

## Physique statistique

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

Cours : *Liquides de Fermi à une dimension : méthodes perturbatives et Ansatz de Bethe*

Cet enseignement est le prolongement de celui donné l'an dernier sur les liquides de Fermi fortement corrélés. L'accent était mis cette année sur le comportement « marginal » de certains systèmes, en particulier des liquides à une dimension qui présentent un comportement atypique au niveau de Fermi.

### 1. *Bilan théorique et expérimental*

Un liquide de Fermi « canonique » a une signature expérimentale claire :

— La distribution des électrons affleure à une *surface de Fermi* bien définie dans l'espace réciproque. Cette surface de Fermi est mesurable par photoémission angulaire ou par effet de Haas-van Alphen. Elle enferme un nombre d'états égal au nombre total des électrons (théorème de Luttinger).

— La constante de Hall en champ fort est liée au nombre de porteurs, et son signe distingue électrons et trous.

— La chaleur spécifique est linéaire en température et la susceptibilité constante.

— La densité d'états au niveau de Fermi est finie, d'où une caractéristique tunnel linéaire, une résistivité en  $T^2$ , un spectre Raman linéaire en fréquence, une loi de Korringa pour la relaxation des spins nucléaires. Tout ceci repose sur une hypothèse d'états de Bloch cohérents, avec une seule surface de discontinuité. Le comportement à basse température possède une seule échelle d'énergie, éventuellement réduite par les effets de corrélation (localisation, fluctuations de spin, etc.).

Face à ces prédictions, deux types de matériaux posent des problèmes majeurs :

— Les systèmes de « fermions lourds », où les électrons  $f$  d'ions lanthanides

ou actinides forment une bande très étroite hybridée à la bande de conduction.

— Les cuprates aujourd'hui à la mode, dont l'état normal est aussi étonnant que leur supraconductivité à haute température. La résistivité est *linéaire* en  $T$ . La caractéristique tunnel a une rupture de pente à  $T = 0$ , le spectre Raman a un fond continu constant. La RMN est extrêmement compliquée, fonction du dopage et apparemment sensible à des facteurs géométriques mal contrôlés. Alors que la photoémission suggère une surface de Fermi « canonique », l'effet Hall plaide pour l'ouverture d'un gap en milieu de bande. La situation est donc très confuse.

D'un point de vue théorique, une voie possible consiste à aménager le modèle de liquide de Fermi pour rendre compte de ces données expérimentales. A cet effet, on introduit une échelle d'énergie basse,  $T^*$ , qui renormalise les quasiparticules à basse température. Cette échelle basse est due au voisinage d'une instabilité qui varie d'un modèle à l'autre : ferromagnétisme, antiferromagnétisme, localisation par une transition de Mott. Le cours a fait un tour rapide de toutes ces tentatives. Elles marchent relativement bien pour les systèmes de fermions lourds (où on dispose de données beaucoup plus précises, surtout à basse température). Elles posent en revanche des problèmes pour les cuprates — malgré des similarités frappantes.

L'alternative est d'abandonner l'idée du liquide de Fermi — soit pour des modèles révolutionnaires du type « RVB », « phases de flux » etc., soit pour des modèles « marginaux » à la limite du modèle canonique. La majorité des données sur les cuprates semble bien expliquée par un modèle *phénoménologique* de type marginal, dû à Abrahams, Varma *et al.* Mais la justification de ce modèle reste mystérieuse, malgré des essais récents. Le seul cas clair est celui des systèmes à une dimension, que l'on sait traiter en détail. Ces systèmes présentent des singularités au niveau de Fermi — hélas ils ne correspondent pas à la réalité, et d'ailleurs ils ne sont pas « marginaux » au sens de Varma. Ils n'en constituent pas moins une référence fondamentale : c'est à eux que le cours est consacré.

Il a paru utile de rappeler au préalable, à titre de comparaison, quelques situations simples de liquides de Fermi « anormaux » pour lesquels on dispose d'une théorie fiable. Ces modèles fournissent un élément de comparaison aux modèles 1d, pas très réaliste, mais instructif : les approximations les plus élémentaires donnent parfois des résultats inattendus ! La liste n'est nullement exhaustive — elle évolue d'ailleurs très vite.

## 2. Liquides de Fermi avec une interaction de portée finie

Une portée finie peut modifier la physique profondément. Dans le modèle d'impureté d'Anderson, par exemple, elle renforce ou elle tue l'hybridation

avec la bande de conduction. Plus prosaïquement, une simple approximation de Hartree-Fock peut conduire à des résultats très bizarres, découverts récemment par Khodel et Shagynian. Qualitativement, la vitesse de Fermi peut devenir négative du fait des interactions : la distribution de Fermi est alors contradictoire, puisque les états pleins ont une énergie  $> \mu$ . Ce comportement « hérétique » est vraisemblablement irréalisable, mais il faut en être conscient.

Concrètement, on caractérise l'interaction par son intensité à l'origine  $U$  et par sa portée  $\sigma$  dans l'espace réciproque. Un grand  $\sigma$  signifie une interaction locale, absorbée dans la définition du potentiel chimique. La limite inverse  $\sigma \rightarrow 0$  implique une très longue portée spatiale : la minimisation de l'énergie fondamentale Hartree-Fock est alors immédiate. Lorsque  $U > 0$  elle conduit à une distribution  $n_k$  qui passe *continûment* de 1 à 0 dans un intervalle *fini*  $k_1 < k < k_2$ . Dans cette région intermédiaire, l'énergie de la quasiparticule,  $\varepsilon_k$ , est constante, égale au potentiel chimique  $\mu$ . Ce résultat très étrange se généralise facilement à température finie : le « palier » de  $\varepsilon_k$  est élargi sur une gamme de température d'ordre  $T$ . (Le comportement pour  $U < 0$  est tout aussi surprenant, puisque  $n_k$  conserve une discontinuité à température finie). Dans la pratique  $\sigma$  est fini et doit être comparé à la largeur du palier  $\delta = U/v_F$ . Lorsque  $\sigma < \delta$  le palier subsiste, un peu rétréci (avec un raccord tangentiel de  $\varepsilon_k$ ). Il disparaît lorsque  $\sigma > \delta$  : on retrouve le liquide de Fermi ordinaire. On construit ainsi un diagramme d'états dans le plan  $U, \sigma$ .

L'état de Khodel implique une densité d'états au niveau de Fermi d'ordre  $1/T$  : on s'attend à des propriétés physiques extraordinaires. En fait, assez bizarrement, la thermodynamique reste la même que pour le gaz idéal : chaleur spécifique, compressibilité, etc. La seule anomalie est la présence d'une entropie résiduelle à température nulle. Les difficultés apparaissent au niveau des propriétés de transport : les collisions entre quasiparticules sont en effet profondément affectées par l'existence du palier. En fait, on ne peut même pas parler de collisions. Chaque quasiparticule est hybridée avec des configurations *de même énergie* : les états se repoussent avec une séparation d'ordre  $U$ . L'approximation de Hartree-Fock n'a plus aucun sens et l'élargissement collisionnel devient l'ingrédient essentiel du problème. Pour l'instant le problème reste entièrement ouvert.

Cet état de Khodel « normal » paraît en fait peu réaliste, pour de multiples raisons. Dans le cadre d'une approximation de Hartree-Fock, il est nécessairement dû au terme d'échange de Fock.  $U > 0$  implique alors une *attraction* : il faut tenir compte de l'appariement supraconducteur. On généralise facilement le calcul BCS au cas  $\sigma \rightarrow 0$  : les quasiparticules conservent un palier, mais à énergie  $\Delta$  finie. On retrouve l'état normal à la température critique  $T_c = U/4$ , mais le palier a alors presque disparu : il n'y a plus rien de bien étrange ! L'éventualité d'un état de Khodel pour une *répulsion* repose sur des corrections de renormalisation difficilement contrôlables : elle reste très spéculative.

Dans un autre ordre d'idées, l'approximation de Hartree-Fock ignore l'effet d'écran. Celui-ci limite les régions de l'espace des phases accessibles il semble s'opposer à l'état de Khodel.

Au total, ce comportement atypique n'est pas démontré : il reste néanmoins une alternative qu'il faut connaître.

### 3. Comportement marginal près d'une impureté

Un liquide de Fermi « local » est caractérisé par un déphasage des électrons régulier au niveau de Fermi. L'exemple typique est celui d'une impureté magnétique de spin  $1/2$  (effet Kondo). A basse température l'impureté piège un électron de conduction pour former un singulet sans structure interne (mais légèrement polarisable, d'où une interaction locale). Ce complexe est un diffuseur standard pour les autres électrons de conduction. Alors que le comportement haute température est singulier, on retrouve la chaleur spécifique linéaire, la susceptibilité constante du liquide de Fermi lorsque  $T \rightarrow 0$ .

La situation est différente pour une impureté magnétique de spin  $S$  couplée à  $n$  canaux orbitaux dégénérés. Lorsque  $n < 2S$ , l'impureté est sous-écrantée. Elle se découple entièrement à basse température, laissant un spin résiduel libre et un liquide de Fermi. Si au contraire  $n > 2S$ , l'impureté est sur-écrantée et le point fixe de couplage fort est répulsif. En ce cas on doit nécessairement évoluer vers un couplage intermédiaire à basse température, avec des *exposants critiques* non triviaux pour les diverses quantités physiques. Ce régime très original échappe à tout calcul perturbatif (sauf pour les grands  $n$ ). Il a fallu attendre les solutions exactes fondées sur l'Ansatz de Bethe pour préciser ses propriétés. Les plus spectaculaires sont :

- Une entropie résiduelle  $S_0$  à  $T = 0$ .
- Une chaleur spécifique d'ordre  $T^{4/(n+2)}$  en champ nul.
- Une aimantation d'ordre  $H^{2/n}$  à température nulle.

Un corollaire est l'existence d'une température caractéristique  $T^*(H) \sim H^{1+2/n}$  en dessous de laquelle on perd l'entropie résiduelle. Le cas particulier  $S = 1/2$ ,  $n = 2$  est marginal : la chaleur spécifique varie comme  $T \text{Log} T$ , l'aimantation comme  $H \text{Log} H$ , l'entropie résiduelle vaut  $(\text{Log} 2)/2$ . On se rapproche du modèle de Varma *et al.*

Il reste à voir comment réaliser cette situation « multicanal ». Le plus naturel est d'invoquer la dégénérescence orbitale des métaux de transition. Hélas celle-ci conduit en général au cas trivial  $n = 2S$  (liquide de Fermi standard). On peut essayer de jouer sur l'effet du champ cristallin pour réduire le spin d'un singulet orbital : on se heurte alors à l'anisotropie des constantes d'échange. Le point fixe « anormal » est instable à cet égard et l'on retourne inexorablement au cas trivial. La solution a été trouvée récemment

dans un cadre différent par D.L. Cox, en inversant le rôle du spin et de l'orbite. Un ion uranium tétravalent dans un environnement cubique a comme état fondamental un doublet orbital non magnétique (état « E »). Ce doublet de nature quadrupolaire se comporte comme un « pseudospin » couplé aux états de même symétrie de la bande de conduction. L'indice de canal est alors le vrai spin, dont la dégénérescence est assurée (c'est le renversement du temps !). On réalise ainsi le cas marginal décrit plus haut.

Des expériences ont été menées récemment sur des alliages dilués  $U_xY_{1-x}Pd_3$ . Pour  $x = 0,1, 0,2$ , on trouve une chaleur spécifique en  $T \text{Log} T$  à basse température ; si l'on suppose une entropie du doublet  $\text{Log} 2$  à haute température, on en déduit une entropie résiduelle  $(\text{Log} 2)/2$  à  $T = 0$ . Ce comportement marginal est très encourageant, sans être pour autant totalement convaincant (l'explication des autres propriétés physiques est hasardeuse). Surtout, il n'est pas sûr que l'on puisse transposer à un alliage l'analyse menée pour une seule impureté : comme dans tous ces problèmes, on se heurte à un problème d'épuisement des électrons de conduction disponibles. Cette voie reste néanmoins intéressante et originale.

#### 4. Liquides de Fermi à une dimension : méthodes perturbatives

La surface de Fermi se réduit ici à deux points. Dans son voisinage, les particules ont une vitesse constante,  $\pm v_F$ . Les excitations de faible moment  $q$  ont toutes la même énergie  $|q|v_F$ . On peut les représenter en termes de fluctuations de densité pour chaque spin. Celles-ci se comportent comme un gaz de bosons indépendants, donnant une représentation *fidèle* des états faiblement excités (la vérification des règles de commutation n'est pas évidente). Un état physique donné est caractérisé par l'occupation de ces bosons et par le nombre de particules dans chaque canal (gauche-droite,  $\uparrow - \downarrow$ ).

L'interaction entre particules comprend plusieurs contributions :

— L'interaction  $g_4$  entre particules du même côté de la mer de Fermi, responsable au premier chef du déconfinement de la charge et du spin.

— La diffusion « en avant » ( $q$  petit) d'un électron gauche et d'un électron droit, d'amplitude  $g_2$ , créant une paire de bosons gauche et droit.  $g_2$  est responsable des singularités logarithmiques et du caractère marginal.

— La diffusion en arrière  $|q| \approx 2k_F$ , d'amplitude  $g_1$ , qui se renormalise à zéro pour un gaz répulsif.

A ceci il convient d'ajouter éventuellement la diffusion Umklapp  $g_3$  pour une bande demi-pleine. Ces interactions doivent être munies d'une coupure  $\Lambda$  pour assurer la convergence (à ne pas confondre avec la coupure liée à la non-linéarité de la bande).

#### 4a. Le modèle de Tomonaga-Luttinger

Il correspond à  $g_1 = 0$  : c'est le modèle asymptotique pour une répulsion. Les excitations élémentaires conduisent à un Hamiltonien bilinéaire diagonalisé par une transformation de Bogoliubov : elles consistent en fluctuations de charge et de spin, avec un spectre *linéaire* de vitesses respectives  $u_p$  et  $u_s$ , différentes de  $v_F$  du fait des interactions. Noter que  $u_p \neq u_s$  : la charge et le spin avancent à des vitesses différentes et doivent donc nécessairement se séparer au cours du temps. Le fondamental est le vide d'excitations, non trivial du fait de  $g_2$ . Si l'on exploite l'invariance par rotation des spins, il dépend de *trois* paramètres, les deux vitesses et un paramètre de couplage  $K_p$ , qui fixe la compressibilité du liquide de Fermi. Au lieu de calculer ces paramètres dans un cadre perturbatif, on peut les considérer comme phénoménologiques, ajustés sur une éventuelle solution exacte.

Les fonctions de corrélation intéressantes font intervenir la création ou la destruction d'une particule dans l'un ou l'autre des quatre canaux. Pour les calculer, il faut exprimer les opérateurs de fermions,  $\Psi(x)$ ,  $\Psi^*(x)$ , à l'aide des opérateurs de bosons. Cette « bosonisation » conduit à des exponentielles faciles à manipuler ; elle préserve les relations d'anticommutation de  $\Psi$ ,  $\Psi^*$ . On obtient ainsi la fonction de Green à une particule  $G(x, x')$  qui décroît à l'infini comme une puissance de la séparation  $(x-x')$ . Sa transformée de Fourier donne accès à la distribution des particules nues  $n_k$ . Celle-ci est *continue* au niveau de Fermi  $k = k_F$ , avec de nouveau une loi en puissance : le liquide de Fermi est franchement anormal et non pas marginal. On obtient de même les fonctions de corrélation de la charge ou du spin de vecteur d'onde  $q = 2k_F$ , statiques ou dynamiques, ou bien la fonction de corrélation des fluctuations supraconductrices. Toutes ont des exposants caractéristiques que l'on sait relier exactement à  $K_p$ . Ce modèle de Tomonaga-Luttinger est maîtrisé dans ses moindres détails.

#### 4b. Déconfinement de la charge et du spin

Il est inévitable dès lors que  $u_p \neq u_s$ . Pour mieux le comprendre, il est commode de considérer un gaz sur réseau avec de fortes corrélations locales antiferromagnétiques (modèle de Hubbard). Du fait de l'échange entre sites voisins, le *magnon* obtenu en retournant un spin peut se dissocier en deux parois de Bloch séparant des régions d'ordres antiferromagnétiques opposés : dans un tel *spinon* deux spins consécutifs sont parallèles et non trois. Si maintenant on supprime un électron, on crée un *trou* entre deux spins parallèles. Tant l'échange que le saut des particules peuvent dissocier ce trou en un spinon et un *holon*, trou entre deux spins opposés (n'affectant pas l'alternance des spins). Le spinon a un spin 1/2 et une charge 0, le holon un spin 0 et une charge 1. Un tel déconfinement est une caractéristique essentielle des systèmes à une dimension : le tout est de savoir s'il persiste en  $d = 2$ .

#### 4c. Diffusion en arrière, renormalisation

Le modèle de Tomonaga-Luttinger ignore  $g_1$  : on peut en tenir compte par une méthode de renormalisation. On réduit progressivement la largeur de la bande de conduction, en corrigeant au fur et à mesure les paramètres d'interaction. Pour le cas répulsif,  $g_1$  disparaît dans cette « renormalisation du pauvre » : on retrouve asymptotiquement le modèle de Tomonaga avec des paramètres corrigés. Pour une attraction, au contraire,  $g_1$  augmente : les particules forment des singulets et un gap apparaît dans le spectre des excitations de spin. La phénoménologie de ce cas limite est moins bien comprise que dans le cas répulsif. Dans l'ensemble, le diagramme d'états est néanmoins clair.

#### 5. L'Ansatz de Bethe : la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique

L'état d'une chaîne de spins  $1/2$  est entièrement caractérisé par les positions  $x_1 \dots x_N$  des spins  $\downarrow$ . Ceux-ci peuvent être considérés comme des bosons à cœur dur. L'Ansatz de Bethe repose alors sur une remarque très simple : en une dimension la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement entraîne la conservation *individuelle* de  $k_1$  et  $k_2$  dans la collision de deux particules, à un échange près. On peut donc construire une fonction d'onde asymptotique contenant deux termes avec *un* paramètre ajustable. Celui-ci permet de satisfaire l'équation de Schrödinger partout si l'interaction se limite aux *premiers* voisins. Si en outre les collisions à trois corps se factorisent en collisions binaires indépendantes, la propriété se généralise. : la fonction d'onde globale est une combinaison d'ondes planes de même vecteurs d'onde  $k_1 \dots k_N$ , distribués entre les particules selon toutes les permutations possibles. L'interaction se traduit par un simple déphasage entre deux quadrants contigus, affectant la quantification des  $k$ . Ceux-ci, à leur tour, fixent toutes les quantités physiques.

Concrètement, on obtient l'expression explicite du déphasage en se limitant à deux magnons. Le problème est déjà très riche : pour un couplage ferromagnétique on voit apparaître des solutions complexes correspondant à des états liés. La quantification intervient si l'on considère une chaîne fermée de  $N$  sites. La seule difficulté est le *décompte* des états. On vérifie facilement que la procédure de Bethe donne des états de spin saturé,  $S_z = S$ , dès lors que tous les  $k_i$  sont non nuls (et différents). Il est néanmoins facile de rater des états un peu limites : l'exemple de 2 magnons sur une chaîne de 4 sites est à cet égard instructif !

La structure de la fonction d'onde apparaît clairement si l'on ajoute un troisième magnon. Les nombres quantiques, alternativement entiers et demi-entiers, dépendent de la parité du nombre de magnons  $N \downarrow$ . Chaque vecteur d'onde  $k_i$  dépend de tous les autres par l'intermédiaire d'un déphasage  $\theta(k_i, k_j)$

connu. Il est commode de passer à une formulation algébrique en remplaçant les  $k$  par des « rapidités »  $\lambda$  : celles-ci obéissent à un jeu d'équations algébriques couplées, avec des solutions réelles (états libres) ou complexes (états liés).

Les états réels sont relativement simples. Les  $N \downarrow$  rapidités sont à choisir parmi  $N \uparrow$  valeurs possibles. Si le nombre de sites  $N$  est pair, le fondamental en champ nul correspond à  $N \uparrow = N \downarrow = N/2$  : le choix est unique. Pour une chaîne infinie la « densité d'états »  $\rho(\lambda)$  (continue) obéit à une équation intégrale linéaire soluble par transformation de Fourier : on obtient l'énergie fondamentale. L'excitation d'un magnon implique une rapidité de moins et un état disponible de plus. Il y a donc deux trous dans la distribution des rapidités : chaque trou correspond à un *spinon*. Le *déconfinement* des magnons devient ainsi évident. On trouve aisément le spectre du spinon élémentaire en calculant séparément son énergie  $\varepsilon$  et sa quantité de mouvement  $q$  (noter que  $q \neq k$ ). Comme prévu,  $q$  est défini dans une demi-zone de Brillouin,  $(-\pi/2, +\pi/2)$ . Bien entendu, ce résultat est modifié si l'on introduit d'autres magnons (densité de trous finie) : cela traduit simplement l'interaction entre les magnons, calculable si leur nombre est petit. Un cas particulier est le fondamental sous aimantation finie :  $M = N \uparrow - N \downarrow \neq 0$ . Les rapidités occupées sont alors les plus basses possibles — mais l'équation de fermeture est du type Wiener-Hopf, plus délicate à résoudre. La susceptibilité en champ faible est finie, mais l'énergie  $E(M)$  est singulière en  $M = 0$  — un résultat déjà pressenti dans un cadre perturbatif.

Les états complexes se traitent en principe de la même manière, mais l'analyse est plus délicate. Pour une chaîne infinie on montre facilement que les racines  $\lambda$  se groupent en « strings » ayant une même partie réelle  $\lambda_r$ , séparées de  $i$  les unes des autres, symétriques par rapport à l'axe réel. Une string d'ordre  $n$  comprend  $n$  racines « occupées », coiffées par deux racines « vides ». Les états se classent en « configurations », comprenant  $\nu_n$  strings d'ordre  $n$ . Les parties réelles obéissent à des équations de fermeture que l'on sait écrire explicitement. On peut ainsi déterminer le nombre  $P_n$  de strings possibles (fonction de tous les  $\nu_m$ ). Le décompte des états se fait en comparant  $\nu_n$  à  $P_n$ . En principe, on peut ainsi vérifier que le nombre total d'états de la chaîne est  $2^N$ .

En toute rigueur, cette analyse est discutable dans la limite thermodynamique, lorsque la densité de strings est finie. Une analyse plus fine, due à Destri et Lowenstein et à Woynarovich, suggère l'existence de strings d'ordre 1 et 2 seulement, complétées par des racines atypiques (paires « larges » ou quadruplets). Ces complications n'affectent pas les excitations élémentaires, ni apparemment le décompte des états.

Il est facile de calculer l'énergie et la quantité de mouvement d'une string d'ordre supérieur,  $n \geq 2$ . Cette énergie comprend une partie directe et une

partie indirecte (via l'interaction avec les autres racines). Ces deux parties se compensent *exactement* — un résultat très surprenant. Le seul effet des strings complexes est donc d'*ouvrir* des états nouveaux aux racines réelles : elles ne contribuent pas à l'énergie. On peut ainsi construire des excitations élémentaires de type singulet, associant une string d'ordre 2 à deux trous réels (les deux spinons sont dans un état singulet).

En principe la méthode de Bethe se généralise à température finie. Le décompte des états permet de calculer une entropie, donc une énergie libre  $F$ . On détermine la probabilité d'occupation des rapidités en minimisant  $F$ . La résolution de ces équations non linéaires est en fait très compliquée et ne peut guère être que numérique : le problème n'a pas été abordé dans le cadre de ce cours.

#### 6. Application de l'Ansatz de Bethe au modèle de Hubbard

En ce cas il faut préciser non seulement la position des particules sur le réseau, mais aussi leur *spin*. Pour un quadrant donné de l'espace des phases, l'Ansatz de Bethe introduit une amplitude  $A(P,Q)$  qui dépend de *deux* permutations, celle  $P$  des vecteurs d'onde orbitaux  $k_i$  (déjà présente pour la chaîne magnétique) et celle  $Q$  des spins. La fonction d'onde dans les autres quadrants résulte de l'antisymétrie de  $\Delta$ . Encore faut-il formuler le problème d'une manière qui incorpore d'emblée cette antisymétrie. Pour ce faire, le langage « naturel » qui consiste à permuter deux particules n'est pas adapté : il vaut mieux permuter deux *vecteurs d'onde*, quel que soit l'ordre dans lequel les particules sont rangées sur la chaîne. L'échange des spins est alors caractérisé par une « matrice de collision » binaire  $2 \times 2$ . L'amplitude  $A$  est indexée par l'ordre dans lequel vecteurs d'onde et spins apparaissent sur la chaîne de droite à gauche, indépendamment de la numérotation des particules.

Connaissant la matrice de collision binaire, on peut de proche en proche construire l'amplitude  $A(P,Q)$  pour une permutation  $P$  quelconque partant d'une permutation de référence  $P = 1$ . Encore faut-il que le résultat ne dépende pas du chemin suivi. Ceci impose des contraintes à la matrice de collision binaire, dites « conditions de Yang-Baxter », qui limitent le domaine d'application de l'Ansatz de Bethe. Ces conditions sont satisfaites par le modèle de Hubbard. La méthode de Bethe marche donc, mais sa mise en œuvre est loin d'être triviale. L'analyse combinatoire sous-jacente est due à Gaudin et à Lieb et Wu : elle n'a pas été abordée dans le cours. Au bout du compte elle conduit à des recettes de calcul très simples qui permettent de dégager la physique du problème.

Concrètement, on considère  $N$  particules sur  $N_L$  sites ;  $N \downarrow$  particules ont le spin  $\downarrow$ ,  $N \uparrow = N - N \downarrow$  ont le spin  $\uparrow$ . L'état est caractérisé par  $N$  vecteurs

d'onde  $k_i$  et par  $N \downarrow$  rapidités  $\Lambda_\alpha$ . Ces quantités obéissent à un jeu d'équations non linéaires couplées, paramétrisées par des nombres quantiques entiers ou demi-entiers selon les parités de  $N$  et  $N \downarrow$ . Les quantités physiques, énergie ou quantité de mouvement, dépendent seulement des  $k_i$ .

Soit  $U$  l'interaction locale des fermions. Les limites  $U \rightarrow 0$  et  $U \rightarrow \infty$  sont simples. En couplage fort, les rapidités n'interviennent pas à l'ordre le plus bas : on a un système de fermions « sans spin », comme prévu. La distribution des  $k$  affleure à  $2k_F$ , les états de spin sont dégénérés. A l'ordre suivant il apparaît un échange magnétique entre particules voisines, défini sur un réseau « comprimé » de  $N$  sites. L'intensité  $J_{\text{eff}}$  de cet échange se réduit au superéchange d'Anderson pour une bande demi-pleine,  $N = N_L$ . En présence de trous,  $J_{\text{eff}}$  diminue et devient d'ordre  $n^3$  pour  $n = N/N_L \rightarrow 0$ . (On peut d'ailleurs pousser le développement en  $1/U$  plus loin). Paradoxalement, la limite inverse  $U \rightarrow 0$  est beaucoup plus singulière : il faut se donner du mal pour retrouver le gaz de Fermi idéal.

De nouveau l'état fondamental est caractérisé par des densités continues  $\rho(k)$  et  $\sigma(\Lambda)$  qui satisfont des équations intégrales linéaires. En champ nul, on peut éliminer les rapidités et construire une équation fermée pour  $\rho(k)$  dont le noyau dépend de  $U$ . Ce langage est très adapté aux calculs de perturbation, en particulier dans la limite  $U \rightarrow 0$  où le noyau est très localisé. En revanche, il se prête mal aux couplages intermédiaires. On peut obtenir une solution analytique exacte pour la bande demi-pleine  $n = 1$  en éliminant  $\sigma$  au lieu de  $\rho$  : on vérifie ainsi que le fondamental évolue continûment en fonction de  $U$ . En présence de trous,  $n < 1$ , on n'échappe pas à une solution numérique, d'ailleurs sans difficulté majeure. Cette solution exacte montre clairement les faiblesses des méthodes approchées traditionnelles, en particulier de l'approximation de Gutzwiller.

Il est instructif d'examiner le voisinage du demi remplissage. On calcule facilement le potentiel chimique  $\mu$ . En exploitant la symétrie électron-trou du modèle de Hubbard, on en déduit l'existence d'une *discontinuité* de  $\mu$  pour  $n = 1$ . Cette discontinuité traduit la présence d'un gap  $\Delta$  dans le spectre des excitations élémentaires : c'est le signe d'un *isolant de Mott*, présent quelque soit  $U$ . En prime, on a l'expression précise de  $\Delta(U)$ . En couplage fort on trouve comme prévu  $\Delta = U$ . En revanche,  $\Delta$  est exponentiellement petit en couplage faible, foncièrement non analytique (analogue à la température critique d'un supraconducteur). On obtient de même la compressibilité du gaz. Elle est toujours nulle pour  $n = 1$  ; elle devient finie en présence de trous, très vite lorsque  $U$  est petit. En fait on comprend ainsi le caractère singulier de la limite  $U \rightarrow 0$  : le gaz idéal se raccorde à l'isolant de Mott sur une gamme de densité très étroite,  $(1 - n) \approx \Delta/t$ , où  $t$  est la largeur de bande initiale. Cette « queue » du système faiblement couplé est omniprésente.

On peut aussi calculer le fondamental en champ. C'est plus difficile car la

distribution des rapidités ne s'étend pas jusqu'à l'infini. En champ faible on obtient la susceptibilité, analytiquement pour une bande demi-pleine, numériquement dans les autres cas. Elle interpole régulièrement entre la susceptibilité de Pauli pour  $U = 0$  et celle d'une chaîne de Heisenberg pour  $U = \infty$ . En champ fort il faut recourir au calcul numérique : de nouveau l'énergie fondamentale n'est pas une fonction analytique de l'aimantation  $M$ .

Les résultats les plus intéressants concernent les excitations élémentaires. Un spinon correspond à un trou dans la distribution des rapidités  $\Lambda$ , un holon à un trou dans la distribution des  $k$ . On vérifie facilement que le retournement d'un spin (« magnon ») entraîne l'apparition de deux spinons, alors que la suppression d'une particule (« trou ») implique un spinon *et* un holon. Comme précédemment, l'introduction d'un trou modifie tous les autres  $k, \Lambda$  : l'énergie du trou est corrigée en conséquence. Les calculs peuvent être menés analytiquement pour une bande demi-pleine, ou pour un  $n$  quelconque dans la limite des petits ou des grands  $U$ . Dans le cas le plus général ils sont numériques.

Le spectre du holon est défini dans toute la zone de Brillouin. Le niveau de Fermi correspond à un moment  $q = 2k_F$ , avec une énergie  $-\mu$  liée au potentiel chimique. (En calculant l'énergie  $\varepsilon_h$  et le moment  $q$ , il faut faire attention à recalculer la borne supérieure des  $k$  occupés). Au voisinage de ce niveau de Fermi, la vitesse des holons,  $u_p = -\partial\varepsilon_h/\partial q$ , n'est autre que la vitesse des fluctuations de charge du calcul perturbatif. Dans la limite des grands  $U$ , le spectre des holons est celui de fermions sans spin avec une vitesse  $u_p = 2t \sin 2k_F$ . Lorsque  $U$  est petit, le spectre  $\varepsilon_h(q)$  a une forme inattendue et  $u_p$  se réduit à la vitesse de Fermi  $v_F = 2t \sin k_F$ , comme prévu. Quel que soit  $U$ , la vitesse  $u_p$  est nulle à la fois pour  $n = 0$  et pour  $n = 1$ . Ce dernier cas est très singulier lorsque  $U$  est petit :  $u_p$  chute brutalement sur une gamme de densité  $1 - n \approx \Delta/t$ . La densité d'états des holons est renforcée en conséquence.

Le spectre des spinons se calcule de la même manière. Il est défini sur une zone de Brillouin réduite ( $-k_F, +k_F$ ), correspondant au réseau comprimé de  $N$  sites. L'énergie du spinon est nulle « en bord de zone ». On la calcule explicitement pour  $U$  petit (elle est d'échelle  $t$ ) et pour  $U$  grand (elle est d'échelle  $J_{\text{eff}}$ ). On en déduit la vitesse des spinons  $u_\sigma = -\partial\varepsilon_\sigma/\partial q$  pour  $q = k_F$ , qui n'est autre que la vitesse des fluctuations de spin du calcul perturbatif. Contrairement à  $u_p$ ,  $u_\sigma$  reste fini lorsque  $n = 1$ . En revanche,  $u_\sigma$  est singulier près de  $n = 0$  (d'ordre  $n$  si  $U \equiv 0$  mais d'ordre  $n^2$  dès que  $U \neq 0$  : le vrai paramètre perturbatif est  $U/v_F$ ). A noter aussi l'existence d'une pente finie de  $u_\sigma(n)$  pour  $n = 1$  : l'ouverture du gap de Mott induit un couplage spinon-holon.

Connaissant les spectres  $\varepsilon_\sigma(q)$  et  $\varepsilon_h(q)$  des spinons et holons, on peut construire un continuum « spinon-holon » de moment total  $q_\sigma + q_h = q$ . La

borne inférieure de ce continuum est  $E_{\min}(q)$ . Le déconfinement signifie l'absence d'état lié en dessous de  $E_{\min}$  — une propriété qui n'est jamais mise en doute. On peut ici la vérifier sur pièce dans le cas limite  $U = 0$ , pour lequel l'énergie du trou,  $\varepsilon_t$ , est simplement  $2t \cos q$ . Contre toute attente, on constate que  $\varepsilon_t < E_{\min}$  : *spinon et holon restent liés*. Cette liaison disparaît au voisinage du niveau de Fermi où  $\varepsilon_t$  et  $E_{\min}$  ont la même pente : la dissociation est alors marginale (le trou est le seuil inférieur du continuum). En réalité, la dissociation intervient quand même, mais à un ordre supérieur. On vérifie facilement que  $\varepsilon_t$  est le seuil inférieur des configurations à *trois* spinons, de spin total  $1/2$  : le déconfinement n'est pas si simple !

L'Ansatz de Bethe ne permet pas de calculer les fonctions de corrélation. Pour surmonter ce handicap, il faut revenir à la phénoménologie du modèle de Tomonaga-Luttinger. Celui-ci dépend de trois paramètres,  $u_\sigma$ ,  $u_\rho$  déjà calculés, et  $K_\rho$  déduit de la compressibilité. L'Ansatz de Bethe donne la valeur exacte de ces trois paramètres pour toutes valeurs de  $n, U$ . Connaissant  $K_\rho$  on obtient tous les exposants critiques : le problème est entièrement résolu. En pratique  $K_\rho$  est égal à  $1/2$  quel que soit  $U$  lorsque  $n = 0$  ou  $1$ . Pour  $U$  petit il rejoint la valeur triviale  $K_\rho = 1$  dès qu'on s'éloigne de ces limites, avec un comportement très singulier. Pour  $U$  grand l'évolution est douce ( $K_\rho = 1/2$  quel que soit  $n$  pour  $U \rightarrow \infty$ ).

Le problème de la chaîne de Hubbard est ainsi entièrement résolu - un véritable tour de force ! Mais la solution reste limitée à des problèmes très spécifiques. Bien entendu on ne sait rien faire si l'on ajoute une interaction entre premiers voisins, ou si l'on considère deux chaînes couplées. Même dans le cadre plus restreint d'un modèle  $t$ - $J$ , la méthode de Bethe marche seulement pour une valeur donnée de  $J/t$  (liée à une supersymétrie cachée). L'Ansatz de Bethe n'est donc pas une panacée : il a surtout une valeur indicative et doit être épaulé par une analyse perturbative traditionnelle.

Toutes les leçons traitant des systèmes à une dimension (perturbations et Ansatz de Bethe) ont donné lieu à des notes de cours très détaillées distribuées à l'auditoire.

*Cours donné à l'Université de Leyde dans le cadre de la Maison Descartes d'Amsterdam : Anomalous Fermi liquids*

Ces quelques leçons ont développé certains points du cours donné à Paris, en particulier l'effet Kondo multicanal (stabilité par rapport aux anisotropies de spin et de canal, observabilité de l'effet Kondo quadrupolaire). Le problème du déconfinement spinon-holon a été examiné en détail : influence des fluctuations quantiques, déconfinement pour deux chaînes couplées (toujours spéculatif). D'autres possibilités de comportement marginal ont été brièvement évoquées, par exemple l'autopiégeage de particules lourdes.

P. N.

## SÉMINAIRES

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

Mardi 19 novembre, A.S. ALEXANDROV, Engineering Physics Institute, Moscou, « Polaronic effects in high  $T_c$  superconductors.

Mardi 26 novembre, J.B. ZUBER, Physique Théorique Saclay, « Introduction à l'invariance conforme ».

Mardi 3 décembre, J. VOIT, ILL, Grenoble, « Le modèle de Hubbard unidimensionnel avec interaction entre premiers voisins ».

Mardi 10 décembre, H.J. SCHULZ, Physique des Solides, Orsay, « Localisation des fermions unidimensionnels en interaction »

## 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. Le groupe traverse une période difficile liée aux sévères contraintes budgétaires imposées par la réparation du réacteur- mais la qualité et l'enthousiasme des jeunes ne sont pas affectés.

En 1991-1992 l'activité portait sur les sujets suivants :

*Systèmes à une dimension* : liquide de Tomonaga-Luttinger, modèle de Hubbard avec interaction entre premiers voisins (J. VOIT). Structures incommensurables, solitons, défauts (S. BRAZOVSKI).

*Liquides de Fermi fortement corrélés, impuretés magnétiques* : amélioration des méthodes d'intégration fonctionnelle (N. SCHOPHOL). Supraconducteurs à haut  $T_c$  (J. WHEATLEY).

*Hélium 3 superfluide* : Dynamique des parois, tourbillons (N. SCHOPHOL).

*Croissance cristalline* : instabilités cellulaires, dendrites. Croissance des eutectiques, hiérarchie des bifurcations et ruptures de symétrie (C. MISBAH, A. VALANCE).

*Physique des membranes* : morphologie des vésicules (B. FOURCADE). Fluctuations thermiques et instabilités (J. PALMERI).

En outre une réflexion sur le traitement des données expérimentales a été démarrée par G. ICHE.

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

a) *Physique des interfaces et croissance cristalline*

L'influence des efforts élastiques de surface a été précisée. Pour un solide normal ces efforts ne sont sensibles qu'à petite échelle, pour un profil de croissance de vecteur d'onde  $k$  atomique. (La déformation de volume résultante corrige l'énergie de surface, qui devient une fonction de  $k$ ). La situation est très différente pour un cristal liquide qui ne résiste pas au cisaillement : l'élasticité de surface est alors déterminante.

Dans un autre ordre d'idées, la stabilité d'un interface en croissance pose toujours problème. Une simple croissance de Frank avec une mobilité anisotrope  $\mu(\theta)$  peut conduire à des points anguleux et à un « pseudofacettage ». La stabilité de ces structures n'est pas claire. De même la compétition entre l'instabilité de Kardar, Parisi, Zhang et la transition rugueuse repose sur une analyse de perturbations quelque peu ambiguë : ce point est à l'étude.

*Liquides de Fermi anormaux*

L'une des voies explorées a été l'état de Khodel-Shagynian dû à un changement de signe de la vitesse de Fermi. Cet état est réalisé lorsque l'interaction est localisée dans l'espace réciproque. Les résultats sont décrits en détail dans le compte rendu du cours.

L'effet Kondo multicanal est une autre source possible de comportement anormal, prédite avec A. BLANDIN il y a plus de dix ans. Cette question redevenant d'actualité, un certain nombre de problèmes de stabilité ont été précisés. En particulier l'influence d'une anisotropie d'échange pour une impureté de spin  $\geq 1$  a été élucidée. La renormalisation engendre une *énergie d'anisotropie locale* qui lève la dégénérescence des  $(2s + 1)$  états de spin. Selon les paramètres le fondamental est un singulet ou un doublet : à basse température on évolue vers une impureté non magnétique ou vers un spin  $1/2$ . Un certain nombre de résultats récents attribués à l'effet Kondo résultent en fait de cette anisotropie induite.

Actuellement deux voies sont en progrès. L'une concerne le déconfinement spinon-holon pour *deux* chaînes parallèles. L'interaction entre chaînes semble créer un potentiel croissant linéairement avec la distance qui interdit la dissociation. Pour élucider l'effet des fluctuations, on peut s'appuyer sur un traitement perturbatif de renormalisation : le reconfinement signifierait un gap dans les excitations de spin. Des résultats préliminaires existent dans la littérature. Une étude systématique de ces deux chaînes couplées est souhaitable.

L'autre voie, plus spéculative, concerne l'autopiégeage de porteurs lourds couplés à une bande légère. Le spin est ici sans importance : l'hamiltonien modèle est très simple (modèle de Hubbard avec une bande étroite pour les spins  $\downarrow$ ). On sait qu'une particule lourde unique peut s'autopiéger par effet de catastrophe infrarouge (analogue aux exposants anormaux des spectres X). La mobilité décroît alors à basse température comme une puissance  $T^n$  où  $n$  dépend du couplage. Que devient cette anomalie pour un gaz de particules lourdes ? En l'absence d'états cohérents existe-t-il une surface de Fermi ? Ces questions restent ouvertes.

### *Publications*

D. LHUILLIER, P. NOZIÈRES, Volume averaging of slightly inhomogeneous suspensions, *Physica A*181, 427 (1992).

P. NOZIÈRES, Properties of Fermi liquids with a finite range interaction, *Journal de Physique I*, 2, 443 (1992).

R.M. BOWLEY, P. NOZIÈRES, The effect of heat currents on the stability of liquid solid interfaces, *Journal de physique I*, 2, 433 (1992).

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, et Noëlle POTTIER, Professeur à l'Université Paris VII. Un jeune doctorant normalien, Marc BARTHELEMY, a soutenu sa thèse de Doctorat en février 1992 et est aujourd'hui au CEA. Le travail est mené en collaboration avec un chercheur de l'Université Charles à Prague.

Ce groupe se consacre à l'étude des problèmes de marche aléatoire sur des réseaux linéaires. Derrière cette question se profile celle du théorème de la limite centrale et de sa validité.

### *a) Marche aléatoire sur une chaîne asymétrique en présence d'un centre attractif piégeant*

Nous avons étudié dans un modèle à une dimension deux aspects différents du piégeage par un centre attractif situé à l'origine de la chaîne. C'est un modèle qui peut être intéressant pour décrire le transfert d'énergie dans une molécule photosynthétique. Dans un tel système, un arrangement typique est en effet constitué par un piège (le centre de réaction) entouré par un certain nombre de sites (les molécules-antennes de chlorophylle). Dans ce contexte, il est intéressant de calculer la quantité d'énergie conservée dans la chaîne (proportionnelle à l'intensité de fluorescence) ainsi que le temps de vie de la particule sur la chaîne.

Nous avons tout d'abord considéré une chaîne désordonnée et un piège d'énergie parfaitement déterminée. La probabilité moyenne de présence de la particule à son point de départ décroît alors selon une loi en puissance du temps : le désordre ralentit le mouvement, puisqu'en l'absence de désordre, la décroissance de la probabilité est exponentielle [6], [C1, 3].

Nous avons ensuite étudié le cas où, sur une chaîne ordonnée, l'énergie du piège est modulée aléatoirement dans le temps. La dynamique est dans ce cas le résultat d'une compétition entre le taux et l'amplitude des fluctuations de l'énergie du piège [7], [C1, 3].

b) *Marche au hasard dans un milieu aléatoire avec des corrélations*

Dans les études précédentes, les taux de transfert de la particule sur le réseau étaient considérés comme des variables aléatoires indépendantes, hypothèse simplificatrice qui n'est pas totalement satisfaite d'un point de vue physique. Nous avons donc cherché à voir dans quelle mesure les phases dynamiques anormales sont stables par rapport à la présence de corrélations dans le taux de transfert.

Lorsque la construction du réseau se fait suivant un processus de Markov, les taux de transfert sont exponentiellement corrélés et la phase de vitesse anormale persiste [8].

Dans un autre modèle, nous supposons que la chaîne est constituée de segments successifs de longueurs aléatoires. Les taux de transferts sont identiques à l'intérieur d'un même segment, mais statistiquement indépendants d'un segment à l'autre. Ce modèle permet de traiter différents types de corrélations et en particulier d'introduire des corrélations à longue portée (lorsque la longueur moyenne des segments considérés diverge). Dans ce cas, les exposants caractérisant le mouvement de la particule peuvent être modifiés et ce mouvement peut même redevenir normal [9].

#### PUBLICATIONS

1) C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Dynamical properties of a random walk in a one-dimensional random medium », *Physica*, 171A, 47 (1991).

2) C. ASLANGUL, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « One-dimensional motion in a biased random medium : random potential versus random force », *Physica*, 174A, 272 (1991).

3) C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Random walks on biased Bethe lattices », *Europhys. Lett.*, 15, 251 (1991).

4) C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Random walk on a disordered directed Bethe lattice », *J. Stat. Phys.*, 65, 695 (1991).

5) C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Two-dimensional random-random walks : dynamical exponents in a quenched directed model », *J. Stat. Phys.*, 65, 673 (1991).

6) C. ASLANGUL, N. POTTIER, P. CHVOSTA, D. SAINT-JAMES et L. SKALA, « Random-random walk on an asymmetric chain with a trapping attractive center », accepté pour publication à *J. Stat. Phys.*

7) P. CHVOSTA, C. ASLANGUL, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Dynamics of excitation in systems with a randomly modulated decay channel », accepté pour publication à *Physica A*.

8) C. ASLANGUL, P. CHVOSTA, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Random-random walks : stability of dynamical phases against exponential correlations in a quenched directed model », accepté pour publications à *Europhys. Lett.*

9) C. ASLANGUL, N. POTTIER, P. CHVOSTA, D. SAINT-JAMES, « Directed random walk with spatially correlated random transfer rates », Soumis à *Phys. Rev. A*

#### COMMUNICATIONS À DES CONGRÈS

C1. Diffusion with a randomly modulated trap.

P. CHVOSTA, C. ASLANGUL, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « Douzième Rencontre de Physique Statistique » (Paris, 1992).

C2. Exact results for random walks in the presence of a random force.

C. ASLANGUL, M. BARTHELEMY, N. POTTIER et D. SAINT-JAMES, « 18th International conference on Statistical Physics » (Berlin, 1992).

C3. Random walk on a chain in the presence of a trap : effect of disorder in the chain and of a stochastic modulation of the trap.

C. ASLANGUL, P. CHVOSTA, N. POTTIER, D. SAINT-JAMES and L. SKALA, « 18th International conference on Statistical Physics » (Berlin, 1992).

#### CONFÉRENCES DONNÉES PAR P. NOZIÈRES

Budapest, 11 septembre 1991 : « The surface of crystals : roughening transition and surface melting ».

Les Diablerets (Suisse), 23 au 25 septembre 1991 : Six conférences sur le « Modèle de Hubbard », (Paramagnons, localisation, approximation de Gutzwiller).

Grenoble, 29 novembre 1991 : « Propriétés d'un liquide de Fermi avec des interactions de portée finie ».

Grenoble 17 janvier 1992 : « Effet Kondo quadrupolaire ».

Grenoble, février-mars 1992 : Huit conférences sur « l'Ansatz de Bethe », reprenant en partie les leçons faites à Paris.

Aix-La-Chapelle, 22 avril 1992 : « Multichannel Kondo effect ».

Santa Barbara (US), Institute of Theoretical Physics, 1<sup>er</sup> mai 1992 : « The Khodel-Shagynian state of Fermi liquids ».

San José (US), IBM Laboratories, 4 mai 1992 : « Some recent developments in the physics of surfaces and crystal growth ».

Rutgers University (US), 9 mai 1992 : « Fermi liquids with long range interactions : can one trust Hartree-Fock approximations ? ».

#### DISTINCTIONS

P. NOZIÈRES a été nommé Membre étranger de l'American Academy of Arts and Sciences (Boston).