

Physique statistique

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

Cours : « *Résultats et conjectures sur les liquides quantiques en interaction forte* »

Le comportement des systèmes de particules fortement corrélées est un sujet « chaud », où une analyse critique des divers modèles théoriques manque cruellement. L'objet de ce cours était de faire le point sur deux problèmes bien précis

— La transition isolant-conducteur dite « de Mott ».

— Les conditions à remplir pour un éventuel *déconfinement* du spin et de la charge.

Ces questions sont difficiles et les réponses apportées restent partielles. La dimension d'espace joue un rôle crucial (on sait que $d = 1$ est un cas pathologique, la limite $d = \infty$ l'est peut-être aussi !). La possibilité d'états anormaux sans aucune rupture de symétrie est une éventualité fascinante, mais nullement démontrée. Dans un problème aux multiples facettes les facteurs déterminants sont rarement identifiés.

Face à une littérature théorique considérable, souvent très formelle, le cours s'est attaché à souligner les concepts fondamentaux, dans un langage aussi simple que possible, en apportant un éclairage qualitatif pour mieux cerner les problèmes. A ce niveau la comparaison avec l'expérience est prématurée : il s'agit de *comprendre* un mécanisme et non d'interpréter tel ou tel supraconducteur à haute température. La question reste importante, car elle soulève des points conceptuels essentiels. En bref il s'agit, par une réflexion à voix haute, d'exposer ce que l'on ne comprend pas et de poser les bonnes questions.

1 - Comportement standard des liquides quantiques de bosons et de fermions

C'est le domaine du « problème à N corps », en principe bien compris, malgré des hypothèses et approximations cachées discutables. Pour en faire la critique il faut d'abord un état des lieux.

a - Liquides de Bose

L'état fondamental présente la « condensation de Bose Einstein », une fraction finie n_0 des particules occupant le même état quantique. Ce dernier est unique, non fragmenté : c'est la conséquence directe de l'énergie d'échange entre les bosons. Une telle cohérence interne entraîne le blocage de phase des fonctions d'onde, responsable de la superfluidité. Si les bosons ont un degré de liberté interne, celui-ci devient macroscopique.

Les interactions entre particules créent des fluctuations quantiques qui vident en partie le condensat. Cette « déplétion » n'affecte pas la superfluidité tant qu'elle est partielle (à l'ordre le plus bas elle est décrite par l'approximation de Bogoliubov). La question est de savoir si elle peut devenir totale, fabriquant ainsi un liquide de Bose *normal*. Le problème n'est pas une simple curiosité : dans la mesure où des bosons à cœur dur sur réseau sont isomorphes à un système de spins 1/2, un tel liquide correspond à un fondamental magnétique *singulet* sans rupture de la symétrie de translation. On retrouve l'état « RVB » conjecturé par P.W. Anderson. Le liquide de Bose est son avatar le plus simple.

b - Liquides de Fermi

L'archétype est connu : surface de Fermi englobant un nombre d'états égal au nombre de particules (théorème « de Luttinger »), excitations de basse énergie à base de paires particule-trou, signature thermodynamique sans ambiguïté. Les interactions ne font que « renormaliser » les paramètres sans changer notablement le comportement qualitatif. Le paramètre essentiel est la « constante de renormalisation » z , mesurant le poids de la quasiparticule dans la densité spectrale $\text{Im}G$ et définissant une échelle d'énergie zE_F en dessous de laquelle le comportement est celui du gaz dégénéré habituel. Le comportement ne devient pathologique que dans deux cas :

(i) Si $z = 0$ on évolue vers un état incohérent *localisé*.

(ii) Si la vitesse de Fermi v_F change de signe, l'état dégénéré devient contradictoire. Cette situation, étudiée par Khodel et Shagynian, reste très mal comprise. Elle est heureusement peu vraisemblable.

Les complications interviennent en général par rupture spontanée d'une symétrie du problème, conduisant à une transition de phase. Les exemples abondent : ferromagnétisme, ondes de densité de charge ou de spin, supraconductivité. Ils sont bien compris et ne posent pas de questions de principe.

c - Anomalies en 1 dimension

Elles sont de plusieurs origines, qui conspirent pour modifier radicalement le comportement à basse température, mais qu'il faut bien distinguer :

(i) Un mode mou avec un spectre $\omega(q)$ linéaire présente une *divergence logarithmique* des fluctuations de point zéro : la rupture d'une symétrie continue est impossible. L'exemple type est le liquide de Bose : les phonons de point zéro

brouillent la phase du paramètre d'ordre et conduisent à une loi de puissance $G(r) \sim r^{-n}$ (il n'y a plus de condensat). Un argument thermodynamique élémentaire exprime l'exposant n à l'aide de la vitesse du son et de la raideur de phase (non triviale en l'absence d'invariance galiléenne). Ce résultat exact est en général obtenu dans le cadre élaboré d'un Ansatz de Bethe.

(ii) La surface de Fermi est *discrète*, se réduisant à deux points $\pm k_F$: l'élargissement géométrique des paquets d'onde dû à la moyenne angulaire disparaît. Pour un spectre $\omega(q)$ linéaire la conservation de q implique celle de l'énergie dès lors qu'on reste du même côté de la mer de Fermi : les quasiparticules sont dégénérées avec leurs configurations excitées — d'où une répulsion des états, un élargissement de la densité spectrale et la destruction des quasiparticules. Concrètement cela traduit un *déconfinement* du spin et de la charge, chacun avançant à sa propre vitesse, v_σ et v_ρ , modifiée par les interactions. Les excitations élémentaires deviennent des « spinons » et « holons », avec une physique radicalement différente.

(iii) Enfin le couplage entre les deux bords de la mer de Fermi conduit à une accumulation de divergences logarithmiques, engendrant des lois de puissances pour toutes les fonctions de corrélation physiques. La discontinuité de la population n_k au niveau de Fermi disparaît. Tous les exposants dépendent de la force des interactions.

Toutes ces anomalies disparaissent si $d > 1$; les conjectures selon lesquelles elles pourraient persister pour $d = 2$ ne semblent pas devoir être retenues.

2 - Transition métal-isolant d'un gaz électrons-trous

À l'origine l'argument qualitatif de Mott concernait un gaz d'atomes d'hydrogène. Le problème est identique pour un gaz d'excitons dans un semiconducteur. Lorsque leur distance a est très supérieure au rayon de Bohr a_0 , les entités neutres restent liées : l'état est isolant. Si en revanche $a \leq a_0$, les paires se recouvrent et s'ionisent — on passe à un état conducteur. Dans l'image de Mott l'ionisation était due à un *effet d'écran*, réduisant l'attraction coulombienne responsable de la liaison. Cet effet existe, mais le calcul de Mott est trop rustique : l'effet d'écran n'est pas simple aux densités intermédiaires (on passe continûment d'un régime Debye-Huckel à une interaction de van der Waals). De toute manière il faut aussi tenir compte du principe d'exclusion qui interdit l'accumulation de fermions individuels dans un même point de l'espace réciproque. Pour l'instant il n'existe aucune théorie traitant de façon cohérente ces deux effets couplés.

a - Transition du premier ordre

Une transition de Mott franche n'intervient qu'à $T = 0$. À température finie tous les corps sont conducteurs par ionisation thermique (faible en dessous de la température de Saha mais bien réelle). La transition de Mott est alors progressive (le gap est un concept flou dans la mesure où il est hybridé avec l'excitation des

porteurs libres thermiques). La seule possibilité de discontinuité est l'existence d'une transition *du premier ordre*, toujours permise et se terminant inévitablement à un point critique C. Une telle transition a été observée expérimentalement dans deux cas :

(i) Dans un semiconducteur comme le germanium on peut créer des porteurs transitoires par pompage optique ; une déformation élastique permet de les confiner et de contrôler la densité N et la température T. Les différents états sont identifiés par le spectre de luminescence. On observe ainsi *deux* transitions de phase dans le plan (N,T) :

— La séparation liquide-gaz bien connue entre la « goutte » de plasma et une vapeur diluée de porteurs (pilotée par l'énergie d'échange). Près du point critique C_1 la densité des deux phases varie conformément au modèle de Landau, $\pm (T_c - T)^{1/2}$.

— Une transition de Mott entre un plasma et une phase d'excitons, avec un point critique C_2 inhabituel où la différence de densités ($N_1 - N_2$) varie comme $(T_c - T)^{3/2}$. Ce point de rebroussement est très marqué.

(ii) Une transition de Mott du premier ordre a été observée dès 1973 dans l'oxyde de vanadium V_2O_3 . On peut construire un diagramme d'états très riche dans le plan (température, concentration d'impuretés Cr ou Ti). A basse température la transition métal isolant est masquée par un ordre antiferromagnétique. Au dessus de 200°K la discontinuité de conductivité est spectaculaire. Elle disparaît au point critique vers 400°K. La nature de la transition est un peu ambiguë, car elle s'accompagne d'une déformation structurale et l'on ne sait pas très bien quel est l'effet primaire.

Les données sur le germanium posent des questions de fond. Une transition secondaire du même type avait été imaginée par Landau et Zeldovich dès 1944 (pour le mercure), mais avec deux points critiques de même nature. Ici le comportement près de C_2 suggère très fortement que la transition est pilotée par une autre variable inconnue x, la densité N n'étant qu'une variable secondaire couplée à x par les non linéarités. C'est ce que confirme un calcul élémentaire généralisant la théorie de Landau. Les couplages les plus bas couplant une variable secondaire stable y à la variable critique x sont du type gy^2x et $g'yx^2$: combinés ils donnent précisément le comportement $(y_2 - y_1) \sim (T_c - T)^{3/2}$ observé expérimentalement. La question est alors immédiate : quelle est la variable x dans le germanium ? En d'autres termes quelle est la quantité physique dont les fluctuations divergent au point critique C_2 ? Si la transition de Mott s'accompagnait d'une rupture de symétrie, par exemple une déformation de réseau ou une condensation de Bose Einstein des excitons, on pourrait toujours arguer que c'est elle la coupable — x serait alors le paramètre d'ordre associé à cette symétrie brisée. Mais cela n'a rien d'évident : la rupture de symétrie peut très bien être un effet secondaire. De toute manière dans le germanium il n'y a pas de rupture de symétrie visible ! Alors d'où vient la transition ? Bizarrement la réponse reste inconnue ! On n'a toujours pas identifié le véritable paramètre d'ordre de la

transition métal-isolant ! Vraisemblablement les fluctuations critiques doivent être cherchées dans le *bruit électrique*, mais la situation n'est pas celle d'un circuit multistable habituel, comme une diode Esaki : ici la caractéristique reste *linéaire*, et c'est la pente de la courbe $I(V)$ qui doit fluctuer. De toute manière la résistivité est un effet dissipatif alors que la transition est thermodynamique : le problème reste ouvert !

Oubliant cette question on peut se demander d'où provient la *multistabilité* responsable de la transition du premier ordre : là encore la réponse n'est pas évidente. Un modèle naïf couple le gap Δ à la densité de porteurs libres N_f : de toute évidence N_f dépend de Δ , lequel dépend de N_f via l'effet d'écran. On explique ainsi qualitativement la transition du premier ordre et le point critique — mais le modèle demande à être creusé !

b - Caractérisation d'un conducteur ou d'un isolant

Pour identifier la variable critique il faut d'abord préciser ce que l'on entend par « conducteur ». Si étrange que cela puisse paraître cette définition n'est pas évidente ! Une possibilité séduisante est de caractériser un conducteur par *l'effet d'écran* : le champ d'une impureté chargée décroît exponentiellement sur une longueur caractéristique λ_D . Cela impose une densité d'états finie au niveau de Fermi, excluant d'emblée tout gap dans le spectre des excitations de charge. Séduisant, certes, car c'est le modèle canonique de Bloch, mais la localisation d'Anderson par le désordre est un contre exemple évident ! Elle préserve des états au niveau de Fermi, avec une compressibilité $\partial N/\partial \mu$ finie — et pourtant on a un isolant ! L'explication réside dans l'aspect dynamique : il ne suffit pas d'avoir des états où mettre la charge d'écran venue de l'infini, il faut encore l'amener en un temps raisonnable ! L'absence de gap est une condition nécessaire pour un conducteur, mais pas suffisante.

Pour éviter cet écueil il faut faire intervenir des considérations temporelles, ou mieux invoquer la *sensibilité aux conditions aux limites* ; Si par exemple on applique un flux magnétique Φ dans un anneau de longueur L les fonctions d'onde sont déphasées d'un angle θ quand on fait un tour complet. Pour un conducteur les corrections sont d'ordre $1/L$ (responsables par exemple du diamagnétisme orbital). Pour un isolant elles décroissent exponentiellement. Ce critère dit « de Thouless » est bien posé, mais il n'éclaire guère la nature physique de la transition ! En l'absence d'impuretés on pourrait caractériser la « raideur de phase » d'un état conducteur par le poids α de la conductivité de Drude, $\sigma = i\alpha/\omega$: cette définition, souvent utilisée, est illusoire car la rupture de la symétrie de translation joue un rôle essentiel. Le paramètre d'ordre d'une transition de Mott franche à $T = 0$ reste donc une construction abstraite : il n'est même pas établi qu'une telle transition puisse exister sans rupture de symétrie cachée.

c - Condensation de Bose Einstein des excitons

C'est l'exemple type où l'état isolant à $T = 0$ est lié à la rupture de la symétrie de jauge. Pour un système isotrope on sait construire une fonction d'onde de type BCS qui interpole entre les deux limites diluée et dense. Dans la limite diluée le gap Δ représente l'énergie de liaison d'excitons « atomiques », la condensation de Bose n'étant qu'une correction surimposée. Dans la limite dense, au contraire, la liaison est un effet coopératif dû à la rupture de symétrie. La différence est patente si l'on considère la température critique T_λ . Dans le premier cas la superfluidité disparaît par mouvement de centre de masse de paires qui restent liées ($T_\lambda \ll \Delta$), dans le second les paires sont brisées ($T_\lambda \approx \Delta$). L'évolution d'un régime à l'autre est continue, mais les deux limites ont une physique très différente.

L'état coopératif BCS est très sensible aux anisotropies de bande : l'appariement est alors en compétition avec l'occupation d'un état d'électron *ou* de trou. La généralisation de BCS est inhabituelle mais sans problème : elle conduit à une transition de Mott à $T = 0$ où l'ouverture du gap est pilotée par la condensation de Bose. En suivant le fondamental par continuité jusqu'à la limite atomique, une conclusion simple émerge : l'existence d'un *isolant de Mott sans rupture de symétrie* est la même question que celle d'un *liquide de Bose normal* à $T = 0$, sans superfluidité.

Une dernière remarque concerne l'équilibre de création des paires électron-trou. Jusqu'à présent nous avons supposé $N_e = N_h = N$ fixé. Dans un semiconducteur cela n'est vrai que si l'on opère plus vite que le temps de recombinaison. Sinon N s'ajuste pour avoir le même niveau de Fermi. On engendre ainsi la transition métal-isolant élémentaire par croisement de bandes. La condensation de Bose correspond alors à une hybridation spontanée de la bande de valence et de la bande de conduction due aux interactions. C'est particulièrement clair dans le cas d'un gap direct : l'hybridation des deux bandes pour un même vecteur d'onde k lève la dégénérescence au point de croisement — d'où le gap et l'état isolant ! Pour un gap indirect il y a formation de surstructures.

3 - Transition métal-isolant dans le modèle de Hubbard

C'est le modèle canonique, avec répulsion locale U entre particules de spins opposés et saut t entre premiers voisins, assurant une *symétrie électron-trou* parfaite (quelle que soit l'aimantation $M = N_\uparrow - N_\downarrow$). La limite du couplage faible est relativement bien comprise : on a un liquide de Fermi habituel sauf pour une bande demi pleine ($n = N/N_L = 1$) : en ce cas l'emboîtement parfait de la surface de Fermi entraîne l'apparition d'ondes de densité de spin (SDW), si faible soit la répulsion. Une transformation électron-trou sur un seul spin permet de relier cette instabilité magnétique à l'instabilité supraconductrice dans le cas attractif.

La limite du couplage fort est elle aussi simple pour une bande demi pleine. Les fluctuations de charge sont alors interdites et le comportement basse tempé-

rature est celui de spins de Heisenberg couplés par superéchange. Le fondamental est de nouveau antiferromagnétique, avec une évolution continue depuis l'état SDW en couplage faible. La situation est beaucoup moins claire si $n < 1$: le mouvement des trous perturbe alors l'état de spin et leur comportement est plus ou moins incohérent. La difficulté est de séparer les trois échelles d'énergie du problème, U (fluctuations de charge), t (énergie cinétique) et $J = t^2/U$ (fluctuations de spin).

Le vrai problème est d'interpoler entre ces deux limites : c'était l'objet des travaux de pionnier de Hubbard en 1965. Ceux-ci sont fondés sur une factorisation de la self énergie, qui donne par construction le bon résultat dans la limite « atomique » $U \gg t$. On interpole ainsi entre $U = 0$ et $U = \infty$. Les détails techniques sont ingrats : on reproduit correctement la séparation des états en deux sous bandes de « Mott-Hubbard » séparées de U , décrivant la propagation sur des sites vides ou au contraire occupés par des particules de spin opposé (l'image est celle d'un alliage !). On explique bien l'ouverture d'un gap Δ pour les excitations de charge. En revanche le comportement singulier des porteurs libres près de la transition de Mott est complètement occulté. En outre on ignore complètement l'ordre magnétique : on rate deux des échelles d'énergie sur trois !

a - Approximation de Gutzwiller

Elle prend le chemin inverse et s'attache à décrire la disparition des fermions libres près de la transition de Mott. Elle oublie ainsi toutes les fluctuations de charge — et bien sûr, elle aussi, les degrés de liberté magnétiques ! De ce fait il ne reste rien dans l'état isolant : l'hamiltonien est devenu identiquement nul ! Concrètement l'approximation est fondée sur un Ansatz variationnel (la fonction d'onde des fermions libres est réduite d'un facteur constant chaque fois qu'un site est doublement occupé), complété par une approximation de calcul un peu douteuse (élimination de toute corrélation intersite et factorisation de la matrice densité). Une formulation équivalente, plus à la mode, consiste à introduire sur chaque site des bosons fictifs correspondant à chacun des quatre états possibles : l'état de ces bosons caractérise les corrélations. Mais bien sûr la description est violemment redondante : il faut des contraintes pour retrouver l'espace de Hilbert réel — les bosons sont « esclaves » ! Le plus simple est de traiter ces contraintes en champ moyen : elles sont respectées *en moyenne dans l'espace et dans le temps*. Au prix de quelques ambiguïtés (la définition des bosons esclaves n'est pas unique), on retrouve l'approximation de Gutzwiller, avec un petit avantage : le décompte des états physiques est plus facile. Mais cette approximation est manifestement très mauvaise. Les fluctuations spatiales et temporelles des contraintes introduisent en chaque site des degrés de liberté imaginaires qui faussent la physique. La méthode des bosons esclaves, qui à première vue semblait une manière compliquée de faire des choses simples, a au moins cette vertu de mettre le doigt sur les faiblesses de l'Ansatz de Gutzwiller ! En principe elle permet aussi d'aller au delà du champ moyen en traitant les fluctuations à l'ordre

le plus bas dans une approximation RPA (une telle amélioration est impossible dans le cadre variationnel). En étudiant les fluctuations de charge et de spin on retrouve les deux échelles d'énergie U (séparation des bandes de Mott) et J (échange antiferromagnétique). Mais là aussi la formulation est ambiguë et pas totalement convaincante.

Au bout du compte l'approximation de Gutzwiller fournit des fermions libres avec une amplitude de saut réduite zt . Le facteur z est le seul paramètre du problème : la transition de Mott correspond à $z=0$. Le gros avantage de la méthode est sa simplicité. Elle se prête à des calculs explicites dans les situations les plus variées, bande demi pleine ou dopée, avec ou sans aimantation.

(i) Pour une bande demi pleine non aimantée on obtient $z = 1-u^2$, où $u = U/U_c$. La transition de Mott se produit pour une interaction critique U_c , pour laquelle la bande de fermions libres caractérisant l'état conducteur *disparaît sur place*. La largeur et le nombre d'états, tous deux d'ordre z , tendent vers 0 (la densité d'états $\rho(z)$ s'obtient par une simple homothétie, $\rho(\omega) = \rho_0(\omega/z)$: sa valeur au niveau de Fermi est constante). Ce modèle très séduisant est qualitativement différent des modèles de type croisement de bande : il apparaît une nouvelle échelle d'énergie zt qui s'annule à la transition — un « mode mou » critique. Noter que ρ est la densité d'états des particules *nues* — la densité d'états des *quasiparticules*, responsable de la chaleur spécifique, est ρ/z , corrigée par la constante de renormalisation temporelle. On a bien des fermions *lourds* au niveau de Fermi, avec une forte entropie. Il reste un paradoxe mal compris : comment peut-on construire un grand nombre de quasiparticules à partir d'un petit nombre zN de particules nues ? La réponse est probablement que la quasiparticule rassemble sur un état cohérent unique un grand nombre d'états incohérents, « visités » sur une échelle de temps longue. On évite ainsi les problèmes de comptage (comme dans l'effet Kondo des alliages concentrés). Mais cette argumentation est bien vague : il reste beaucoup à faire pour comprendre l'aspect « cohérence temporelle » !

(ii) Dans l'état conducteur la susceptibilité magnétique est de type Pauli. La théorie prédit un abaissement de la transition de Mott sous champ, et surtout une *transition métamagnétique* (vers un état saturé à $T=0$). Ce métamagnétisme a longtemps constitué un test de la localisation dans un liquide de Fermi : il n'est pas observé dans ${}^3\text{He}$ et la situation est aujourd'hui moins claire.

(iii) Pour une bande dopée, $n = 1-\delta$, le facteur z est toujours fini, mais la physique est inhabituelle lorsque $u > 1$. Le système « se souvient » qu'il aimerait être isolant. z est proportionnel au dopage δ : les trous sont des fermions « lourds ». On sait ainsi décrire tout le plan (δ, u) .

Le bilan de cette approximation de Gutzwiller est mitigé. On rend bien compte des porteurs libres et de leur disparition à U_c . Mais les degrés de liberté de spin sont restés en plan : on ignore l'ordre magnétique. Pire encore on trouve une entropie $\text{Log}4$ par site dans l'état isolant à $T=0$, alors qu'elle serait au plus $\text{Log}2$ en l'absence d'ordre. Ce résultat absurde vient du fait que l'on a aussi raté les fluctuations de charge, dont l'échelle d'énergie est U . L'approximation apparaît

donc complémentaire de celle de Hubbard, qui met l'accent sur la séparation des bandes par fluctuation de charge. Ce qui manque, c'est une *synthèse* des deux, incorporant sur un pied d'égalité la bande étroite de fermions libres et les bandes satellites de Mott, séparées par un gap. Une telle synthèse est vitale pour comprendre le comportement à $T \neq 0$: pour calculer l'entropie il faut bien compter les états !

Plus généralement, l'approximation de Gutzwiller fournit une transition de Mott franche *sans aucune rupture de symétrie* : c'est la question fondamentale posée depuis le début de ce cours ! Pour l'instant la réponse est malheureusement un artefact des approximations ? Dans la mesure où ni Hubbard, ni Gutzwiller ne savent traiter les degrés de liberté magnétiques, on est bien incapable de dire si l'ouverture d'un gap de charge (c'est-à-dire l'état isolant) implique un ordre antiferromagnétique ou non !

b - Transition de Mott dans une bande proche de la saturation magnétique

On considère une bande demi pleine pour laquelle $N_{\downarrow} = N_{\uparrow} - N_{\downarrow} \ll N_{\uparrow}$. Les spins \downarrow dilués sont en première approximation bien séparés. Le plus simple est d'en considérer *un seul*, dans un réseau constitué de sites \uparrow simplement occupés. Ce spin \downarrow peut « s'ioniser » en un site vide (0) et un site ($\uparrow\downarrow$), mais cela coûte une énergie U : les deux sites s'attirent ! Un problème à deux corps est soluble exactement. Si l'attraction crée un état lié le fondamental est un *isolant* (le gap est simplement l'énergie de liaison de la paire). Sinon la séparation des charges est spontanée et le système est un *conducteur* — la transition de Mott devient transparente. Noter que l'énergie du mouvement de centre de masse est minimale en coin de zone, et non pas au centre comme c'est l'habitude.

En une dimension l'état lié existe toujours : le fondamental est toujours isolant. Le calcul explicite est facile — par exemple celui des densités spectrales. Le cas $d = 2$ est marginal (le gap est exponentiellement petit en couplage faible). Dans le cas réaliste $d = 3$ la liaison apparaît au delà d'un seuil U_c — d'où une transition de Mott continue, la gap Δ variant comme $(U - U_c)^2$ au voisinage du seuil. Dans tous les cas de figure la paire liée a un rayon d caractéristique tel que l'énergie cinétique de localisation soit comparable à l'énergie de liaison (théorème du viriel), c'est-à-dire $d \approx a(t/\Delta)^{1/2}$, où a est la maille du réseau. Cette échelle caractéristique se retrouve sur le déphasage $\delta(k)$ qui varie sur une gamme $k \approx 1/d$.

Le problème se complique si la densité N_{\downarrow} est finie. Tant que $N_{\downarrow} d^3 \ll 1$, les paires liées se recouvrent peu et s'ignorent pour l'essentiel : le fondamental reste isolant. Si en revanche les paires se recouvrent ($k_{F\downarrow} d \geq 1$), l'argument de Mott joue à plein : la liaison est détruite, du fait de l'effet d'écran et du principe d'exclusion. La multiplication des spins \downarrow décale la transition de Mott vers les grands U . Le problème est identique à celui des semiconducteurs pompés, les sites (0) et ($\uparrow\downarrow$) jouant respectivement le rôle des trous et des électrons. Les deux limites $U \ll U_c$ et $U \gg U_c$ sont simples, mais la région de transition est compliquée

— on ne sait même pas démontrer l'existence d'une transition franche ! L'ouverture du gap dans la densité spectrale reste incomprise, tout comme l'existence d'une éventuelle résonance.

Comme les excitons les paires liées sont des bosons, soumis à une condensation de Bose. Ces bosons ont un spin 1 (on remplace deux spins \uparrow par des entités de spin 0), et ils forment un condensat cohérent en coin de zone : ceci n'est autre qu'un ordre antiferromagnétique transverse (SDW), superposé à la polarisation magnétique de départ. Cet ordre est l'équivalent de l'ordre superfluide des excitons. Ici encore la physique est simple dans deux limites :

(i) Si $N_d d^3 \ll 1$ l'ordre magnétique est une complication mineure qui n'a rien à voir avec la liaison. Le gap Δ est un effet atomique qui existe même en l'absence de condensation de Bose (concrètement, $T_N \ll \Delta$).

(ii) Si $N_d d^3 \gg 1$ le fondamental serait un *conducteur paramagnétique* en l'absence d'ordre SDW. En revanche si cet ordre existe il devient un *isolant antiferromagnétique* — on retrouve une transition métal isolant, mais pour une raison complètement différente : le gap est dû à la *réflexion de Bragg* des porteurs sur la surstructure magnétique, et non plus à des corrélations locales. La condensation de Bose, c'est à dire le magnétisme, devient le facteur central : c'est elle qui crée le gap, comme en témoigne le fait que $T_N \approx \Delta$. L'évolution est la même que pour des supraconducteurs, avec passage d'un régime atomique (gap et superfluidité découplés) à un régime coopératif (gap piloté par l'ordre superfluide). L'analogie est complète et les formalismes BCS sont identiques.

La seule question est l'existence de l'ordre SDW. Pour un modèle de Hubbard il existe toujours, si faible soit U , la surface de Fermi étant parfaitement emboîtée quelle que soit l'aimantation. Mais on peut compliquer le modèle en introduisant de la « frustration », par exemple des sauts entre seconds voisins qui brisent la symétrie électron-trou. La généralisation du formalisme BCS à ce régime est inhabituelle, mais sans difficulté. On constate que l'ordre SDW apparaît au delà d'une interaction minimum U_c , pour laquelle on a une transition « métal para — isolant antiferro ». En jouant sur la frustration on peut placer U_c dans le régime « réflexion de Bragg » ou dans le régime atomique. Dans le premier cas la description BCS de la transition de Mott est bonne — dans le second elle est très douteuse, car on donne à la structure magnétique un rôle qu'elle ne mérite peut-être pas. A noter qu'on peut aussi traiter ce problème d'un système aimanté dans le cadre d'une approximation de Gutzwiller : les résultats sont mauvais, soulignant les faiblesses de cette approximation.

c - Un isolant de Mott sans rupture de symétrie est-il possible ?

Un état de Hubbard isolant est toujours antiferromagnétique. L'ordre magnétique est mineur en couplage fort, mais il est toujours présent. Une autre possibilité pour une bande demi pleine est un état isolant où les spins s'apparient en dimères singulets sur deux sites voisins. L'invariance par rotation des spins est alors assurée, mais un pavage régulier du plan rompt la symétrie de translation : on ne

sait plus d'où vient le gap — rupture des dimères ou réflexion de Bragg ? Une question de fond émerge : peut-on rétablir l'invariance translationnelle sans casser les paires, par une superposition cohérente des pavages de dimères ? Si c'est le cas, on garde un isolant *sans réflexion de Bragg* — l'isolant de Mott à l'état pur !

On évoque souvent la chaîne 1d comme exemple, puisque son fondamental est un isolant singulet de spin. Mais l'exemple est factice : il existe en fait un ordre antiferromagnétique local, qui se perd à longue distance par rotation progressive des spins. Les fluctuations de point zéro font décroître les corrélations comme une loi de puissance $x^{-\alpha}$ (l'exposant α est relié simplement aux paramètres thermodynamiques). On se convainc facilement que cette décroissance *lente* suffit à produire une réflexion de Bragg totale, c'est-à-dire un gap franc dans le spectre des excitations élémentaires. Qualitativement, le spin d'un fermion incident « suit » adiabatiquement l'aimantation alternée locale : les ondelettes réfléchies sont en phase et une réflexion de Bragg *cohérente* se développe, bien qu'il n'y ait pas d'ordre gelé à grande distance. Sur un plan plus formel l'ouverture du gap est due à la divergence des fonctions de réponse à $2k_F$.

d - Effets de commensurabilité

L'état isolant de Mott se produit pour une bande demi-pleine, $n = 1$. Le même résultat peut s'obtenir pour un remplissage fractionnaire, avec formation d'une onde de densité dont la période est commensurable avec celle du réseau sous-jacent. L'exemple le plus simple est la chaîne de fermions sans spin avec $n = 1/2$. Les degrés de liberté magnétiques ont disparu et il n'y a plus de symétrie continue. En revanche il peut apparaître une onde de charge, où un site sur deux est préférentiellement rempli — d'où une réflexion de Bragg qui divise la zone de Brillouin par 2 et rétablit un gap. Le problème est isomorphe à une chaîne de spins 1/2 anisotrope, dont on connaît la solution exacte, due à Kosterlitz et Thouless. Le gap, caractéristique de l'état isolant, apparaît au delà d'une interaction seuil U_c , au dessous de laquelle le fondamental est conducteur. Dans ce dernier cas la réflexion de Bragg est détruite par la présence de parois *localisées* (du fait de la symétrie discrète du réseau).

4 - La limite des dimensions infinies

Elle est très féconde, car une grande coordinance conduit naturellement à une notion de « champ moyen » généralisée. On voit ainsi apparaître une transition de Mott sans ordre magnétique, ce qui semble régler la question posée plus haut. En fait cette conclusion repose sur une limite bien définie, où l'on fait tendre d'abord la dimension d vers l'infini, puis la température vers zéro. La réalité est bien sûr inverse : il subsiste donc des zones d'ombre. Il reste que cette analyse en dimension infinie est extrêmement instructive : elle fait émerger des concepts physiques originaux.

Le point de départ est un modèle de Hubbard standard, avec une intégrale de saut t entre premiers voisins et une interaction U locale. Si l'on ignore les interactions, la densité d'états dans la limite $d = \infty$ est pour l'essentiel une gaussienne de largeur $t^* = t\sqrt{2d}$, avec des queues très faibles qui s'étendent jusqu'à $\pm 2dt$. Pour préserver l'échelle d'énergie cinétique il faut faire tendre d vers l'infini en maintenant t^* constant. Les queues étant des artefacts du modèle, on les néglige en remplaçant la gaussienne par une bande à bords francs de largeur t^* (on peut, si l'on veut, incorporer des sauts entre seconds voisins, responsables de la frustration de spin). A noter que cette même limite préserve aussi l'échelle d'énergie magnétique : l'échange d'Anderson entre premiers voisins $J = 4t^2/U$ est d'ordre $1/d$ — mais l'énergie par site d'un état antiferromagnétique est dJ , d'ordre 1, donc physiquement significative.

Le propagateur $g_{ij}(\omega)$ en l'absence d'interactions se calcule facilement. Pour une bande demi pleine non aimantée le système présente une symétrie électron-trou parfaite : le propagateur *local* $g(\omega)$ est alors impair, une propriété qui facilite beaucoup les calculs (cette symétrie disparaît pour un système aimanté, les deux spins ayant des niveaux de Fermi différents). On vérifie que $g(\omega)$ est d'ordre 1 alors que le propagateur entre deux sites voisins est d'ordre $1/\sqrt{d}$.

a - Interactions et localisation de la self énergie

Le propagateur complet $G_{ij}(\omega)$ fait maintenant intervenir une self énergie $\Sigma_{ij}(\omega)$ qui à l'ordre le plus bas correspond à l'excitation d'une paire particule-trou par la particule incidente. Si $i = j$, tous les propagateurs internes sont d'ordre 1, et donc Σ l'est aussi. Si en revanche i et j sont voisins, les trois lignes internes sont non locales et Σ_{ij} est d'ordre $1/d^{3/2}$; la correction correspondante à l'équation de Dyson est d'ordre $1/d$, négligeable. Cette discussion se généralise à un diagramme quelconque : la conclusion est *qu'en dimension infinie la self énergie est locale*. C'est une fonction $\Sigma(\omega)$ définie sur un site unique.

Plus généralement la self énergie S peut toujours s'exprimer à l'aide de « diagrammes squelettes », dans lesquels tous les propagateurs g internes sont remplacés par des propagateurs entièrement renormalisés G . Cette relation, en général non locale, devient locale si $d = \infty$: $\Sigma_{ii}(\omega)$ est une fonctionnelle de $G_{ii}(\omega')$. Les excursions dans le monde environnant restent bien sûr essentielles dans le calcul du propagateur individuel G_{ii} (c'est là qu'est l'information sur la largeur de bande) — en revanche la probabilité que deux particules parties du site i se rencontrent ailleurs est négligeable en dimension infinie : *les excursions n'induisent aucune corrélation supplémentaire sur le site de départ*. On se ramène à un problème à un site, uniquement temporel.

En pratique la mise en œuvre de ce programme implique une projection systématique sur le site considéré. A cet effet on définit deux self énergies

- (i) L'une, déjà connue, $\Sigma(\omega)$ qui traduit l'effet des interactions

(ii) L'autre $\sigma(\omega)$ qui traduit les excursions dans le monde extérieur et qui s'exprime facilement à l'aide de $G(\omega)$ (avec quelques subtilités car l'excursion ne doit jamais repasser par le site de départ !).

(Lorsque $U \gg t^*$ les excursions sont négligeables : on retrouve la limite atomique où G est simplement une moyenne sur les deux configurations de spin du fondamental). Dans le cas général, deux attitudes sont possibles :

— ou bien traiter les excursions exactement et développer en puissances de U : c'est l'esprit des diagrammes squelettes.

— ou bien incorporer $\sigma(\omega)$ dans un propagateur effectif local $\mathcal{G}_0 = [\omega + \sigma(\omega)]^{-1}$. On définit ainsi un lagrangien effectif \mathcal{L} , combinaison de $1/\mathcal{G}_0$ et de l'interaction nue U (les excursions n'induisent aucune corrélation locale entre spins \uparrow et \downarrow). Ce lagrangien est strictement local, mais *retardé*.

Cette seconde attitude est la bonne, car elle se prête à une solution par itération. On part d'un \mathcal{G}_0 arbitraire. Si l'on sait traiter la dynamique de \mathcal{L} par une méthode ad hoc, on peut calculer le propagateur G , donc σ et \mathcal{G}_0 . On boucle le calcul jusqu'à atteindre une convergence. Le progrès conceptuel est considérable, même si la diagonalisation de \mathcal{L} reste une étape délicate, en général franchie par simulation numérique.

Dans la mesure où l'on se ramène à un seul site le problème est équivalent à un modèle d'impureté d'Anderson, où une orbitale locale, dotée d'une interaction U , est hybridée avec un bain extérieur de fermions fictifs. La différence essentielle est qu'ici ce bain de fermions est déterminé de façon self consistente. Alors que pour l'effet Kondo classique la densité d'états présente *deux* échelles d'énergie, la largeur Δ de la résonance et la température Kondo T_K , ici Δ s'ajuste pour produire *une seule* échelle d'énergie. Cette échelle Δ s'annule à la transition de Mott : le comportement près de la transition est universel !

Il est instructif de situer cette procédure par rapport aux approximations de champ moyen classiques, en prenant comme exemple le langage du magnétisme. Au départ on cherche à caractériser l'influence du milieu environnant sur le site i par un « champ de cavité » B_i (fluctuant) en négligeant les corrélations entre sites voisins. B_i est déterminé en fin de course par une relation de fermeture qui assure la self consistence. L'approximation la plus naïve est de remplacer B_i par sa moyenne absolue, sur les états et sur le temps — c'est le champ moléculaire de Weiss. Une première amélioration est de corrélérer B_i à l'état du site i : on garde la moyenne temporelle mais B_i est différent selon que le spin i est \uparrow ou \downarrow — c'est la notion de champ de réaction d'Onsager. Ici nous allons encore plus loin en incluant les fluctuations temporelles : nous ignorons seulement les corrélations *spatiales* — une approximation justifiée en dimension infinie. Mais le prix à payer est lourd : du fait des fluctuations temporelles le problème devient quantique : il faut traiter en détail la dynamique du site i dans le champ $B_i(t)$!

La méthode la plus directe est une résolution de l'équation de Schrödinger de type Monte Carlo quantique (QMC), fondée sur une discrétisation du temps : cela n'est efficace qu'à température relativement élevée. Une alternative plus écono-

mique en temps machine mais moins fiable est une « diagonalisation exacte » (ED) d'un modèle tronqué où le spectre de $\sigma(\omega)$ est réduit à quelques pôles discrets (l'espace de Hilbert a une dimension finie). A chaque étape on corrige la fréquence et le poids desdits pôles — mais pour cela il faut projeter sur le modèle de départ, ce qui est quelque peu ambigu. L'avantage est qu'on descend plus facilement à basse température. Ces deux méthodes numériques sont en accord raisonnable dans leur domaine commun de validité — mais elles sont lourdes ! D'où l'intérêt de méthodes approchées, moins contrôlables mais plus simples, par exemple les « perturbations itérées » (ITP), où la self énergie d'interaction S est calculée au second ordre en U avec le \mathcal{G}_0 self consistant. Cette approximation naïve s'avère exacte en couplage fort (lorsque $M = 0$) : on peut la voir comme une méthode d'interpolation.

b - Résultats numériques pour une bande demi-pleine non aimantée

Nous nous intéressons d'abord aux états paramagnétiques, sans aucune rupture de symétrie. L'énergie d'échange d'un tel état désordonné est d'ordre $J\sqrt{d}$ c'est-à-dire $1/\sqrt{d}$: on peut l'ignorer en dimension infinie (bien sûr il existe aussi des états ordonnés antiferromagnétiques d'énergie $Jd \approx 1$: les deux possibilités sont également respectables).

Considérons la densité d'états $\pi\rho(\omega) = \text{Im}G(\omega)$ et limitons nous d'abord à l'état fondamental $T = 0$. Le plus simple est de partir du couplage fort : dans la limite atomique ($t^* = 0$), ρ se réduit à deux pics discrets d'énergies $\pm U/2$. Si t^* augmente les pics s'élargissent, mais en maintenant un *gap franc de Mott-Hubbard* $\delta \approx U - 2D$ où $2D$ est la largeur de bande. Si l'on suit cet état isolant par continuité on constate que le *gap* $\delta(U)$ s'annule pour une interaction critique $U_{c1} \approx 2,15D$. En dessous on retrouve un état conducteur.

On peut aussi partir du couplage faible. Au départ ρ est la densité d'états de la bande nue, de largeur $2D$. Lorsque U augmente, ρ se creuse en $\omega = 0$ et très vite se dégage un pic étroit, de largeur $\Delta(U)$ décroissante. Δ s'annule pour une interaction critique $U_{c2} \approx 3,2D$. Le niveau de Fermi est au milieu de ce pic central : on a donc un état conducteur. Quelques commentaires s'imposent :

— Le pic central se raccorde continûment aux bandes de Mott latérales : la largeur Δ n'est donc pas définie avec précision. Mais près de la transition $\Delta \ll \delta$: le fond continu est très faible et l'incertitude sur Δ disparaît. Le pic central se détache parfaitement au milieu des deux bandes de Mott.

— La symétrie particule-trou implique $\Sigma(0) = 0$: la densité d'état ρ est inchangée au niveau de Fermi. Le pic central contient donc un nombre d'états $z \approx \rho_0 \Delta$ qui tend vers zéro à U_{c2} : contrairement aux modèles de croisement de bandes, les porteurs libres *disparaissent sur place au milieu du gap* δ .

— Lorsque $\Delta \ll \delta$ le profil du pic central est indépendant de U . Cette *universalité* est normale dans la mesure où une échelle d'énergie Δ se détache nettement des autres.

— On constate que $U_{c1} < U_{c2}$: dans la région intermédiaire le système est *multistable*, avec coexistence d'un état conducteur et d'un état isolant. A température nulle l'énergie la plus basse correspond toujours à l'état conducteur : le palier de Maxwell est à U_{c2} .

Tous ces résultats s'interprètent naturellement dans le langage du modèle d'Anderson. Le site étudié est un doublet de spin qui s'échange avec le bain extérieur, d'où un écrantage magnétique par effet Kondo. Dans l'état conducteur il y a de la densité d'états au niveau de Fermi et l'effet Kondo se poursuit jusqu'à un fondamental singulet, liquide de Fermi traditionnel avec une constante de renormalisation $z \approx \Delta/D$ (la distribution n_k conserve une discontinuité z au niveau de Fermi). Dans l'état isolant, au contraire, $\rho(0) = 0$: on ne peut pas lever la dégénérescence de spin et chaque site reste un doublet dans l'état fondamental. Un état paramagnétique a une dégénérescence 2^N . La distribution n_k traduit les fluctuations quantiques des deux bandes de Mott : elle est continue et n'a rien à voir avec de quelconques porteurs libres.

Le comportement à température finie est encore plus riche. L'état isolant a une entropie magnétique finie et donc est favorisé à $T \neq 0$: le palier de Maxwell se déplace vers l'isolant et rejoint les deux spinodales U_{c1} et U_{c2} à un point critique (T_c, U_c) . Au niveau de la densité d'états $\rho(\omega)$ on constate que la largeur Δ du pic central de fermions libres dépend peu de T , mais que son *amplitude* décroît rapidement. Cela montre clairement que l'apparition de ce pic central au milieu d'un gap δ bien formé est dû à un effet de *cohérence*. L'agitation thermique détruit cette cohérence et supprime purement et simplement les fermions libres, renvoyés dans les bandes latérales de Mott.

La limite $d = \infty$ est donc très féconde. Elle réalise une synthèse des approximations de Hubbard (qui traitait bien les bandes latérales mais ratait complètement le pic de fermions libres) et de Gutzwiller (qui décrivait bien le rétrécissement de la bande de fermions mais ignorait les fluctuations de charge responsables des bandes latérales). Par delà les détails de calcul, elle se résume dans le comportement des deux énergies caractéristiques $\delta(U)$ et $\Delta(U)$. Le point essentiel est que Δ (fermions libres) disparaît alors que *le gap δ est déjà bien formé*. C'est là l'origine de la multistabilité et du point critique. C'est cette question qu'il faut comprendre pour maîtriser l'origine de la transition métal-isolant.

c - Ordre antiferromagnétique et diagramme d'état

A ce niveau le calcul ignore toujours l'échelle d'énergie magnétique J (à cet égard il n'est pas meilleur que Hubbard ou Gutzwiller). On peut incorporer J en incluant dans le calcul numérique un ordre antiferromagnétique. On construit ainsi un diagramme d'états qui résume la compétition entre transition de Mott et ordre magnétique. Les principales conclusions sont les suivantes :

— Pour un réseau non frustré le fondamental est antiferro quel que soit U . La température de Néel, calculée numériquement elle aussi, est supérieure à la température critique de la transition de Mott. Celle-ci est donc masquée par

l'ordre magnétique, qui joue le rôle essentiel (modèle de Slater). On passe directement d'un isolant antiferro à un métal paramagnétique.

— Si le système est frustré la température de Néel diminue : on fait ainsi émerger le point critique de Mott dans la région paramagnétique — d'où une transition de Mott du premier ordre pure. (A noter qu'il peut exister un état antiferromagnétique *métallique*, dû au gonflement de la surface de Fermi et observé récemment dans V_2O_3). Mais dans tous les cas étudiés le fondamental conserve un ordre magnétique.

La question de fond demeure donc ouverte : un véritable isolant de Mott sans rupture de symétrie est-il possible ?

d - Propriétés thermodynamiques

Dans l'état isolant chaque site conserve une dégénérescence de spin — d'où une entropie résiduelle $\text{Log}2$ à $T = 0$. Cette entropie évolue vers $\text{Log}4$ à haute température, avec un démarrage exponentiel $\approx \exp[-\delta/T]$. Dans l'état conducteur, au contraire, l'entropie résiduelle est neutralisée par l'effet Kondo : S passe de 0 à $\text{Log}2$ sur une échelle de température d'ordre Δ . A basse température on retrouve un liquide de Fermi avec une chaleur spécifique linéaire $\approx 1/\Delta$: les porteurs libres près de la transition de Mott sont des « fermions lourds » ! La chaleur spécifique présente *deux pics* : l'un d'échelle Δ est dû aux fermions libres, l'autre d'échelle δ traduit les fluctuations de charge des bandes latérales. On mesure ainsi le progrès par rapport à Gutzwiller, qui rate entièrement l'échelle haute : l'entropie saute alors directement de 0 à $\text{Log}4$ sur l'échelle Δ , ce qui est manifestement faux.

Ce comportement est bouleversé dès qu'apparaît un ordre antiferro. En ce cas il n'y a pas d'entropie résiduelle à $T = 0$ et l'on passe de 0 à $\text{Log}2$ sur une échelle d'énergie fixée par l'échange J . L'effet Kondo disparaît dès lors que $J \gg \Delta$.

L'image d'un effet Kondo mérite quelques commentaires. Elle pose en effet un problème de fond : comment écranter N spins avec une bande centrale de fermions qui ne contient que $Nz \ll N$ états ? Le problème se posait déjà pour les « alliages Kondo » contenant une forte concentration d'impuretés magnétiques. Ici il est crucial puisque $z \rightarrow 0$ à la transition. Il est hors de question de fabriquer des singulets indépendants « 1 spin-1 fermion libre » : une alternative est d'utiliser le même fermion pour écranter plusieurs spins. L'image physique est alors nouvelle : un spin donné est « visité » par de nombreux fermions — chacun le fait tourner d'un petit angle — au bout d'un temps τ cette « diffusion angulaire » a couvert la sphère et « isotropisé » le spin. On reconstruit ainsi un singulet, mais par un effet d'écran *collectif et local* (la moyenne est temporelle). Cette question reste pour l'instant très floue.

On peut de même calculer la susceptibilité magnétique. Il faut pour cela distinguer deux cas :

(i) La susceptibilité locale traduit la réponse à un champ appliqué *sur un seul site*. Dans l'état isolant $\Delta = 0$ on doit avoir une loi de Curie dont le coefficient

fournit la grandeur du moment localisé (bien entendu cette loi de Curie disparaît dès que l'on tient compte de l'échange). Dans l'état conducteur, $\chi \sim 1/\Delta$.

(ii) La susceptibilité macroscopique fournit la réponse à un champ *uniforme*. L'échange entre sites voisins devient alors significatif même si $d = \infty$: tous les voisins sont polarisés dans le même sens et leur effet est cumulatif. On obtient une loi de Curie-Weiss, avec une susceptibilité finie à $T = 0$, d'ordre $1/J$, *qui ne diverge pas à la transition de Mott* (contrairement à la chaleur spécifique). Tout cela est confirmé par le calcul numérique. On peut calculer le rapport de Wilson $\chi T/C_v$ en fonction de l'interaction U . On peut même étudier les fortes aimantations : on constate qu'il n'y a pas de métamagnétisme, contrairement aux prédictions de l'approximation de Gutzwiller, et en accord avec les données expérimentales sur ^3He .

e - Difficultés et essai d'interprétation

Dans un premier stade la discussion peut rester phénoménologique. On part de la densité d'états $\rho(\omega)$, on construit $G(\omega)$ par une transformation de Hilbert et on en déduit la self énergie $\Sigma(\omega)$. La discussion est simple lorsque la symétrie particule-trou est valable, c'est-à-dire si $M = 0$.

— Dans l'état conducteur les bandes de Mott et le pic central donnent chacun leur contribution à ρ et G . La partie « liquide de Fermi » domine près de $\omega = 0$, et devient négligeable au delà de $\omega^* = [\Delta^2 \delta D]^{1/4}$. Dans la région de transition G passe par 0 et Σ a un pôle, dont la signification physique n'est pas claire.

— Dans l'état isolant $G(\omega)$ est strictement réel à l'intérieur du gap δ . La symétrie entraîne $G(0) = 0$: Σ a un pôle à l'origine.

Dans la mesure où $\Delta \ll \delta$ le pic de densité d'états à l'origine a un profil *universel*, fonction de la seule variable réduite ω/Δ . Le profil calculé numériquement n'est pas tout à fait semicirculaire, mais presque. Bien entendu la phénoménologie ne peut rien dire à ce niveau.

Revenant au cas isolant, l'existence d'un pôle de Σ à l'origine pose un problème de fond qui remet en question toute cette analyse en $d = \infty$. En principe $\text{Im}\Sigma$ a une réalité physique : c'est la densité d'états des configurations « excitées », contenant n trous et $(n + 1)$ particules. S'il existe un gap franc δ , ces configurations ont un seuil : la densité spectrale à $\omega = 0$ doit être nulle, en contradiction avec le calcul précédent ! La réponse, subtile, repose sur le fait que le fondamental du site étudié est ici un *doublet* magnétique. Il faut alors définir deux propagateurs G_\uparrow et G_\downarrow , correspondant aux deux composantes de ce doublet. Le calcul perturbatif traditionnel les traite séparément. G_\uparrow (G_\downarrow) s'exprime à l'aide d'une self énergie Σ_\uparrow (Σ_\downarrow). Σ_\uparrow et Σ_\downarrow ont le comportement habituel, sans pôle à l'origine. La fonction de Green globale G est la *moyenne* de G_\uparrow et G_\downarrow , avec un poids égal pour les deux composantes du doublet : dans cette moyenne on perd la physique d'un simple propagateur. On peut exprimer G à l'aide d'une self énergie Σ , mais celle-ci n'est qu'une construction mathématique dont la densité spectrale n'a pas de sens.

S'il faut définir séparément G_r et G_l , alors l'hypothèse de base du modèle d'Anderson équivalent s'effondre : chaque site garde la mémoire de son spin et les excursions dans le monde environnant induisent des corrélations supplémentaires. Il faut en fait comparer deux temps :

— le temps de retournement du site local $\tau_s = \hbar/\Delta$

— le temps de relaxation τ_r des voisins, d'autant plus long que d est élevé.

Les corrélations induites sont négligeables si $\tau_s \ll \tau_r$. La conclusion est qu'il faut veiller à ne pas interchanger les limites $\Delta \rightarrow 0$ et $d \rightarrow \infty$. Vraisemblablement le calcul précédent n'est pas exact dans l'état isolant. Dans l'état conducteur il doit exister un changement de régime lorsque $\tau_s \sim \tau_r$: tel qu'il est le calcul ne décrit que l'un des versants de cette transition. Sur l'autre versant l'instabilité magnétique devient probablement essentielle : il n'est pas clair que l'entropie résiduelle de l'isolant ait un sens !

Ces difficultés n'affectent pas la description de l'état conducteur, pour lequel on peut développer une interprétation à base d'effet Kondo très instructive. On part du modèle d'Anderson équivalent et on élimine les bandes latérales de Mott par un calcul de perturbation au second ordre : d'où le nom de « méthode projective » (sur les états centraux) utilisé par Kotliar. Le site étudié est un doublet magnétique, hybridé au pic de fermions libres du monde extérieur. Par une transformation de type Schrieffer Wolff on construit un hamiltonien Kondo : les fermions extérieurs sont soumis sur le site choisi (« impureté ») à des potentiels effectifs, scalaire V_e et d'échange J_e (à ne pas confondre avec l'échange entre deux sites voisins, d'ordre $1/d$). V_e fixe la position de la résonance dans le gap : il est nul par symétrie si $M = 0$. L'échange J_e est antiferromagnétique et conduit à un blocage Kondo du spin. La nouveauté est le caractère self-consistent du problème : on réinjecte la solution du problème Kondo dans le calcul de Δ .

A première vue le couplage J_e est $\approx t^{*2}/U \approx D$ — mais c'est oublier la normalisation ! Le pic central ne contient que $z \approx \Delta/D$ états : l'échange J_e est réduit de ce même facteur z . On comprend alors pourquoi le gap δ est déjà bien formé quand le pic central apparaît. Partant de l'isolant, l'apparition de z états près de $\omega = 0$ coûte une énergie « cinétique » $z\delta$. Mais ces états sont éligibles pour écranter les spins — d'où un gain d'énergie dans l'état fondamental $3J_e/4 \approx \Delta$. Le pic central apparaît lorsque le bilan est positif, c'est-à-dire si $\delta < D$: *le gap est fini à la transition*. On a même un mécanisme de saturation naturel : plus on met d'états dans le pic central, plus il repousse les bandes de Mott. Le gap δ augmente (cette évolution est manifeste dans la région $U_{c1} < U < U_{c2}$, où les deux phases coexistent). Le pic central sature lorsque le bilan devient défavorable. Noter aussi que tous les états de spin sont également peuplés lorsque la température T est d'ordre Δ : on perd l'énergie d'échange et le pic central disparaît sur place, conformément aux calculs.

Cette explication est séduisante, mais elle est pour l'instant vague. (De toute manière la présence d'un gap fini à la transition de Mott reste contestée !). Le mécanisme demande à être confirmé — par exemple en étudiant l'évolution de

la transition de Mott en fonction de l'aimantation M . Près de la saturation nous avons vu que c'était une transition par croisement de bande classique. On doit passer au régime Kondo quand l'énergie Zeeman μB est comparable à $J_e \approx \Delta$.

Il existe diverses tentatives pour décrire le voisinage de U_{c2} « à la Landau », fondées sur un calcul de Σ au second ordre en U . Les approximations sont douteuses et les résultats ne sont pas très convaincants.

f - Bilan de la limite $d = \infty$

Le résultat principal est l'existence d'une transition de Mott franche à $T = 0$ sans aucune rupture de symétrie. La transition est du premier ordre. Mais la description du versant isolant reste douteuse : il n'est pas sûr que ce résultat ne soit pas la conséquence d'une limite mal prise. Près de la transition les états de fermions libres disparaissent sur place, dans un gap préformé, avec un profil de bande universel (une seule échelle d'énergie Δ). La multistabilité semble due à un effet de type Kondo, qui vient se greffer sur le mécanisme de croisement de bandes usuel — d'où la difficulté du problème !

5 - Ordre magnétique à $T = 0$ et déconfinement

L'isolant paramagnétique précédent est un état *incohérent*, conservant une dégénérescence 2^N . Nous avons vu qu'à température nulle cet état était masqué par un ordre antiferromagnétique. Le gap δ est alors une compétition entre corrélations de Mott et réflexion de Bragg : le point essentiel est la rupture de la symétrie de translation (qui peut aussi provenir d'une dimérisation en paires singulet gelées sur le réseau).

Une autre possibilité est un fondamental paramagnétique *cohérent*, non dégénéré — l'état « RVB » suggéré par Anderson. Cet état va faire émerger un concept révolutionnaire : le déconfinement du spin et de la charge dans les excitations élémentaires. Avant d'en arriver là il faut d'abord savoir si cet état existe : le plus simple est de considérer un ensemble de spins $1/2$ sur un réseau.

a - Fondamental d'un modèle de Heisenberg

Sans frustration le fondamental est toujours antiferromagnétique. Un échange entre second voisins favorise la formation de paires singulet (dans la chaîne linéaire de Majumdar-Gosh, $J_1 = 2J_2$, cet état dimérisé est exact). Mais il reste à rétablir l'invariance de translation, c'est-à-dire à *paver l'espace avec une superposition cohérente de dimères où toutes les liaisons sont équivalentes*. On veut en outre un état *local*, sans ordre à longue distance : les dimères doivent avoir une portée finie ! Le plus simple est de les prendre entre premiers voisins.

L'existence d'un tel état n'a jamais été prouvée. Il est impossible en 1d, la « parité » des sites ayant une mémoire infinie. En 2d on sait compter le nombre

de configurations pavant le plan avec des dimères premiers voisins. On peut en faire une superposition cohérente, mais on ne sait pas si les corrélations ont une portée finie. De toute manière le vrai test serait un calcul des excitations élémentaires. On sent bien celles qui impliquent la rupture d'un dimère en spins libres — elles ont sûrement un gap ! Les plus intéressantes seraient les modes collectifs où l'on change la phase des dimères sans les briser : on ne sait ni les décrire, ni les compter ! Au total on peut raisonnablement supposer qu'un état RVB a toujours des corrélations de portée infinie.

Un certain nombre de formulations approchées affirment le contraire. Anderson, par exemple, propose une fonction d'onde très simple qui a toutes les symétries voulues. Le modèle de Heisenberg est remplacé par un modèle de Hubbard avec $U = \infty$. Le fondamental est décrit comme un condensat de Bose de paires singulet avec une fonction d'onde interne ϕ_{ij} ajustable. Le tout est assorti d'un projecteur de Gutzwiller P_G qui élimine les sites doublement occupés. L'invariance par translation est assurée si ϕ_{ij} ne dépend que de la distance $(i-j)$. D'emblée cet Ansatz pose des problèmes : l'état est-il normalisable ? Quel est le sens physique du blocage de phase lié à la condensation de Bose (ϕ_{ij} est un paramètre d'ordre) ? On ne connaît pas les réponses ! De toute manière on ne sait traiter le projecteur P_G qu'en moyenne : la contrainte de simple occupation se réduit à une simple annulation de la largeur de bande effective des fermions ! L'espace de Hilbert est alors violemment redondant et les résultats suspects.

Il suffit maintenant de traiter l'interaction en champ moyen — comme il n'y a plus d'énergie cinétique, c'est pour le moins douteux ! On trouve une grande variété de solutions, souvent équivalentes du fait des symétries internes du problème. Tout cela n'est pas très fiable. L'existence d'un état RVB de portée finie reste un problème ouvert.

- *Le problème du déconfinement*

Considérons une chaîne antiferromagnétique de spins 1/2 et retournons un spin (« magnon » de spin 1). Les deux liaisons parallèles ainsi réalisées peuvent se séparer : le magnon se dissocie en deux *spinons*, parois de Bloch séparant des régions d'ordres antiferro A et B opposés. En 1d ces spinons s'ignorent dès qu'ils sont éloignés : le spin 1 s'est spontanément *déconfiné* en deux entités de spin 1/2. Le même mécanisme fonctionne pour une chaîne dimérisée : si l'on excite une paire singulet dans l'état triplet les deux spins parallèles peuvent se séparer : le spinon est alors un spin célibataire. Noter que la séparation des deux spinons implique le renversement de l'alternance des liaisons sur la chaîne.

Revenons au cas antiferro, éventuellement avec un échange anisotrope, $J_z \neq J_\perp$. L'argument précédent est trop naïf car il ignore les fluctuations quantiques. Du fait de l'échange J_\perp celles-ci peuvent créer des paires spinon-antispinon, qui modifient le spectre des excitations. Dans le cas $J_z > J_\perp$ ces corrections sont mineures et l'idée de spinon localisé (avec un gap) est correcte. Si en revanche

$J_z \leq J_\perp$ le fondamental a une dégénérescence de rotation continue : la paroi de Bloch s'étale à l'infini et perd son sens (une rotation de 180° n'a pas de rôle particulier). Il reste que le décompte des états est inchangé : *les excitations élémentaires sont toujours des spinons*, mais avec une image physique beaucoup moins transparente. (Dans la solution exacte fondée sur l'Ansatz de Bethe le magnon est indicé par *deux* nombres quantiques, qui correspondent aux moments des deux spinons sous-jacents).

Les fluctuations quantiques ont un autre effet, crucial : elles détruisent l'ordre antiferromagnétique à longue distance. Lorsque $J_z \leq J_\perp$ l'orientation de l'aimantation alternée tourne lentement (les fonctions de corrélation décroissent comme des lois de puissance et les exposants se calculent comme ceux du gaz de Bose). Si $J_z > J_\perp$ seule la symétrie de translation est brisée : il suffit alors de faire passer un spinon de point zéro de gauche à droite d'un point M pour la rétablir.

Un déconfinement analogue se retrouve dans la chaîne de Hubbard. Créons par exemple un trou dans une bande demi-pleine avec un ordre antiferro local : le trou sépare deux spins parallèles. On peut le dissocier en un spinon et un *holon* qui n'affecte pas l'alternance des spins. Le spinon transporte le spin sans charge, le holon la charge sans spin : *on a déconfiné le spin et la charge* — une petite révolution ! (Le même effet existe dans un état dimérisé : le holon est alors un site vide). Ce déconfinement se voit aussi dans un cadre perturbatif, les perturbations de charge et de spin avançant à des vitesses différentes u_p et u_σ . On sait calculer ces vitesses quel que soit U grâce à l'Ansatz de Bethe. En couplage fort l'énergie caractéristique d'un holon est cinétique, d'ordre D, alors que celle des spinons est d'ordre J.

Au total le phénomène de déconfinement est une caractéristique de tous les systèmes 1d — d'où la question évidente : qu'en reste-t-il si $d = 2$? La réponse est « rien » s'il y a une rupture de symétrie, antiferromagnétique ou cristallisation de dimères. En effet la séparation de deux spinons, ou d'un spinon et d'un holon, crée alors une *paroi* entre les deux entités, séparant deux régions d'ordres différents. Cette paroi a une énergie, créant un « potentiel de confinement » proportionnel à la séparation ℓ . La formation d'un état lié est inévitable : spin et charge restent ensemble. Ce mécanisme est déjà apparent sur deux chaînes de Heisenberg couplées : le rayon de confinement est un compromis entre énergie cinétique de localisation et énergie de paroi (ici l'échange entre les deux chaînes). Noter qu'un tel verrouillage n'interdit pas une lente rotation de l'aimantation alternée — à condition que les deux chaînes tournent *ensemble*.

La seule manière de sauver le déconfinement, c'est de supprimer l'énergie de paroi, c'est-à-dire la rupture de symétrie : on retombe ainsi sur l'état RVB. La portée ξ des corrélations joue alors un rôle essentiel. Si la distance ℓ entre spinon et holon est inférieure à ξ la paroi n'a pas perdu sa « mémoire » : un potentiel de confinement V existe. En revanche, si $\ell > \xi$ ce potentiel *sature* : à condition

qu'il n'y ait pas d'état lié, spin et charge peuvent se séparer (si les corrélations avaient une portée infinie, le confinement serait difficilement évitable !).

Un éventuel déconfinement à $T = 0$ se réduit donc à l'existence d'un fondamental isolant RVB sans rupture de symétrie. Nous avons vu qu'un tel état restait hypothétique. En fait le déconfinement augmente les fluctuations quantiques et par conséquent s'oppose à toute forme d'ordre. Le problème se mord alors la queue : il faut tuer la rupture de symétrie pour avoir déconfinement, et il faut du déconfinement pour tuer la rupture de symétrie. La réponse à ces questions couplées n'est pas claire !

La situation est différente à température finie, car la physique est alors localisée sur une longueur d'onde de de Broglie λ . Si $\lambda < \ell$, le reconfinement ne se produit pas : les spinons et holons constituent de nouveau le langage naturel pour décrire la réponse du système. C'est probablement là le domaine d'application le plus fécond de ces concepts, dans une gamme de températures intermédiaires entre l'échelle d'échange et l'échelle cinétique.

6 - Conclusion

Tout ce cours a tourné autour d'un unique problème : la transition métal isolant de Mott induite par les corrélations. Plus précisément, quelle est la physique d'un tel isolant pour une bande demi-pleine ? Cet isolant peut-il exister à $T = 0$ sans rupture de symétrie ? Derrière cette question se profile tout le problème du déconfinement spin-charge.

Pour l'instant il n'y a pas de réponse définitive. Nous avons essayé de cerner les questions en évitant les spéculations fondées sur des approximations non contrôlées. L'analyse en $d = \infty$ plaide pour un isolant de Mott paramagnétique, mais elle pose des problèmes de fond. Dans l'état actuel de nos connaissances, il semble que la rupture de symétrie à $T = 0$ soit inévitable. Paradoxalement, le comportement à température finie est plus riche. La notion d'isolant perd alors son sens, mais les concepts développés à $T = 0$ sont peut-être plus pertinents que le liquide de Fermi canonique. C'est probablement là que spinons et holons peuvent être observés. Les travaux à venir devraient se développer dans cette direction — et bien sûr s'étendre aux systèmes dopés, à peine effleurés ici. Dans un cas comme dans l'autre, c'est à température finie qu'il faut rechercher un « non liquide de Fermi ».

P. N.

SÉMINAIRE

30 janvier — Michele FABRIZIO, SISSA Trieste. « *Properties of two leg ladders of interacting fermions* ».

ACTIVITÉS SCIENTIFIQUES

P. NOZIÈRES anime le groupe de physique théorique de l'Institut Laue Langevin à Grenoble, auquel sont venus s'adjoindre les théoriciens de l'ESRF (Laboratoire du rayonnement synchrotron). L'ensemble comprend une douzaine de physiciens confirmés qui effectuent des séjours de durée limitée, de un à cinq ans, et qui travaillent dans des domaines très divers. Le groupe constitue un pôle d'attraction important, vers lequel convergent de nombreux visiteurs étrangers. Un séminaire théorique est organisé chaque semaine, couvrant tous les thèmes de la physique de la matière condensée. Environ cinquante séminaires ont été tenus pendant la dernière année académique.

En 1995-1996 l'activité du groupe ILL portait sur les sujets suivants :

— *Systèmes à une dimension* : Défauts dans les ondes de densité de charge et les supraconducteurs lamellaires, plasticité des réseaux de vortex (S. BRAZOVSKI)

— *Etats de Landau 2d* : Défauts topologiques dans une bande remplie, skyrmions (Y. BYCHKOV). Photoluminescence d'un cristal de Wigner (N. COOPER).

— *Fermions corrélés* : Comportement logarithmique d'un système 2d lorsque le niveau de Fermi est près d'une singularité de van Hove, écarts au liquide de Fermi (I. DZYLASHINSKI). Transition de Mott, absorption optique des chaînes de Peierls (F. GEBHARD).

— *Dissipation quantique* : Effet tunnel d'une impureté dans un cristal ionique, modèles spin-boson (A. WURGER). Système à deux états dans un métal, étude par renormalisation de la région de couplage intermédiaire (T. COSTI). Bruit de grenaille sur une jonction N-S mésoscopique (T. MARTIN).

— *Physique des surfaces* : Influence d'un courant électrique sur la stabilité d'une surface vicinale, effet Schwœbel. Nucléation de terrasses en croissance par jet moléculaire (A. PIMPINELLI).

L'activité personnelle de P. NOZIÈRES a porté sur les thèmes suivants :

1 - Frottement solide

Le modèle élaboré l'an dernier avec C. CAROLI est toujours à l'étude, en particulier en ce qui concerne l'interaction des pièges et les sauts en cascade. Un point a été étudié en détail, en collaboration avec A. TANGUY : la généralisation à une géométrie réaliste 2d (les pièges en contact ayant une portée finie dans les deux directions). Le problème est d'un intérêt plus général. Le mécanisme de l'hystérésis et des bifurcations du premier ordre, omniprésent en physique, est familier en 1d — il faut le transposer en 2d, ce qui n'est pas trivial.

Les paramètres du problème sont maintenant des vecteurs, \mathbf{p} pour le paramètre de contrôle, $\mathbf{r} = \mathbf{p} + \mathbf{u}$ après déplacement élastique \mathbf{u} . La nouveauté qualitative est la présence d'instabilités *transverses* qui permettent d'esquiver les limites spinodales, supprimant ainsi les sauts irréversibles. L'exemple extrême est le piège isotrope. En ce cas le point double de la courbe d'énergie $U(\mathbf{p})$ devient un point

conique isolé : la trajectoire l'évite toujours et l'hystérésis disparaît ! Pour le rétablir il faut introduire des anisotropies et étudier en détail la *matrice* de stabilité des différents états d'équilibre. En comparant pas à pas les espaces ρ et r , on peut préciser les régions de multistabilité, les limites spinodales et les sauts d'hystérésis. Cela demande du soin car il y a beaucoup de cas de figure — mais les résultats sont clairs.

2 - Singularités infrarouges dans les systèmes à deux niveaux

Cette étude est menée en collaboration avec A. ZAWADOWSKI et G. ZARAND, (Budapest). Dans un métal le saut d'un système à deux niveaux perturbe les électrons près du niveau de Fermi : d'où des singularités de type logarithmique et une possible disparition de l'effet tunnel. En général on traite cet effet tunnel à l'ordre le plus bas : les exposants ne sont pas renormalisés. Mais aux ordres supérieurs on engendre automatiquement un effet tunnel « assisté » par les électrons, qui démarre une évolution vers un régime de couplage fort. Cette difficulté n'a été soulevée que très récemment : l'étude en cours montre que les corrections correspondantes sont en général faibles (« sous dominantes »).

3 - Durée de vie et forme de raie des rotons dans ^4He

En réponse à une demande des expérimentateurs de l'ILL, la nature des collisions roton-roton a été précisée : elle affecte notablement la forme des raies et l'interprétation des résultats obtenus par diffusion inélastique de neutrons à haute résolution.

PUBLICATIONS

1) P. NOZIÈRES, « *Some comments on the Mott transition in metals and semi-conductors* », Annales de Physique, **20**, C2-417 (1995).

2) C. CAROLI, P. NOZIÈRES, « *Dry friction as a hysteretic elastic response* », **Physics of sliding friction**, NATO Advanced Science Institutes Series E311, B.N.J. PERSSON et E. TOSATTI éditeurs, Kluwer Academic Publishers 1995.

3) A. TANGUY, P. NOZIÈRES, « *First order bifurcation landscape in a 2d geometry : the exemple of solid friction* », soumis à Journal de Physique.

CONFÉRENCES DONNÉES PAR P. NOZIÈRES

Lyon, Ecole Normale Supérieure, 7 février 1996 : « *Frottement solide et hystérésis* ».

Budapest, Université technique, 17 mai 1996 : « *Comments and questions concerning the Mott metal-insulator transition* ».

Catane, Université, 10 juin 1996 : « *Bose Einstein condensation* ».

Catane, Université, 11 juin 1996 : « *Mott metal-insulator transition* ».