Physique Statistique

M. Philippe Nozières, membre de l'Institut
(Académie des Sciences), professeur

Cours : *Liquides de Fermi fortement corrélés*

Cet enseignement avait pour but de faire le point sur un problème d'une actualité brûlante : le comportement d'un gaz d'électrons dans une situation de couplage fort. Cette question est revenue au premier plan depuis la découverte des supraconducteurs à haute température critique : les électrons de valence du cuivre sont vraisemblablement de ce type. Pour comprendre le comportement très anormal de ces matériaux, il faut maîtriser l'effet des corrélations électroniques — un objectif pour l'instant lointain. Le cours s'est attaché à discuter les problèmes de fond, sans s'appesantir sur les aspects expérimentaux. (La modélisation du problème physique est très incertaine, et l'on ne sait jamais si un écart entre théorie et expérience est dû au modèle ou aux approximations). Certains aspects de ce problème avaient fait l'objet d'une série de leçons professées à l'Université Joseph Fourier de Grenoble au printemps 1990. Ces aspects ont été en partie repris, puis développés, dans le cours donné à Paris à l'automne.

1. *Modèle de Hubbard à une bande : état des lieux*

C'est l'archétype : les électrons se déplacent sur un réseau discret avec une orbitale par site, par saut entre premiers voisins d'amplitude t. L'interaction se limite à une répulsion U entre fermions de spins antiparallèles sur un même site. Les seuls paramètres sont le rapport U/t et le remplissage moyen par site n. Un certain nombre de limites sont bien comprises :

(i) Dans un gaz dilué en 3 dimensions, on a essentiellement une suite de collisions binaires indépendantes, caractérisées par une longueur de diffusion a. On peut développer en puissances de na^3 : le gaz est « presque parfait ». Cette conclusion est fausse en une dimension, car le déphasage ne s'annule pas à basse énergie : le concept de « liquide de Fermi » n'est plus valable. Les *plans* d'atomes caractéristiques des cuprates constituent un cas marginal pour lequel le comportement devrait être anormal.

(ii) Si faible que soit U, une bande demi pleine ($n = 1$) évolue toujours spontanément vers une structure antiferromagnétique (« onde de densité de spin »). En couplage faible, la théorie en est très analogue à celle d'un supraconducteur BCS habituel. Cette instabilité disparait si l'on introduit des sauts entre seconds voisins : il faut alors un U minimum pour observer un état antiferromagnétique.

(iii) En couplage fort, l'élimination des sites doublement occupés conduit à un *échange* entre sites voisins, d'amplitude $J = 4t^2/U$. Pour une bande demi pleine on retrouve un modèle d'Heisenberg standard. Si $n < 1$, les trous sautent avec l'amplitude t entre premiers voisins. Si l'on néglige un saut induit d'ordre J entre seconds voisins, on obtient le « modèle t-J » qui constitue la base pour toute étude du couplage fort.

Au delà, on rentre dans le domaine des spéculations, parfois étayées par la simulation numérique, parfois gratuites :

(i) Pour un couplage U très fort, on passe vraisemblablement d'un état paramagnétique à un état ferromagnétique lorsque la densité augmente.

(ii) En deux dimensions le fondamental du modèle de Heisenberg semble être un antiferromagnétique de Néel classique, avec des fluctuations de point zéro relativement faibles. Mais en jouant sur les échanges entre seconds voisins, on peut favoriser des états singulets *dimérisés,* voire un « liquide de spins » invariant par rotation des spins et par translation, connu sous le nom d'état « RVB ».

(iii) Pour une bande demi pleine et en l'absence de structure antiferromagnétique, on s'attend à une « transition de Mott » entre un état conducteur et un état isolant pour une valeur critique de U. Il est admis que cette transition est franche, élargie seulement en présence de trous. En fait, ce n'est pas évident si l'on tient compte des fluctuations quantiques.

(iv) Le mouvement des trous est profondément affecté par la structure des spin environnants. Il n'est pas clair qu'on puisse définir des états cohérents. Quelle est l'échelle d'énergie de ces états ? Peut-on les apparier pour fabriquer un supraconducteur ? Les trous détruisent-ils l'ordre magnétique ? Quel est le diagramme de phases ?

L'objet du cours était d'apporter une réponse partielle à toutes ces questions — ou tout au moins de les cerner.

2. *Théories de champ moyen : états RVB*

Une simple approximation de Hartree-Fock n'a aucun sens en couplage fort : d'une manière ou d'une autre il faut tenir compte de la contrainte de simple occupation des sites. La méthode la plus simple est celle de Gutzwiller, fondée sur une forme approchée de la fonction d'onde (en principe) — en fait de la matrice densité. Cette méthode a le mérite d'être simple, facile à mettre en œuvre même dans des situations compliquées. Elle revient à remplacer l'amplitude de saut t par une amplitude effective qui tient compte des probabilités *moyennes* d'occupation d'un site donné. On peut la présenter sous une forme plus élégante, « dans le vent », en introduisant des « particules esclaves » soumises à des contrainte locales. L'approximation revient à traiter ces contraintes *en moyenne.* Les corrélations locales sont ainsi perdues : l'approximation est dangereuse et incontrôlée. Elle est néanmoins utile à titre indicatif — à condition de bien réaliser qu'on perd une grande partie de la physique. On rend ainsi compte d'une transition de Mott franche pour une bande demi pleine. En généralisant le calcul à une aimantation finie, on prédit une transition métamagnétique qui pourrait exister dans des composés à bande étroite. Si $n < 1$, on obtient un modèle de « liquide de Fermi » dont on peut calculer tous les paramètres : la bande de trous est rétrécie (ce qui paraît raisonnable). Comme prévu, il apparaît une région ferromagnétique dans le diagramme d'états, partiellement masquée par l'instabilité antiferro.

En pratique, les faiblesses de l'approximation de Gutzwiller sont patentes. Même avec une largeur réduite les états de trou sont redondants (c'est manifeste sur l'entropie à haute température !). On a perdu l'échange et la structure de spin qui jouent un rôle crucial. La transition de Mott est probablement arrondie par les fluctuations de la probabilité de double occupation. Le liquide de Fermi ainsi obtenu est peut-être factice ! (Le cas à une dimension est à cet égard exemplaire : la dimension n'intervient pas dans Gutzwiller qui prédit un comportement parfaitement normal — alors que la solution exacte fondée sur l'Ansatz de Bethe est d'un type complètement différent).

Une alternative est l'état RVB proposé par P.W. Anderson. Pour $n = 1$, le réseau est pavé de paires singulet dans toutes les configurations possibles, ce qui rétablit l'invariance translationnelle. En une dimension, une telle invariance *locale* implique la présence de sites « célibataires » qui introduisent des « parois » entre les deux états dimères possibles. Dans le cas réel à deux dimensions, il n'est pas évident qu'une telle invariance locale puisse être réalisée sans une concentration finie de trous ou de spins célibataires : la nature réelle de l'état RVB n'est toujours pas claire.

Faute d'une théorie exacte, on peut essayer des approximations, avec toute la prudence qui s'impose. C'est l'esprit des *théories de champ moyen* développées ces dernières années, toutes issues du même hamiltonien t-J mais avec des troncatures différentes. Débarrassée du fratras du langage, la méthode est simple. On élimine d'emblée la contrainte de simple occupation en remplaçant t et J par des valeurs « renormalisées » à la Gutzwiller. L'état RVB correspond alors à une condensation de Bose de paires singulet. La seule incertitude est la fonction d'onde interne de ces paires, c'est-à-dire les paramètres u et v de BCS. Le calcul est standard : on factorise l'interaction d'échange, en veillant à conserver la contraction *normale* qui couple deux sites voisins. On obtient ainsi deux équations de fermeture couplées, qui admettent une très large variété de solutions. Les calculs sont simples pour une bande demi-pleine. On trouve entre autres un état de Gutzwiller normal, avec la surface de Fermi habituelle. Cet état est dégénéré avec un état superfluide de symétrie « s », découvert par Anderson, dont le gap s'annule sur la surface de Fermi. On obtient un état d'énergie inférieure avec un appariement superfluide de symétrie « d », dont le gap s'annule seulement en quatre points. Cette même énergie se retrouve pour une large gamme d'états hybrides. Ces dégénérescences ne sont pas accidentelles : elles sont dues à une symétrie cachée du système demi-plein (essentiellement une symétrie électron-trou sur un seul sous-réseau : on passe d'un état à l'autre par une rotation de jauge). Cette symétrie est brisée en présence de trous : on se convainc facilement que l'état optimal est alors l'appariement « d ». L'état RVB serait un condensat de Bose de paires singulet anisotropes.

On peut se demander si cette condensation de Bose implique une supraconductivité. La réponse est « non » pour une bande demi pleine. La phase du paramètre d'ordre est *localement* arbitraire : en l'absence de raideur il n'y a pas d'ordre à longue distance. L'introduction de trous rétablit cette raideur, donc une supraconductivité observable. Concrètement, on peut définir un paramètre d'ordre supra Δ *renormalisé* à la Gutzwiller : Δ est en principe la quantité mesurée, qui s'annule lorsque $n = 1$ comme prévu.

Ces calculs de champ moyen sont intéressants, mais très douteux. Ils dépendent tous d'une approximation de Gutzwiller, toujours simpliste et franchement discutable dès lors qu'on l'applique à un état apparié contenant déjà des corrélations entre spins opposés. En fait, on a évacué d'emblée tous les problèmes de cohérence liés aux corrélations locales, qui sont probablement essentiels. Dans ces conditions, la théorie n'a guère qu'une valeur indicative : il faut mettre un bémol aux cris de victoire !

3. *Les trous constituent-ils un liquide de Fermi ?*

Le liquide de Fermi est le prolongement par continuité du gaz idéal lorsqu'on établit progressivement l'interaction. Il se décrit à l'aide de *quasiparticules* renormalisées, bien définies près d'une surface de Fermi enfermant un nombre d'états égal au nombre de particules. Formellement, ce comportement se traduit par un pôle discret dans le spectre du propagateur à une particule, de résidu z : cette constante de renormalisation *finie* est la signature de l'état normal. La densité d'état des quasiparticules est constante près du niveau de Fermi, ce qui implique une densité d'états électron-trou *linéaire* en fréquence.

Au plan expérimental, un liquide de Fermi a une susceptibilité de spin constante et une chaleur spécifique proportionnelle à T à basse température. Ces propriétés ne sont cependant pas caractéristiques (on les retrouve dans les milieux amorphes). Des tests plus spécifiques sont la conductance tunnel finie, la loi de Korringa pour la relaxation nucléaire, le spectre de diffusion Raman à très basse énergie (l'intensité diffusée est d'ordre $\mathrm{Max}(\omega,T)$), une résistivité intrinsèque d'ordre T^2. Toutes ces propriétés sont apparemment violées dans les supraconducteurs à haute température. (Par exemple la résistivité est d'ordre T). On peut donc se demander si un gaz de trous en couplage fort est vraiment un liquide de Fermi. Une description phénoménologique récente, due à Abrahams et.al., prétend expliquer toutes les données expérimentales à partir d'un comportement « marginal », fondé sur une densité d'états électron-trou constante : ce modèle reste pour l'instant spéculatif.

Au plan théorique, les calculs les plus simples sont de type perturbatif. Ils donnent par construction un liquide de Fermi — sauf si la constante de renormalisation z est nulle. Une telle situation peut se produire si l'électron se couple à un continuum d'excitations dont la densité spectrale est linéaire en fréquence. Ce n'est pas le cas dans les situations usuelles (interaction électron-phonon ou électron-électron) — *sauf en une dimension.* En ce cas on a un comportement très pathologique où les quasiparticules disparaissent au niveau de Fermi. Les fonctions de corrélation suivent des lois en puissance avec des exposants non triviaux ; la distribution des particules nues est continue au niveau de Fermi ($z = 0$).

Ces résultats sont typiques d'une dimension. (Ils persistent en deux dimensions pour des surfaces de Fermi emboîtées — mais ce cas est de fait unidimensionnel). Toute transposition à $d = 2$ est hasardeuse. Un argument récent de P.W. Anderson, attribuant les écarts au liquide de Fermi à une « catastrophe infrarouge », paraît très suspect. (Cette catastrophe, familière dans les spectres d'absorption X, disparaît dès que l'on autorise un *recul* des diffuseurs transitoires — ce qui est le cas pour les porteurs d'une bande étroite). Les vraies questions sont en fait plus fondamentales : peut-on construire des états de Bloch *cohérents* pour un trou ? Quelle est l'échelle d'énergie correspondante ? La réponse ne saurait venir d'une démarche perturbative où l'on suppose le résultat pour le démontrer.

Toutes ces questions se posent déjà dans des contextes beaucoup plus simples, par exemple dans un système couplé électron-phonon. On sait construire en ce cas une amplitude de saut cohérente entre sites voisins qui fait intervenir le recouvrement (fini) des états fondamentaux de réseau dans les deux configurations. Mais la physique est très différente selon la force du couplage. En couplage faible la déformation du réseau ne lie pas le porteur, qui se déplace librement en entraînant un nuage de phonons — on a un liquide de Fermi dont l'échelle d'énergie est la largeur de bande t. En couplage fort, au contraire, le trou est « autopiégé » par la déformation de réseau qu'il crée. C'est cette déformation qui contrôle la dynamique — l'échelle d'énergie est celle des phonons. Le passage d'un régime à l'autre est mal compris (on ne sait pas s'il est progressif !). On maîtrise encore moins une densité de trous finie : nul ne sait si un gaz de polarons autopiégés est un liquide de Fermi. La généralisation à température finie est tout aussi incertaine : comment passe-t-on de l'effet tunnel cohérent au transport thermique incohérent ? Avant d'aborder le cas plus compliqué de trous couplés à un environnement magnétique, il serait peut-être bon de réfléchir à cette situation plus simple : les écarts au liquide de Fermi sont-ils dus à une perte de cohérence au sens « localisation quantique » ?

4. *Mouvement d'un trou unique dans une structure antiferromagnétique*

Le problème est délicat et doit être décortiqué de proche en proche. La situation la plus simple est celle d'une interaction U infinie, analysée il y a longtemps par Brinkman et Rice. L'échange disparait et la structure de spin ne peut évoluer que par déplacement du trou. Il n'existe pas d'état de Bloch cohérent, puisque les spins ne peuvent pas relaxer. La bande de trous est rétrécie : une approximation simple (incluant seulement les chemins qui reviennent sur leurs pas) donne une demi largeur $2t\sqrt{3}$, très proche de la réalité.

En fait, il existe une alternative : aligner les spins pour permettre au trou d'abaisser son énergie cinétique. En l'absence d'échange, c'est certainement la meilleure solution : le fondamental est ferromagnétique. (Théorème de « Nagaoka »). Si J est fini, il se forme un *polaron de spin ferromagnétique,* dont le rayon est un compromis entre le gain d'énergie cinétique du trou et le coût en énergie d'échange. Ce polaron est une structure localisée, stable si son énergie est en dessous du bas de bande incohérent de Brinkman-Rice : cette condition n'est remplie qu'aux *très faibles échanges,* $J/t < 0.004$. Si on augmente le nombre de trous, les polarons finissent par percoler, donnant un état ferromagnétique.

Lorsque J augmente, on retombe sur les états de Brinkman-Rice. Si on se limite à une interaction d'Ising, la structure de spin reste gelée : les états sont toujours incohérents — mais d'une nature très différente du fait de l'échange. Lorsque le trou se déplace sur une distance d par sauts entre premiers voisins, il laisse derrière lui une trainée de spins désorientés dans la structure antiferromagnétique — d'où une énergie Jd : le trou est *confiné* par l'ordre antiferro, formant des états liés strictement localisés. Le rayon de localisation est d'ordre $(J/t)^{1/3}$. Ce confinement disparaît dès que l'on introduit un échange transverse de Heisenberg : la double paroi de Bloch créée par le mouvement du trou peut alors relaxer : le trou saute librement sur un même sous-réseau. Il est clair que la dynamique correspondante sera celle de l'échange : la largeur de la bande cohérente (si elle existe !) sera d'ordre J, pas t. (Il faut noter que ce déconfinement est automatique s'il existe un saut direct entre seconds voisins. Un tel saut est engendré dans le modèle de Hubbard lorsque l'on élimine les sites doublement occupés, avec une amplitude d'ordre J : le modèle t-J est qualitativement correct, mais quantitativement erroné).

Ces considérations générales ont été récemment étayées par une théorie microscopique fort intéressante due à Kane, Lee et Read, fondée sur le modèle simplifié t-J. Partant d'un état antiferromagnétique de Néel, la structure de spin est décrite dans le cadre d'une approximation de Holstein-Primakoff, à l'aide de magnons sur chacun des sites. En l'absence de trous, les fluctuations quantiques de ces magnons sont traitées en champ moyen, par une méthode classique de type Bogoliubov. On retrouve ainsi le spectre linéaire familier des magnons. Le trou est alors décrit comme un fermion *sans spin,* sautant d'un site au voisin avec création ou destruction d'un magnon. (C'est déjà une approximation, car l'effet des passages successifs du trou sur un même site est mal pris en compte). Dans ce modèle, le trou n'a pas de dynamique propre — il se déplace seulement via la self-énergie qui le couple aux excitations magnétiques : c'est la propagation du magnon qui pilote celle du trou !

La seconde approximation, cruciale, revient à ne considérer que les diagrammes sans croisement, c'est-à-dire où les magnons sont réabsorbés dans l'ordre où ils ont été émis. Le calcul est self-consistent dans la mesure où propagateur et self-énergie sont couplés, mais il est tronqué. Malgré celà, il exhibe clairement toute la physique du problème.

(i) Dans la limite d'Ising le propagateur est local (état incohérent). En l'absence d'échange on retrouve une bande continue rétrécie, avec une largeur légèrement différente de celle de Brinkman-Rice. (On trace facilement l'origine de l'erreur). Si on rétablit l'échange, le spectre du propagateur devient *discret :* c'est la signature des états liés confinés. Dans le cas réaliste où $J \ll t$, l'espacement de ces états discrets est d'ordre $(tJ^2)^{1/3}$, cohérent avec le rayon de localisation trouvé précédemment. Le poids d'un état donné dans le propagateur est d'ordre J/t. (Il est d'ordre 1 si $J \gg t$).

(ii) Un faible échange transverse, permettant la propagation des magnons, a deux effets distincts :

— D'une part il introduit une *dispersion* des états discrets : l'énergie dépend du vecteur d'onde, correspondant à un état de Bloch cohérent. A l'ordre le plus bas, cette dispersion correspond à un saut entre seconds voisins : l'énergie est minimale sur *toute* la surface de Fermi. Cette dégénérescence est levée aux ordres supérieurs : l'énergie est en fait minimale en milieu de zone, pour k_x, $k_y = \pm \pi/2$. Comme prévu, la largeur de cette bande cohérente est comparable à l'échange transverse.

— D'autre part l'échange transverse introduit des *satellites* dans le spectre : le trou mobile peut s'habiller d'un nombre quelconque de magnons. Ces satellites ont un espacement d'ordre J.

(iii) Dans le modèle réel de Heisenberg l'échange transverse est égal à l'échange longitudinal. Les satellites envahissent tout l'espacement entre états discrets et forment un continuum : c'est une manière d'exprimer le *déconfinement* par relaxation des spins ! On obtient ainsi une *bande incohérente* dont la largeur est d'ordre t. Seul peut survivre comme état cohérent discret l'état le plus bas, à condition que sa vitesse de groupe reste inférieure à la vitesse des magnons. (L'échelle d'énergie est dans les deux cas J : la condition est surement réalisée en bas de bande, peut-être dans toute la zone de Brillouin). Pour être significatif, ce mode discret doit avoir un poids fini : c'est le cas, malgré l'absence de gap dans le spectre des magnons.

Au total, cette théorie microscopique prédit pour le trou un continuum d'états incohérents sur une largeur d'ordre t. La partie inférieure de ce continuum, sur une bande de largeur J, « décolle » pour former un état cohérent discret, dont le poids est d'ordre J/t, la dispersion d'ordre J. Le problème est bien formulé et la théorie paraît fiable — il reste à voir dans quelle mesure on peut ignorer l'immense majorité des états incohérents. (En tout état de cause on doit avoir un changement de régime lorsque T est comparable à J).

Il est clair qu'une telle bande cohérente ne peut pas recevoir un nombre illimité de trous. Le remplissage δ maximum est vraisemblablement d'ordre J/t. L'origine de cette limitation n'est pas évidente : les trous étant localisés, on ne peut guère invoquer le recouvrement de leurs nuages de self-énergie. La contrainte est probablement d'ordre temporel.

5. *Densité de trous finie : phases spirales et superfluidité*

L'interaction trou-magnon peut renormaliser le trou, mais aussi le magnon. En particulier, elle peut induire une *condensation de Bose des magnons,* c'est-à-dire une rotation statique spontanée de l'ordre antiferromagnétique. C'est le cas des *phases spirales,* dans lesquelles l'aimantation de Néel alternée tourne dans un plan arbitraire, avec un vecteur d'onde orbital q. (A cette structure en hélice se superpose une petite aimantation locale, due au désalignement des deux sous-réseaux). Cette phase, prédite par Shraiman et Siggia, traduit une interaction dipolaire à longue portée entre les nuages de déformation de deux trous.

La description théorique en est aisée dans le cadre d'une approximation de champ moyen. La distortion locale des spins renormalise l'amplitude de saut entre deux sites voisins — donc l'énergie cinétique du trou. Le gain d'énergie correspondant est compensé par la perte d'énergie d'échange. En pratique, il faut utiliser l'énergie cinétique *renormalisée par les magnons* (étudiée au paragraphe précédent) : c'est là la faiblesse du calcul ! Pour une faible densité δ, les trous sont rassemblés en 4 vallées en centre de zone. On ne gagne d'énergie cinétique que si la déformation vide complètement certaines vallées. L'instabilité spirale apparaît alors si le couplage trou-magnon dépasse un seuil critique. Le vecteur d'onde q de la spirale est proportionnel à δ (on interpole ainsi entre antiferro et ferromagnétisme lorsque δ augmente). q est orienté dans la direction (10), puis (11) si l'on tient compte des interactions coulombiennes.

Cet ensemble de résultats est sans équivoque si l'on utilise l'amplitude de saut t initiale : le rapport J/t fournit le paramètre de contrôle qui pilote l'instabilité. (Il existe d'ailleurs plusieurs formulations équivalentes qui donnent les mêmes conclusions). La situation est beaucoup moins claire dès lors que l'on remplace t par sa valeur renormalisée d'ordre J : on perd ainsi le paramètre indépendant J/t et l'existence des phases spirales n'est plus assurée. C'est affaire de coefficients numériques qui demandent un calcul détaillé et précis : on ne peut pas conclure.

Un dernier effet du couplage trou-magnon est d'induire une *interaction attractive entre les trous par échange de magnons,* analogue à l'interaction par échange de phonons dans les métaux usuels. La géométrie est plus compliquée, mais la physique est la même. L'élément de matrice élémentaire $V_{k,k',q}$ se calcule facilement : il est singulier lorsque $q \to 0$, de nature dipolaire comme prévu. Cette interaction induite peut se traiter en champ moyen. Les deux contractions possibles correspondent respectivement à la déformation spirale et à un ordre supraconducteur. Ce dernier appariement peut être de symétrie « s » ou « d » (à l'ordre le plus bas les deux états sont dégénérés). Noter qu'un ordre « d » n'implique nullement un zéro du gap, puisque les vallées sont disjointes. On peut étudier la compétition des deux ordres : l'apparition d'une structure spirale s'oppose à la supraconductivité.

L'interaction précédente résulte d'une *rotation* de l'aimantation alternée sous l'effet du trou. On peut aussi imaginer une onde de densité de spin en couplage faible dont l'*amplitude* serait localement déformée par le trou : c'est le modèle dit « spin bag » préconisé par Schrieffer et son école. Deux trous interagissent alors via ces fluctuations d'amplitude — d'où une attraction qui peut conduire à un état supraconducteur. Il est clair que ces deux effets sont les deux volets d'un même mécanisme : on peut en faire la synthèse dans le cas d'un modèle de Hubbard. Les fluctuations *d'amplitude* sont les plus importantes lorsque l'interaction U est modérée, alors que les fluctuations *d'orientation* sont les seules à survivre lorsque U est très grand. On passe d'un régime à l'autre continuement.

Toute cette analyse repose en fin de compte sur la seule bande d'états cohérents renormalisés : il reste à voir si l'on peut vraiment ignorer les états incohérents, beaucoup plus nombreux ! La question devient critique si la concentration δ de trous augmente — c'est pourquoi on ne sait pas vraiment dessiner le diagramme d'états du modèle de Hubbard (ou du modèle *t-J*). Le problème reste très largement ouvert.

6. *Découplage de la charge et du spin : spinons et holons*

Les excitations élémentaires d'un antiferromagnétique sont des magnons définis sur une demi zone de Brillouin. Ces magnons sont les bosons de Goldstone liés à la rupture de la symétrie de rotation des spins — d'où l'absence de gap. Leur vitesse c lorsque $q \to 0$ s'obtient par un argument hydrodynamique très général (la rotation est conjuguée du moment cinétique) : c dépend de la susceptibilité et de la « raideur angulaire » de la structure.

Un magnon est une excitation de spin 1, liée au retournement d'un spin. En une dimension cette excitation peut se fragmenter en deux « parois de Bloch » *déconfinées :* ce sont les *spinons,* qui constituent la véritable excitation élémentaire du problème. Les spinons, de spin 1/2, définis sur une demi zone, ne peuvent se créer que par paires : leur vecteur d'onde est donc défini mod($\pi/2$). (Pour calculer le spectre d'un spinon unique il faut changer la parité du nombre de sites). Le déconfinement des spinons est un élément essentiel du problème, *qui disparait en deux dimensions :* lorsqu'on sépare un magnon en deux, on crée une chaine de spins désorientés par rapport aux rangées voisines, donc une énergie proportionnelle à la séparation. En ce cas les deux spinons restent liés : seul le magnon a une réalité physique.

La même discussion s'applique à un état singulet dimérisé. Les « magnons » correspondent alors au passage singulet-triplet (leur spectre a un gap). En une dimension ils se scindent en deux *spinons* de spin 1/2 (un spinon est ici un spin célibataire non apparié). En deux dimensions la séparation change l'ordonnancement des singulets sur les rangées voisines : il apparaît une énergie de confinement due aux fluctuations quantiques de la structure. Ce confinement est plus faible que dans l'état antiferromagnétique (où il apparaissait en champ moyen) — mais il suffit à lier les spinons.

La situation est différente pour un état RVB invariant par translation. En une dimension on sait que le spectre des excitations magnétiques n'a pas de gap, en vertu d'un théorème très général de Lieb, Shultz et Mattis pour des particules de spin demi-entier. On connait la solution exacte grâce à l'Ansatz de Bethe : pour une bande demi pleine il existe un magnon de spectre $\omega = J \mid \sin qa \mid \pi/2$. Faddeev et Takhtajan ont montré que ce magnon était en fait un cas particulier d'excitations magnétiques plus générales indicées par deux nombres quantiques, correspondant à deux *spinons* indépendants. Ces excitations forment un continuum dont le « magnon » est la borne inférieure.

Le spinon unique est un spin célibataire. Il est défini sur une demi zone de Brillouin (il saute de deux sites en deux sites), avec une densité d'états double (il faut faire deux tours pour revenir au point de départ). Pour obtenir son spectre, il faut changer la parité du nombre de sites et définir avec précision la quantité de mouvement. On obtient ainsi un spectre en $\cos qa$ qui s'annule en bord de zone.

La nouveauté intervient en deux dimensions : *les spinons ne sont pas confinés !* Puisque le fondamental est non dégénéré, la dissociation du magnon ne crée pas de paroi entre deux configurations distinctes : l'énergie sature lorsque la séparation augmente.(En fait les spinons se repoussent et la dissociation est automatique). Les spinons existent — mais leur spectre n'est pas évident (on ne sait même pas s'il a un gap).

Le déconfinement des spinons est fictif pour une bande demi pleine, puisque le fondamental est antiferromagnétique. Il devient en revanche essentiel en présence de trous qui peuvent stabiliser un état RVB. Très généralement un trou constitue une excitation élémentaire de charge 1 et de spin 1/2, obtenue en brisant une paire singulet. Comme pour le magnon on peut séparer l'absence de charge et le spin résiduel. Le trou se fractionne ainsi en un *spinon* (spin 1/2, charge 0) et un *holon* (charge 1 et spin 0). De nouveau ce déconfinement de la charge et du spin en deux dimensions est dû à l'invariance translationnelle du fondamental.

Le spectre des holons est contrôlé par l'énergie cinétique. En une dimension on retrouve le spectre de fermions libres (avec une faible réflexion de Bragg sur la surstructure dans les états antiferro et dimères). Le calcul est beaucoup moins évident en deux dimensions, car il faut tenir compte de la cohérence des différents chemins pour aller d'un point à un autre. La largeur de la bande de holons est certainement d'ordre t, mais la forme détaillée du spectre n'est pas claire.

La distribution statistique des spinons et des holons pour une densité de trous δ finie n'est pas entièrement évidente. En une dimension, l'ordonnancement des spins est défini indépendamment de l'état de charge : les spinons sont définis sur une zone de Brillouin *réduite* $(-k_F, +k_F)$, les holons ont un « niveau de Fermi » à $2k_F$ (ce sont des fermions sans spin). A partir de là on peut calculer toutes les fonctions de corrélation. En deux dimensions la situation est beaucoup plus incertaine :

— Existe-t-il une surface de Fermi des holons ? Où est-elle dans la zone de Brillouin ? Combien d'états enclot-elle ?

— Comment concilier le décompte du nombre de spinons avec un spectre nécessairement défini dans *toute* la zone de Brillouin ? Existe-t-il une « surface de Fermi » des spinons où leur énergie s'annule ?

Plus généralement, on doit tôt ou tard retomber sur un état normal lorsque la concentration δ (ou l'échange J) augmente : comment disparaît le déconfinement de la charge et du spin ? Ce déconfinement est-il dû à la condensation de Bose de paires singulet ? La transition est-elle brutale ? Toutes ces questions de fond sont pour l'instant sans réponse.

7. *Conclusion*

Ce cours a posé plus de questions qu'il n'en a résolues. Si le mouvement d'un trou unique dans un état antiferromagnétique est relativement bien compris, l'existence et les propriétés des phases RVB restent très spéculatives (on ne sait même pas si leur symétrie est la même que celle de l'état normal). Les théories de champ moyen évacuent d'emblée tous les problèmes de cohérence, et sont de ce fait redondantes (il y a trop d'états dans l'espace de Hilbert). Plus généralement, relier la structure singulet à une condensation de Bose de paires n'a rien d'évident ! Au niveau des excitations le déconfinement des spinons et des holons paraît raisonnable, mais leur distribution statistique dans la zone de Brillouin reste un mystère. Le verdict final serait un diagramme d'états du modèle de Hubbard, séparant clairement les états paramagnétiques normaux, les régions ferromagnétiques et antiferromagnétiques, d'éventuelles phases spirales — et surtout une éventuelle région RVB. Il faudrait alors comprendre le comportement à température finie et l'évolution vers un régime de moments localisés. On en est loin ! Un seul message est clair : *attention à ne pas transposer inconsidérément les propriétés des systèmes unidimensionnels en deux dimensions !*

P. N.

SÉMINAIRES

Les séminaires suivants ont été organisés en liaison étroite avec le thème du cours :

20 novembre, Dieter VOLLHARDT (Aix-La-Chapelle), « Gutzwiller-type wave functions for correlated fermions ».

27 novembre, Pascal LEDERER (Orsay), « Les phases de flux ».

4 décembre, Mireille LAVAGNA (CEN Grenoble), « Méthodes de champs auxiliaires dans les systèmes corrélés ».

11 décembre, Claire LHUILLIER (Université Pierre et Marie Curie), « Modèle de Hubbard et modèle t-J : l'apport des méthodes de Monte Carlo ».

18 décembre, Heinz SCHULZ (Physique des solides Orsay), « Parois de domaines dans un antiferromagnétique quantique ».

8 janvier, Benoit DOUCOT (CRTBT Grenoble), « Sur la stabilité du ferromagnétisme dans la limite U = ∞ du modèle de Hubbard ».

15 janvier, Jacques CONARD (CRSOCI Orleans), « Etude de la structure magnétique locale par RMN dans les Y Ba Cu O fluorés ».

22 janvier, Michel CYROT (Laboratoire Louis Néel, Grenoble), « Magnétisme et supraconductivité dans les matériaux à haut T_c. ».

ACTIVITÉS SCIENTIFIQUES

1. P. NOZIÈRES anime le groupe de Physique Théorique de l'Institut Laue Langevin à Grenoble. Ce groupe comprend une dizaine de physiciens confirmés qui y effectuent des séjours de durée limitée, de un à cinq ans, et qui travaillent dans des domaines très divers. En 1990-1991, l'activité portait sur les sujets suivants :

Supraconducteurs : Ansatz de Bethe pour les systèmes 1d (J. SOLYOM), Transfert de charge dans les matériaux à haut Tc (D. NUNEZ REGUEIRO). Propriétés des liquides de Luttinger (J. VOIT).

Liquides et systèmes désordonnés : Ordre orientationnel des verres bidimensionnels adsorbés (P. HOLDSWORTH), localisation dans les structures semiconductrices désordonnées (J. CHALKER).

Hélium 3 superfluide : Dynamique des parois A-B, réflexion d'Andreev (N. SCHOPHOL).

Vésicules colloidales : morphologie, fluctuations (B. FOURCADE)

Magnétisme : ordres complexes, effets de frustration (D. NUNEZ REGUEIRO, E. SHENDER).

Croissance cristalline : Interaction et stabilité des marches sur une surface vicinale (M. UWAHA).

L'activité personnelle de P. NOZIÈRES a porté sur deux thèmes principaux :

a) *Croissance cristalline*

Lorsqu'un solide est soumis à une contrainte uniaxiale, un interface plan avec la phase fondue est instable : au delà d'un seuil de contrainte une onde de fusion-cristallisation se développe spontanément. C'est l'instabilité dite de « Grinfeld ». Les implications expérimentales de cette instabilité ont été explorées en détail, en collaboration avec R. BOWLEY. Une simple surpression dans un récipient de volume fixé suffit à la créer. On peut la contrôler par un gradient thermique, le cas de l'hélium 4 superfluide étant cependant très particulier. Il semble que la dissipation à l'interface ne joue pas un rôle essentiel pour les matériaux normaux, alors qu'elle est cruciale dans un superfluide.

Publication

P. NOZIÈRES, « Solid surfaces : capillarity *vs* elasticity ». Colloque en l'honneur de R. DEFAY, Bruxelles (Springer Verlag).

b) *Ecoulement des suspensions*

Le travail entamé il y a deux ans a été mené à terme et rédigé. Comme en électrostatique, une moyenne volumique implique un développement multipolaire, nécessaire pour assurer une formulation macroscopique cohérente. Les termes supérieurs de ce développement, en général négligeables, deviennent essentiels lorsque le premier terme est nul par symétrie. On peut ainsi clarifier la notion de tenseur d'efforts macroscopique, et corriger une erreur antérieure sur le coefficient croisé qui couple la sédimentation à la convection. L'analogie avec les diélectriques de Lorentz est en fait très profonde (l'équivalent du vecteur « champ » est le tenseur d'effort). On peut rendre le problème local à condition de bien séparer sédimentation et convection. Ces développements sont à l'étude.

Publication

D. LHUILLIER, P. NOZIÈRES : « Spatial averaging of non homogeneous suspensions », soumis à Physica.

2. Outre cette activité centrée à Grenoble, un petit groupe travaille au Collège même, autour de D. SAINT JAMES. Ce groupe comprend Claude ASLANGUL (Professeur à l'Université Paris VI), Noëlle POTTIER (Professeur à l'Université Paris VII) et un jeune doctorant normalien, Marc BARTHELEMY. Le problème étudié est celui de la marche aléatoire sur des réseaux linéaires désordonnés. Dans certains cas le désordre peut modifier profondément la loi de diffusion : le théorème de la limite centrale est violé et il apparaît des corrélations à longue portée du type loi de Lévy. Ces cas anormaux remettent en question le problème de l'ergodicité et la validité du théorème de fluctuation-dissipation.

L'an dernier, l'activité avait porté sur les problèmes d'« automoyennage », et sur la marche « dirigée » (où la particule brownienne avance toujours dans le même sens). Cette étude a été poursuivie dans plusieurs directions :

1) La comparaison entre un régime de *potentiels* aléatoires et le cas des *forces* aléatoires a été élucidée. Dans le premier cas la diffusion est normale : la vitesse et le coefficient de diffusion sont bien définis. Le second cas est beaucoup plus délicat : en l'absence de force appliquée, le déplacement quadratique moyen aux grands temps varie comme $ln^4 t$, un résultat dû à Sinaï

que l'on peut expliquer par un argument qualitatif simple du type « loi d'Arrhenius ». Si la force appliquée est non nulle, il y a compétition entre l'entrainement et les fluctuations. Lorsque celles ci sont fortes, la particule se bloque dans des puits séparés entre lesquels le mouvement est convectif. Les puits sont exponentiellement rares, mais le temps de blocage est exponentiellement long — d'où le comportement anormal en « phases dynamiques ». Ce travail est en cours de publication à Physica A.

2) La généralisation à une marche générale non dirigée n'est pas évidente. Il semble qu'aux grands temps les retours en arrière jouent un rôle négligeable : on retombe sur la physique de la marche dirigée, avec un réseau différent et un temps de séjour sur les sites corrigé pour tenir compte des retours en arrière. Une démonstration véritablement convaincante de cette équivalence n'a jamais été fournie : le problème paraît difficile. Beaucoup plus modestement, on peut considérer un modèle continu, obtenu comme limite du modèle discret. Le problème est alors gouverné par une équation de Fokker-Planck que l'on peut résoudre par transformation de Fourier. On retrouve ainsi le comportement anormal de la marche dirigée et on peut en calculer les exposants explicitement.

3) La généralisation à des réseaux à plusieurs dimensions est un problème autrement ardu. On peut se demander si les comportements diffusifs anormaux existent encore. (L'augmentation du nombre de dimensions, donnant en quelque sorte davantage de possibilités à la particule d'échapper aux effets du désordre, pourrait restituer un mouvement brownien plus classique). Ce problème n'a été qu'effleuré, sur des cas particuliers qui ne sont pas vraiment significatifs. La diffusion sur un réseau de Bethe (arbre de Cayley) est déjà intéressante en l'absence de désordre : la polarisation de la marche au hasard se combine avec le « branchement » de la structure et peut conduire à une « localisation » où la dérive moyenne est bloquée. Au seuil on observe un « ralentissement critique » réminiscent d'une transition de phase. Ce résultat est en cours de publication à Europhysics Letters. Lorsque le réseau de Bethe est désordonné, on retrouve les comportements anormaux du système unidimensionnel, avec des coefficients renormalisés et un automoyennage plus systématique.

Le véritable réseau à deux dimensions (réseau carré par exemple) est plus délicat. On peut traiter le cas d'une marche « dirigée », où le marcheur se déplace toujours dans le même quadrant (vers le haut et la droite). On retrouve ainsi des comportements anormaux lorsque le désordre est singulier. Le point essentiel est que la diffusion anormale apparaît simultanément dans les deux directions, la frontière étant repoussée par rapport au cas unidimensionnel. De nouveau l'excursion dans la seconde dimension permet l'automoyennage.

Publications :

C. ASLANGUL, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Random walk on a one dimensional random medium », *Physica,* 164A, p. 52 (1990).

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Dynamical exponents for one-dimensional random-random directed walks », *J. Stat. Phys.,* 59, p. 11 (1990).

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Microscopic dynamical exponents for random-random directed walk on a one dimensional lattice with quenched disorder », *J. Stat. Phys.,* 61, p. 403 (1990).

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Exposants dynamiques pour une marche au hasard dirigée sur un réseau désordonné à une dimension ». Communication au 10e congrès de Physique Statistique de Paris (1990).

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Dynamical exponents for a one dimensional random-random directed walk », Communication au congrès du NATO Advanced Studies Institute, intitulé « Large scale molecular systems : quantum and stochastic aspects. Beyond the simple molecular structures ». Acqua Fredda di Maratea 1990. A paraître dans les proceedings édités par W. Gans, A. Blumen et A. Amann.

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Dynamical properties of a random walk in a one-dimensional random-medium ». A paraître dans Physica A.

C. ASLANGUL, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « One-dimensional motion in a biased random medium : random potentiel versus random force ». A paraître dans Physica A.

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Random walk on a disordered directed Bethe lattice ». Soumis pour publication au Journal of Statistical Physics.

C. ASLANGUL, N. POTTIER and D. SAINT-JAMES, « Quantum dissipation on a disordered lattice : a simple tight binding approach ». Adriatico Research Conference : Quantum fluctuations in mesoscopic and macroscopic systems. (Trieste 1990). A paraître chez *World Scientific.*

CONFÉRENCES DONNÉES PAR P. NOZIÈRES

Aussois, 27 juin 1990 : « Liquides et solides quantiques ».

Cargèse, 25 et 26 juillet 1990 : « Marches cristallines, facettes », « Transition rugueuse ».

Orsay, 29 Mars 1991 : Structure des surfaces : « Transition rugueuse et fusion de surface ».

Charges administratives

Outre sa participation au Conseil National des Programmes, P. NOZIERES a assuré la présidence du Groupe d'experts « GET 20 », chargé de l'habilitation des formations doctorales au plan national. La campagne d'habilitation 1991 a absorbé une bonne partie des mois d'hiver.

Distinctions

P. Nozières a été élu Associé étranger de la National Academy of Sciences des Etats-Unis.