui est nul à cause du gap Δ_k alors que le second terme est identiquement nul. Le noyau K ne contient que le terme diamagnétique (rigidité de London). On obtient alors que $K = \lambda_L^{-2}$ où λ_L est la longueur de London (en unité $\mu_0 = 1$) et $K = K_{\alpha\alpha}$ étant la partie longitudinale du tenseur. Lorsque le gap s'annule, alors $\gamma_k = |\epsilon_k|$ et le premier terme dans la somme est non nul, $n'_F(x)$ est une fonction paire de x . On retrouve le cas de la phase normale et donc $K = 0$.

La limite $\mathbf{q} \neq 0$ permet de définir une électrodynamique non locale. Pour un gap non nul, seul le second terme de $P_{\alpha\beta}$ est non nul. Ce terme est négatif et donne $K(q)$ qui diminue avec q . Dans la limite $a \rightarrow 0$, on définit la longueur de pénétration λ selon Pippard par

$$\lambda = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dq \frac{1}{q^2 + K(q)} \quad (\text{E.38})$$

qui redonne la longueur de London dans le cas où le noyau K ne dépend pas de \mathbf{q} .

Appendice F

Potentiel Effectif

Dans cet appendice, nous donnons la transformation unitaire qui permet d'obtenir une interaction effective statique pour les fermions en éliminant les états bosoniques. Néanmoins, il faut garder à l'esprit que pour notre système, la superfluidité des bosons et la supraconductivité des fermions sont indissociables (même paramètre d'ordre).

Lorsque le bas de la bande de boson est supérieur à deux fois l'énergie maximum d'un fermion, c.a.d que $E_0 > 2(\epsilon_0 - \mu)$, alors les processus d'échange sont interdits par la conservation de l'énergie. On peut alors éliminer les états de bosons par une transformation unitaire où l'on considère les états de bosons comme des états virtuels. Une telle transformation s'écrit

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S} = H + [S, H] + \frac{1}{2!}[S, [S, H]] + \dots \quad (\text{F.1})$$

avec la condition

$$H_1 + [S, H_0] = 0 \quad (\text{F.2})$$

on obtient alors le nouvel hamiltonien $\tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2}[S, H_1]$. L'opérateur S est pour notre modèle

$$S = \sum_{k,q} \frac{g}{\epsilon_k + \epsilon_{-k+q} - E_q} \left(c_{k+q\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ b_q - b_q^+ c_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow} \right) \quad (\text{F.3})$$

Le commutateur vaut

$$\begin{aligned} [S, H_1] &= \sum_{k,p,q} \left[\frac{g^2}{\epsilon_{k+q} + \epsilon_{-k} - E_q} + \frac{g^2}{\epsilon_{p+q} + \epsilon_{-p} - E_q} \right] c_{k+q\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-p\downarrow} c_{p+q\uparrow} \\ &+ \sum_{k,p,q,r} \frac{g^2}{\epsilon_{k+q} + \epsilon_{-k} - E_q} b_r^+ [c_{k+q\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+, c_{-p\downarrow} c_{p+r\uparrow}] b_q \\ &+ \sum_{k,p,q,r} \frac{g^2}{\epsilon_{k+q} + \epsilon_{-k} - E_q} b_q^+ [c_{p+r\uparrow}^+ c_{-p\downarrow}^+, c_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow}] b_r \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

les deux derniers termes du commutateur comportent des opérateurs de bosons qui s'annulent lorsqu'on fait la projection sur un sous espace sans bosons. Le hamiltonien effectif est alors

$$\tilde{H} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} V_{kk'}(q) c_{k+q\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k'\downarrow} c_{k'+q\uparrow} \quad (\text{F.5})$$

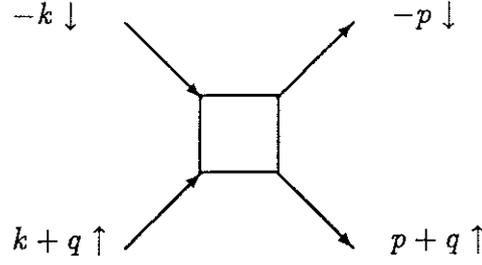


Figure F.1: potentiel effectif pour les fermions

on a défini le potentiel effectif des fermions $V_{k,k'}(q)$ par

$$V_{kk'}(q) = g^2 \left[\frac{1}{\epsilon_{k+q} + \epsilon_k - E_q} + \frac{1}{\epsilon_{k'+q} + \epsilon_{k'} - E_q} \right] \quad (\text{F.6})$$

On peut représenter l'interaction des électrons par le diagramme de la figure (F.1).

A partir de ce hamiltonien effectif, on peut faire le champ-moyen de BCS. On se place sur le sous espace des paires $q = 0$, le hamiltonien s'écrit

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \quad (\text{F.7})$$

avec

$$V_{k,k'} = \frac{g^2}{2M} \left(\frac{1}{2\epsilon_k - E_0} + \frac{1}{2\epsilon_{k'} - E_0} \right) \quad (\text{F.8})$$

Le hamiltonien champ-moyen est alors

$$H_{CM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_k \Delta_k \left[c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ + c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \right] \quad (\text{F.9})$$

où l'on a introduit le paramètre d'ordre Δ_k qui est défini par

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \quad (\text{F.10})$$

les équations self-consistantes à $T = 0$ sont

$$\begin{aligned} \Delta_k &= - \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{2\gamma_{k'}} \\ \gamma_k &= \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2} \\ n &= \frac{1}{M} \sum_k \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k}{\gamma_k} \right) \end{aligned} \quad (\text{F.11})$$

Compte tenu de la forme du potentiel $V_{k,k'}$, le gap Δ_k est de la forme

$$\Delta_k = a + \frac{b}{2\epsilon_k - E_0} \quad (\text{F.12})$$

Si l'on fait du Hartree-Fock normal, sur le hamiltonien effectif, on obtient le hamiltonien champ-moyen:

$$H_{HF} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} V_{k,k'}(q) \left[\delta_{k,k'} n_{-k\downarrow} c_{k+q\uparrow} c_{k+q\uparrow} + \delta_{k,k'} n_{k+q\uparrow} c_{-k\downarrow}^+ c_{-k\downarrow} \right] \quad (\text{F.13})$$

où l'on a introduit les paramètres variationnels $n_{k,\sigma} = \langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle$. Le hamiltonien s'écrit

$$H_{HF} = \sum_{k,\sigma} E_{k\sigma}^{HF} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad (\text{F.14})$$

les équations self-consistantes sont alors

$$\begin{aligned} E_{k,\sigma}^{HF} &= \epsilon_k + \frac{1}{2} \sum_q V_{k,k}(q) n_{-k+q,\bar{\sigma}} \\ n_{k,\sigma} &= n_F(E_{k,\sigma}^{HF}) \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

avec $n_F(x)$ qui est la fonction de Fermi et $\bar{\sigma} = -\sigma$. On remarque qu' à l'ordre le plus bas, on obtient

$$E_{k,\sigma}^{HF} = \epsilon_k + \frac{g^2}{M} \sum_q \frac{n_F(\epsilon_{k+q})}{\epsilon_k + \epsilon_{k+q} - E_q} \quad (\text{F.16})$$

le dernier terme correspond à la partie réelle de la self-énergie des fermions du modèle initial pour $\omega = \epsilon_k$.

Appendice G

Intégrales Fonctionnelles

Fonction génératrice pour les bosons

On considère une action $S[\Phi^*, \Phi]$ pour des variables complexes. La fonction génératrice est définie par

$$Z[J^*, J] = \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi e^{-S[\Phi^*, \Phi]} e^{-\int d^4x_E [\Phi^*(x)J(x) + J^*(x)\Phi(x)]} \quad (\text{G.1})$$

On obtient

$$\frac{\delta Z[J^*, J]}{\delta J^*(x)} = -Z[J^*, J] \langle \Phi(x) \rangle \quad \text{et} \quad \frac{\delta Z[J^*, J]}{\delta J(x)} = -Z[J^*, J] \langle \Phi^*(x) \rangle \quad (\text{G.2})$$

La fonction de Green à n particules est définie par

$$G^n(x_1, \dots, x_n | x'_1, \dots, x'_n) = \langle T [\hat{\Phi}(x_1) \dots \hat{\Phi}(x_n) \hat{\Phi}^+(x'_n) \dots \hat{\Phi}^+(x'_1)] \rangle \quad (\text{G.3})$$

et s'obtient par différenciation fonctionnelle de $Z[J^*, J]$

$$G^n(x_1 \dots x_n | x'_1 \dots x'_n) = \frac{\delta^{2n} Z[J^*, J]}{\delta J^*(x_1) \dots \delta J^*(x_n) \delta J(x'_n) \dots \delta J(x'_1)} \quad (\text{G.4})$$

On définit la fonction génératrice pour les fonctions de Green connectées par

$$W[J^*, J] = -\ln Z[J^*, J] \quad (\text{G.5})$$

La fonction de Green à n particules connectée est alors donnée par

$$G_c^n(x_1 \dots x_n | x'_1 \dots x'_n) = \frac{\delta^{2n} W[J^*, J]}{\delta J^*(x_1) \dots \delta J^*(x_n) \delta J(x'_n) \dots \delta J(x'_1)} \quad (\text{G.6})$$

Pour la fonction de Green à deux particules, on obtient,

$$G_c(x, x') = \begin{pmatrix} \langle T[\hat{\Phi}(x)\hat{\Phi}^+(x')] \rangle & \langle T[\hat{\Phi}(x)\hat{\Phi}(x')] \rangle \\ \langle T[\hat{\Phi}^+(x)\hat{\Phi}^+(x')] \rangle & \langle T[\hat{\Phi}^+(x)\hat{\Phi}(x')] \rangle \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \langle \hat{\Phi}(x) \rangle \langle \hat{\Phi}^+(x') \rangle & \langle \hat{\Phi}(x) \rangle \langle \hat{\Phi}(x') \rangle \\ \langle \hat{\Phi}^+(x) \rangle \langle \hat{\Phi}^+(x') \rangle & \langle \hat{\Phi}^+(x) \rangle \langle \hat{\Phi}(x') \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{G.7})$$

Dans l'état normal, on a $G_c(x, x') = G(x, x')$.

Action Effective

En présence d'une source $J(x)$, les opérateurs $\hat{\Phi}^+(x)$ et $\hat{\Phi}(x)$ ont une valeur moyenne non nulle. On définit de façon formelle ces valeurs moyennes en présence d'une source

$$\Phi_c(x) = \langle \hat{\Phi}(x) \rangle \quad \text{et} \quad \Phi_c^*(x) = \langle \hat{\Phi}^+(x) \rangle \quad (\text{G.8})$$

On a alors

$$\Phi_c(x) = \frac{\delta W[J^*, J]}{\delta J^*(x)} \quad \text{et} \quad \Phi_c^*(x) = \frac{\delta W[J^*, J]}{\delta J(x)} \quad (\text{G.9})$$

On définit le potentiel effectif $\Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]$ par la transformation de Legendre

$$\Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c] = -W[J^*, J] + \int d^4x_E [\Phi_c^*(x)J(x) + J^*\Phi_c(x)] \quad (\text{G.10})$$

on obtient alors

$$J(x) = \frac{\delta \Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]}{\delta \Phi_c^*(x)} \quad \text{et} \quad J^* = \frac{\delta \Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]}{\delta \Phi_c(x)} \quad (\text{G.11})$$

avec la relation

$$\frac{\delta W[J^*, J]}{\delta \Phi_c(x)} = \int d^4x'_E \left\{ \frac{\delta W}{\delta J(x')} \frac{\delta J(x')}{\delta \Phi_c(x)} + \frac{\delta W}{\delta J^*(x')} \frac{\delta J^*(x')}{\delta \Phi_c(x)} \right\} \quad (\text{G.12})$$

L'action effective $\Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]$ est stationnaire quand on annule les sources. On note $\Phi_0(x)$ la valeur de $\Phi_c(x)$ en l'absence de source. On a alors les équations suivantes

$$\left. \frac{\delta \Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]}{\delta \Phi_c(x)} \right|_{\Phi_0} = 0 \quad \text{et} \quad \left. \frac{\delta \Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]}{\delta \Phi_c^*(x)} \right|_{\Phi_0} = 0 \quad (\text{G.13})$$

L'action effective est une fonction génératrice pour les fonctions de vertex $\Gamma_{m\Phi_c^*, n\Phi_c}$ définies par

$$\Gamma_{m\Phi_c^*, n\Phi_c}(x_1 \dots x_m, x'_1 \dots x'_n) = \frac{\delta^{n+m} \Gamma[\Phi_c^*, \Phi_c]}{\delta \Phi_c^*(x_1) \dots \delta \Phi_c^*(x_m) \delta \Phi_c(x'_1) \dots \delta \Phi_c(x'_n)} \quad (\text{G.14})$$

Fonction de vertex à une particule

On dérive la relation entre la fonction de Green à une particule des bosons $G_c(x, x')$ et la fonction de vertex $\Gamma(x, x')$. On a, soit en Euclidien, soit en Minkowski, les relations suivantes

$$\frac{\delta \Phi_c(x)}{\delta \Phi_c(x')} = \delta(x - x') = \int d^4y \frac{\delta \Phi_c(x)}{\delta J(y)} \frac{\delta J(y)}{\delta \Phi_c(x')} + \frac{\delta \Phi_c(x)}{\delta J^*(y)} \frac{\delta J^*(y)}{\delta \Phi_c(x')} \quad (\text{G.15})$$

en exprimant J et Φ_c en fonction de W et Γ , on obtient

$$\frac{\delta \Phi_c(x)}{\delta \Phi_c(x')} = \int d^4y \frac{\delta^2 W}{\delta J(y) \delta J^*(x)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \Phi_c(x') \delta \Phi_c^*(y)} + \frac{\delta^2 W}{\delta J^*(y) \delta J^*(x)} \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \Phi_c(x') \delta \Phi_c(y)} \quad (\text{G.16})$$

soit

$$\frac{\delta \Phi_c(x)}{\delta \Phi_c(x')} = \int d^4y G_{c,22}(y, x) \Gamma_{22}(x', y) + G_{c,12}(y, x) \Gamma_{21}(x', y) \quad (\text{G.17})$$

On obtient ainsi quatre relations à partir de

$$\frac{\delta\Phi_c(x)}{\delta\Phi_c(x')} = \delta(x-x'), \quad \frac{\delta\Phi_c(x)}{\delta\Phi_c^*(x')} = 0, \quad \frac{\delta\Phi_c^*(x)}{\delta\Phi_c(x')} = 0, \quad \frac{\delta\Phi_c^*(x)}{\delta\Phi_c^*(x')} = \delta(x-x') \quad (\text{G.18})$$

données par

$$\int d^4y \begin{pmatrix} \Gamma_{11}(x',y) & \Gamma_{12}(x',y) \\ \Gamma_{21}(x',y) & \Gamma_{22}(x',y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{c,11}(y,x) & G_{c,12}(y,x) \\ G_{c,21}(y,x) & G_{c,22}(y,x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta(x-x') & 0 \\ 0 & \delta(x-x') \end{pmatrix} \quad (\text{G.19})$$

En utilisant la notation matricielle, on obtient finalement

$$\int d^4y \Gamma(x',y) G_c(y,x) = \delta(x-x') \quad (\text{G.20})$$

En Minkowski, on définit les transformation de Fourier par -

$$A(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} A(\omega), \quad A(\omega) = \int dt e^{i\omega t} A(t) \quad (\text{G.21})$$

et

$$A(\vec{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}\vec{r}} A(\vec{k}), \quad A(\vec{k}) = \int d^3r e^{-i\vec{k}\vec{r}} A(\vec{r}) \quad (\text{G.22})$$

soit

$$A(x) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} e^{-ikx} A(k) \quad (\text{G.23})$$

avec la métrique $(+---)$, $k^\mu = (\omega, \vec{k})$ et $x^\mu = (t, \vec{r})$. On obtient alors dans l'espace de Fourier

$$\Gamma(k) G_c(k) = 1 \quad (\text{G.24})$$

En Euclidien, on a avec nos conventions,

$$A(\tau) = \sum_{\bar{\mu}} e^{i\tau\bar{\mu}} A(\bar{\mu}), \quad A(\bar{\mu}) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{-i\tau\bar{\mu}} A(\tau) \quad (\text{G.25})$$

et

$$\delta(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\bar{\mu}} e^{i(\tau - \tau')\bar{\mu}}, \quad \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\tau(\bar{\mu} - \bar{\mu}')} = \delta_{\bar{\mu}, \bar{\mu}'} \quad (\text{G.26})$$

soit

$$A(x) = \sum_{\bar{\mu}} \int_0^\beta \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{ikx} A(k) \quad (\text{G.27})$$

avec la métrique $(++++)$, $k^\mu = (\bar{\mu}, \vec{k})$ et $x^\mu = (\tau, \vec{r})$. On obtient alors la relation

$$\beta \Gamma(q) \beta G_c(q) = 1 \quad (\text{G.28})$$



Bibliographie

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun
Handbook of Mathematical Functions
Dover, New York (1970)
- [2] A. A. Abrikosov
Fundamentals of the theory of metals
North-Holland (1988)
- [3] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov et I. E. Dzyaloshinski
Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics
Dover (1963)
- [4] A. Alexandrov and J. Ranninger
Bipolaronic Superconductivity
Phys. Rev B24 1164 (1981)
- [5] A. S. Alexandrov and J. Ranninger
Polaronic effects in the photoemission spectra of strongly coupled electron-phonon systems
Phys. Rev. B 45 13 109 (1992)
- [6] J. M. Blatt
Theory of Superconductivity
Academic Press, New York (1964)
- [7] B. K. Chakraverty and J. Ranninger
Bipolarons and superconductivity
Phil. Mag. B52 669 (1985)
- [8] S. Doniach , E. H. Sondheimer
Green's Functions for Solid State Physicists
BENJAMIN CUMMINGS (1974)
- [9] G. M. Éliashberg
Possible mechanism of the superconductivity and of a resistance varying linearly with T
Pis'ma Zh. Eksp. Theor. Fiz. 46 94 (1987)

- [10] R. Friedberg and T. D. Lee
Boson-Fermion Model of Superconductivity
Phys. Lett **A138** 423 (1989)
- [11] R. Friedberg, T. D. Lee and H. C. Ren
Coherence length and vortex filament in the boson-fermion model of superconductivity
Phys. Rev **B42** 4122 (1990)
- [12] N. M. Hugenholtz et D. Pines
Ground - State Energy and Excitation Spectrum of a System of Interacting Bosons
Phys. Rev **116** 489 (1959)
- [13] F. Iachello and A. Arima
The Interacting Boson Model
Cambridge University Press (1987)
- [14] F. Iachello and P. Van Isacke
The Interacting Boson-Fermion Model
Cambridge University Press (1991)
- [15] L. Ioffe, A. I. Larkin, Yu. N. Ovchinnikov and L. Yu
Superconductivity in mixed boson-fermion systems
Int. J. of Mod. Phys. B **3** 2065 (1989)
- [16] L. P. Kadanoff and G. Baym
Quantum Statistical Mechanics
Addison Wesley (1962)
- [17] C. Kittel
Quantum Theory of Solid
Wiley New York, second edition 1987
- [18] I. O. Kulik
Electronic transfer of local pairs and superconductivity in metal oxide compounds
Int. J. of Mod. Phys. B **1** 851 (1988)
- [19] L. Landau et E. Lifchitz
Physique théorique, Physique statistique, Tome 9
Edition MIR 1990
- [20] G. D. Mahan
Many-Particle Physics
Plenum Press, New York (1990)
- [21] R. Micnas, J. Ranninger and S. Robaszkiewicz, Rev. Mod. Phys. **62** 113 (1990)

- [22] J.J. Rodriguez-Nunez, M. Beck, R. Micnas, M. H. Pedersen, S. Schafroth and T. Schneider, Phys. Rev. B soumis.
- [23] J. W. Negele and H. Orland
Quantum Many Particle Systems
Addison Wesley (1988)
- [24] P. Nozières et S. Schmitt-Rink
Bose Condensation in an Attractive Fermions Gas: From Weak to Strong Coupling Superconductivity
J. of Low Temp. Phys. **59** 195 (1985)
- [25] V.N. Popov, *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics*, D. Reidel (Boston), 1983; D.S. Fisher and P.C. Hohenberg, Phys. Rev. B **37**, 4936 (1988).
- [26] H. De Raedt and A. Lagendijk
Computer Simulation Study of Bipolaron Formation
Z. Phy. B**65** 43 (1986)
- [27] J. Ranninger and S. Robaszkiewicz
Superconductivity of locally paired electrons
Physica B **135** 468 (1985)
- [28] J. Ranninger, R. Micnas and S. Robaszkiewicz
Superconductivity of a mixture of local pairs and quasi free electrons
Ann. Phys. Fr. **13** 455 (1988)
- [29] J. Ranninger and U. Thibblin
Two-site polaron problem: Electronic and vibrational properties
Phys. Rev. B **45** 7 730 (1992)
- [30] J. Ranninger, J. M. Robin and M. Eschrig, Phys. Rev. Lett. **74** 4027 (1995)
- [31] J. Ranninger and J. M. Robin, Physica C, A paraître.
- [32] J. Ranninger and J. M. Robin, Phys. Rev. Lett. soumis.
- [33] J. Ranninger and T. Kostyrko, A paraître
- [34] D. J. Scalapino dans *Superconductivity*, ed. R. D. Parks (1969) Dekker, New York, Vol.1, chap.10
- [35] H. J. Vidberg and J. W. Surenne
Solving the Eliashberg Equations by Means of N-Point Padé Approximants
Journ. of Low Temp. Phys. **29** 179 (1977)

- [36] D. J. Thouless
Perturbation Theory in Statistical Mechanics and the Theory of Superconductivity
Ann. of Phys. 10 553 (1960)
- [37] A. Simon, *Chemie Unserer Zeit* 22 (1988) 1 ; T. A. Wilson, *J. Phys. C* 20 (1987) L911
- [38] A. Bianconi et al., in "*Lattice Effects in High T_c Superconductors*", ed. Y. Bar Yam, T. Egami, J. Mustre de Leon and A.R. Bishop, World Scientific (Singapore) 1992 p.65
- [39] S. J. L. Billinge and T. Egami, in "*Lattice Effects in High T_c Superconductors*", ed. Y. Bar Yam, T. Egami, J. Mustre de Leon and A.R. Bishop, World Scientific (Singapore) 1992 p.93
- [40] P. Ruani et al., in "*Anharmonic Properties of High T_c Superconductor*", ed. D. Mihailovic, P. Ruani, E. Kaldis and K. A. Müller, World Scientific (Singapore) to be published
- [41] W. Handschuh et al., *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995) 1095
- [42] C. Taliani et al., in "*Electronic Properties of High T_c Superconductors and Related Compounds*", ed. H. Kuzmany, M. Mehring and J. Fink, Springer Series of Solid State Science (Berlin) 1990 p. 280
- [43] I. Poberaj and D. Mihailovic, *Phys. Rev* B50 (1994) 6426
- [44] D. Mihailovic et al., *Phys. Rev* B42 (1990) 7989
- [45] M. Knupfer et al., *Phys. Rev.* B47 (1993) 13944
- [46] D. S. Dessau et al., *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 1193
- [47] T. Timusk, in "*Anharmonic Properties of High T_c Superconductors*", ed. D. Mihailovic, P. Ruani, E. Kaldis and K. A. Müller, World Scientific (Singapore) to be published
- [48] C. C. Holmes et al., *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 1645
- [49] I. Bozovic et al., *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994) 1436
- [50] E. Denisov et al., *Phys. Rev.* B48 (1993) 16714
- [51] H. Tolentino et al., *Physica C* 192 (1992) 115
- [52] Pour une énumération détaillée sur ce sujet, voir par exemple B. Batlogg, H. Y. Hwang, H. Takagi, R. J. Cava, H. L. Kao and J. Kwo, *Physica C* 235-240 130 (1994)

